Cluster-assembled compounds comprising an all-metal antiaromatic subunit $Li_3Al_4^-$

Supporting Information.

Li-ming Yang, Chang-bin Shao, Yi-hong Ding*, Chia-chung Sun

State Key Laboratory of Theoretical and Computational Chemistry, Institute of Theoretical Chemistry, Jilin University, Changchun 130023, People's Republic of China

(E-mail: yhdd@mail.jlu.edu.cn; Fax: +86-431-88498026)

Full citations for ref 8:

8. Gaussian03 (RevisionA.1), M. J. Frisch, G. W. Trucks, H. B. Schlegel, G. E. Scuseria, M. A. Robb, J. R. Cheeseman, J. A. Montgomery, Jr., T. Vreven, K. N. Kudin, J. C. Burant, J. M. Millam, S. S. Iyengar, J. Tomasi, V. Barone, B. Mennucci, M. Cossi, G. Scalmani, N. Rega, G. A. Petersson, H. Nakatsuji, M. Hada, M. Ehara, K. Toyota, R. Fukuda, J. Hasegawa, M. Ishida, T. Nakajima, Y. Honda,O. Kitao, H. Nakai, M. Klene, X. Li, J. E. Knox, H. P. Hratchian, J. B. Cross, C. Adamo, J. Jaramillo, R. Gomperts, R. E. Stratmann, O. Yazyev, A. J. Austin, R. Cammi, C. Pomelli, J. W. Ochterski, P. Y. Ayala, K. Morokuma, G. A. Voth, P. Salvador, J. J. Dannenberg, V. G. Zakrzewski, S. Dapprich, A. D. Daniels, M. C. Strain, O. Farkas, D. K. Malick, A. D. Rabuck, K. Raghavachari, J. B. Foresman, J. V. Ortiz, Q. Cui, A. G. Baboul, S. Clifford, J. Cioslowski, B. B. Stefanov, G. Liu, A. Liashenko, P. Piskorz, I. Komaromi, R. L. Martin, D. J. Fox, T. Keith, M. A. Al-Laham, C. Y. Peng, A. Nanayakkara, M. Challacombe, P. M.W. Gill, B. Johnson, W. Chen, M.W. Wong, C. Gonzalez, J. A. Pople, Gaussian, Inc., Pittsburgh, PA, **2003**.

It should be pointed out that there are many literatures report the saddle-points in the text for the demonstration of their systemically and comprehensive consideration of various structures of the research systems, also the saddle-points are used to compare with the corresponding minima in energies, geometries and other properties.

For example, please see Refs: (a) H. J. Zhai, L. S. Wang, A. N. Alexandrova, A. I. Boldyrev, V. G. Zakrzewski, *J. Phys. Chem. A* **2003**, 107, 9319. (b) H. J. Zhai, L. S. Wang, A. N. Alexandrova, A. I. Boldyrev, *J. Chem. Phys.* **2002**, 117, 7917. (c) A. N. Alexandrova, A. I. Boldyrev, H. J. Zhai, L. S. Wang, E. Steiner, P. W. Fowler. *J. Phys. Chem. A* **2003**, 107, 1359. (d) A. N. Alexandrova, A. I. Boldyrev, H. J. Zhai, L. S. Wang, *J. Phys. Chem. A* **2004**, 108, 3509. (e) Exner, K.; Schleyer, P. v. R. *Science* **2000**, *290*, 1937. (f) Sung Soo Park, *Bull.*

Korean Chem. Soc. **2005**, *26*, 63. (g) R. M. Minyaev, V. I. Minkin, T. N. Gribanova, A. G. Starikov, *Heteroatom. Chemistry.* **2006**, *17*, 464. etc.

In this paper, we systemically and comprehensively consider various structures for six type of metals (M=Li, Na, K, Be, Mg and Ca). For the same type of structure, among the six type metal complexes, some metal complexes are minima, other metal complexes are saddle-points. For compare the results of different metal complexes, we listed the minima as well as the saddle-points in the text. So, for the homo- and hetero-decked sandwich-type complexes, we listed all minima as well as the comparative saddle-points in all Figs in SI. We show our heart-felt and sincerely thought and suggested that such arrangement is reasonable.

The section of the homo-decked sandwich-like complexes is presented as follows:

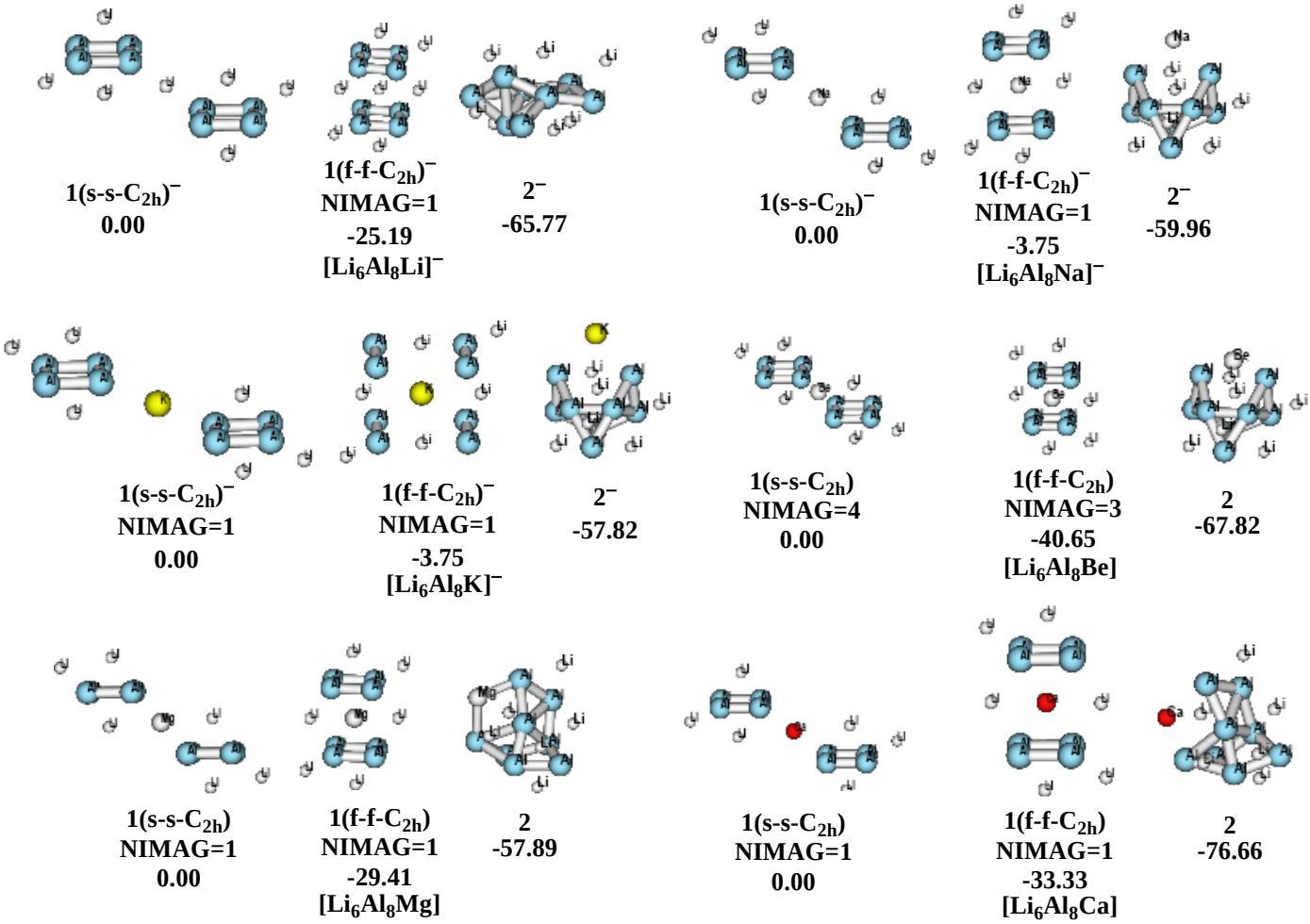
SI-A. Can metal-atoms effectively separate, protect, assemble and stabilize the all-metal antiaromatic $Li_3Al_4^-$ decks?

Firstly, we considered various interaction forms of cluster-assembled compounds. Only two interaction forms, i.e., the face (Al_4-ring)-face (Al_4-ring) (f-f) and side (Al-Al bond)-side (Al-Al bond) (s-s) sandwich-type interaction forms, could be formed sandwich-type compounds, i.e., **1(s-s-C2h)** and **1(f-f-C2h)**. Moreover, we considered various fusion isomers of $[Li_6Al_8M]^{q-}$ (M=Li, Na, K, q=1; M=Be, Mg, Ca, q=0) in various interaction types at the B3LYP/6-311+G(d) level. Some selected assembled complexes and low-lying structures are presented in SI-Figure 1, from which we can see that the sandwich-like isomers $(Li_3Al_4)M(Li_3Al_4)^{q-}$ (**Ho-M1^{q-}**, i.e., **1(s-s-C2h)**, **1(f-f-C2h)** in SI-Fig. 1) are energetically higher than the low-lying fusion isomers. Note that the notation **Ho-M1^{q-}** stands for the homo (**Ho**)-decked sandwich isomer (the deck is $Li_3Al_4^-$ unit). "**M**" means the core atoms and superscript "q–" means the charge of the total system. The final structures[13] could be one of the following situations, which happened during the geometry optimization, (1) A saddle point on the potential-energy surface (PES). (2) Only a local minimum with high energy on PES. (3) For M=K, the rectangular Al_4-ring is broken due to the large ionic interactions, larger atomic radii of K and symmetry constraints during the geometry optimization in the sandwich-type compound **1(f-f-C2h)$^-$** (see SI-Fig 1). (4) Many fusion isomers are energetically lower than the sandwich-type complexes. The antiaromaticity of rectangular Al_4-ring is destroyed in the fusion isomers. After symmetry constraints removed, the optimum minima are well-maintained, whereas, the saddle points fused together to form agglomeration.

Secondly, from SI-Figure. 1 we can see that the lowest-energy fusion isomers are energetically lower than the sandwich structures by 65.77, 59.96, 57.82, 67.82, 57.89 and 76.66 kcal/mol for M=Li, Na, K, Be, Mg and Ca, respectively. The sandwich structures are very energetically higher than many fusion isomers and are thus thermodynamically unstable. Additionally, our results generally agree well with the recent work of Pati et al.[5e] on the superclusters formed from the fusion of antiaromatic monomer Al_4^{4-}. The dimmers of all-metal antiaromatic molecules Al_4^{4-} form fused superclusters due to stronger Al-Al bond and in some cases the supercluster is so stable that the initial structure of the Al_4 ring is lost completely.

From the above discussion, we can see that the homo-decked assembled species are energetically higher than the fusion isomers. Moreover, any transformation of the sandwich species into low-lying fusion isomers is accompanied by a large energy release, thus the all-metal antiaromatic $Li_3Al_4^-$-based homo-decked assembled species are less likely due to their thermodynamical instability.

SI-Figure 1. Schematic energy profile for cluster-assembled species $[Li_6Al_8M]^{q-}$ (M=Li, Na, K, q=1; M=Be, Mg, Ca, q=0) obtained at the B3LYP/6-311+G(d) level. Energy values are in kcal/mol. Note that the 1(s-s-C_{2h}) structures are first, fourth, first, first saddle points for M=K, Be, Mg and Ca, respectively, and their energies are only used as energy references in SI-Fig. 1. For simplicity, the notations "Ho-M" for isomers are omitted.



SI-B. The mechanism of cluster assembly of all-metal antiaromatic cluster $Li_3Al_4^-$

Why the assembly and stabilization of $Li_3Al_4^-$ can only be realized in form of the "*hetero-decked sandwich*" scheme instead of the traditional "*homo-decked sandwich*" scheme? Why the "*homo-decked sandwich*" assembly would lead to fusion between two $Li_3Al_4^-$ decks? To answer these questions, let us analyze the mechanism of cluster assembly. Intuitively, the mono-anionic all-metal antiaromatic $Li_3Al_4^-$ bears both the fusion and ionic characters. From a combinational viewpoint, when the decks D_1^{m-} and D_2^{n-} and one M^{q+} ion are brought together, two types of reaction processes might take place, i.e.,

1) **ionic interaction**: $D_1^{m-}+M^{q+}+D_2^{n-}\rightarrow(D_1^{m-})M^{q+}(D_2^{n-})$

2) **fusion interaction**: $D_1^{m-}+D_2^{n-}+M^{q+}\rightarrow M^{q+}[D_1D_2]^{(m+n)-}$.

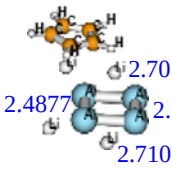
In process (1), each sandwiching deck (D_1^{m-} and D_2^{n-}) participate in the electrostatic interaction with M^{q+} to form a sandwich-like structure $(D_1^{m-})M^{q+}(D_2^{n-})$. In process (2), the

"clustering fusion" takes place. Principally, any two decks have the trend to form a more coagulated cluster containing more bonds so as to lower the system energy.

The competition between the processes (1) and (2) determines whether formation of a sandwich-like complex can lead to energetic stabilization or not. In the traditional "***homo-decked sandwich***" form, the fusion interaction overwhelms the ionic interaction because of the favorable cluster coagulation. The bonding within the all-metal antiaromatic $Li_3Al_4^-$ is not strong enough to prevent from fusion. So, as shown in sections **SI-A**, the homo-decked sandwich structures are energetically much less stable than the fused isomers. Yet situation is quite different in the novel "***hetero-decked sandwich***" form. The fusion tendency can be greatly suppressed due to the introduction of a rigid sandwiching partner Cp^-. The large organic aromaticity allows Cp^- to perfectly keep its (near) D_{5h} structure. Any fusion with $Li_3Al_4^-$ will destroy the aromaticity of Cp^- to greatly raise the system energy. As a result, only in the form of the novel "***hetero-decked sandwich***" scheme, can the hetero-doped all-metal antiaromatic $Li_3Al_4^-$ be assembled into sandwich-like complexes.

The above detailed analysis of the ionic and clustering interactions between the two decks is quite crucial to improve the insight and cognition on the nature and origin of the interactions of the "deck-core-deck" in the metallocenes. Such information is also important in understanding and designing novel sandwich-type complexes and cluster-assembled molecular compounds.

SI-Figure 2. The low-lying sandwich forms of $[CpM(Li_3Al_4)]^{q-}$ (M=Li, Na, K, q=1; M=Be, Mg, Ca, q=0) and the lowest-energy saturated sandwich forms of $(M^+)[CpM(Li_3Al_4)]^-$ (M=Li, Na, K) obtained at the B3LYP/6-311+G(d) level. Energy values are in kcal/mol. For some relevant species, The single points at the CCSD(T)/6-311+G(d)//B3LYP/6-311+G(d) (in italics in parentheses) levels are also given. "B(1)" denotes the interaction energies between $Li_3Al_4^-$ and CpM^{q+} or Al_4Li_2M and CpLi, whether the CpLi or CpM^{q+} is the dissociation fragments dependent on the metal-atoms close to the Cp fragment. "B(2)" denotes the interaction energies between Cp^- and $M(Li_3Al_4)^{q+}$ (M=Li, Na, K, q=0; M=Be, Mg, Ca, q=1). "C(0)", "C(1)" and "C(2)" denotes the natural charge distributions on the fragments Al_4, $Al_4Li_3M^{q+}$ (M=Li, Na, K, q=0; M=Be, Mg, Ca, q=1) and Cp, respectively. "B" denotes the interaction energies between CpM and $M(Li_3Al_4)$ in the saturated sandwich species (M=Li, Na and K). The Al-Al bonds of Al_4-ring are listed in Å of the designed cluster-assembled compounds. Fig 2a-c present geometrical parameters of the model compounds $[CpM(Li_3Al_4)]^-$, for M=Li, Na, K, respectively. Fig 2d presents geometrical parameters of the saturated compounds $(Li^+)[CpM(Li_3Al_4)]^-$ (M=Li, Na, K). Fig 2e presents geometrical parameters of the reference molecules $Li_3Al_4^-$ and Li_4Al_4. Fig 2f-h present geometrical parameters of $[CpM(Li_3Al_4)]$, for M=Be, Mg, Ca, respectively. For clarity, the Al-Al bond lengths of Al_4-ring are presented in blue color.



I⁻

0.00*(0.00)*

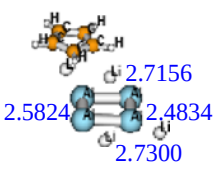
B1=26.22*(34.71)*

B2=65.46*(77.05)*

C(0)=-2.978

C(1)=-0.139

C(2)=-0.861



II⁻

0.68*(0.93)*

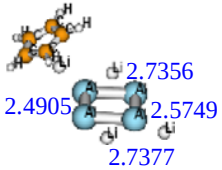
B1=25.54*(33.78)*

B2=62.69*(73.11)*

C(0)=-2.988

C(1)=-0.130

C(2)=-0.870



III⁻

3.56*(5.68)*

B1=22.66*(29.02)*

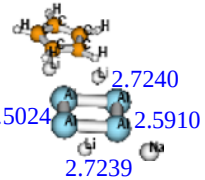
B2=59.82*(68.36)*

C(0)=-2.994

C(1)=-0.118

C(2)=-0.882

a) [CpLi(Al$_4$Li$_3$)]⁻



IV⁻

0.00

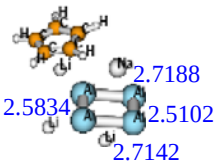
B1=24.87

B2=62.53

C(0)=-2.777

C(1)=-0.135

C(2)=-0.865



V⁻

3.68

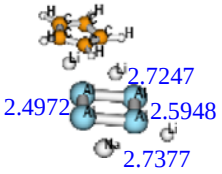
B1=25.20

B2=62.76

C(0)=-2.922

C(1)=-0.125

C(2)=-0.875



VI⁻

4.89

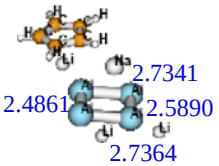
B1=24.83

B2=60.91

C(0)=-2.958

C(1)=-0.128

C(2)=-0.872



VII⁻

5.62

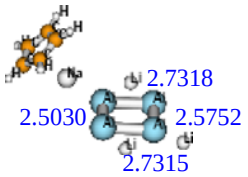
B1=23.26

B2=60.19

C(0)=-3.009

C(1)=-0.121

C(2)=-0.879



VIII⁻

15.17

B1=27.45

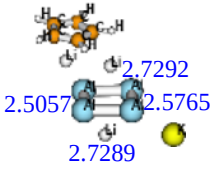
B2=47.36

C(0)=-3.021

C(1)=-0.070

C(2)=-0.930

b) [CpNa(Al$_4$Li$_3$)]⁻



IX⁻

0.00

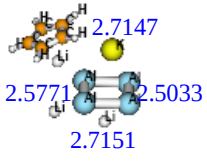
B1=25.01

B2=59.03

C(0)=-2.806

C(1)=-0.131

C(2)=-0.869



X⁻

1.04

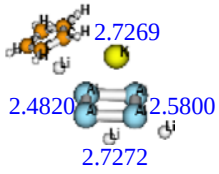
B1=26.00

B2=62.05

C(0)=-2.904

C(1)=-0.110

C(2)=-0.890



XI⁻

2.23

B1=24.81

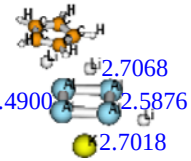
B2=58.79

C(0)=-2.999

C(1)=-0.105

C(2)=-0.895

c) [CpK(Al$_4$Li$_3$)]⁻



XII⁻

3.43

B1=24.57

B2=57.59

C(0)=-2.968

C(1)=-0.126

C(2)=-0.874

XIII⁻

11.14

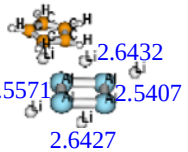
B1=22.31

B2=47.89

C(0)=-3.035

C(1)=-0.038

C(2)=-0.962



B1=21.68

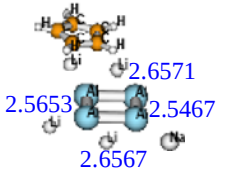
B2=135.23

C(0)=-2.231

C(1)=0.910

C(2)=-0.910

(Li)⁺[CpLi(Al$_4$Li$_3$)]⁻



B1=21.87

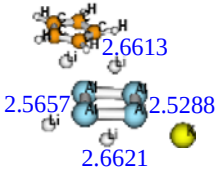
B2=132.23

C(0)=-2.435

C(1)=0.923

C(2)=-0.923

(Li)⁺[CpNa(Al$_4$Li$_3$)]⁻



B1=22.34

B2=134.61

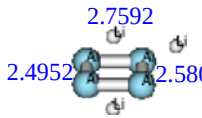
C(0)=-2.621

C(1)=0.931

C(2)=-0.931

(Li)⁺[CpK(Al$_4$Li$_3$)]⁻

d) (Li)⁺[CpM(Al$_4$Li$_3$)]⁻ (M=Li, Na, K)

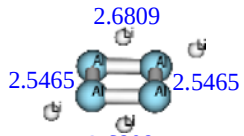


Al$_4$Li$_3$⁻ (*Cs*)

0.00

C(0)=-2.937

C(1)=-1.000



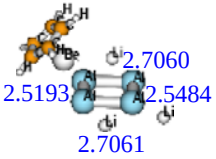
Al$_4$Li$_4$ (*C$_{2h}$*)

0.00

C(0)=-2.987

C(1)=0.000

e) reference molecules



XIV

0.00

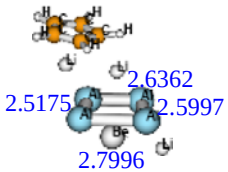
B1=162.49

B2=157.76

C(0)=-2.637

C(1)=0.773

C(2)=-0.773



XV

6.26

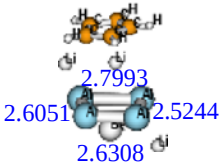
B1=20.75

B2=143.33

C(0)=-2.205

C(1)=0.827

C(2)=-0.827



XVI

9.35

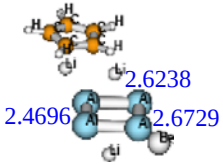
B1=25.86

B2=148.41

C(0)=-2.220

C(1)=0.824

C(2)=-0.824



XVII

16.62

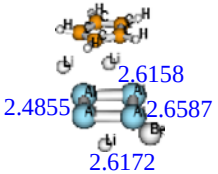
B1=18.60

B2=141.14

C(0)=-2.171

C(1)=0.832

C(2)=-0.832



XVIII

19.07

B1=16.14

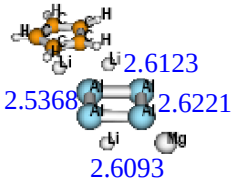
B2=138.69

C(0)=-2.095

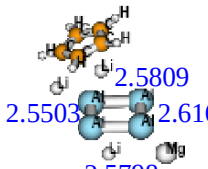
C(1)=0.814

C(2)=-0.814

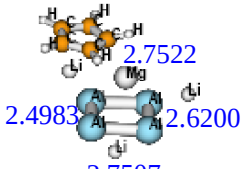
f) [CpBe(Al$_4$Li$_3$)]



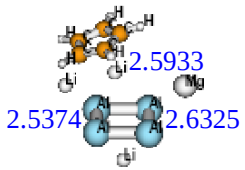
XIX
0.00
B1=18.76
B2=139.08
C(0)=-2.074
C(1)=0.830
C(2)=-0.830



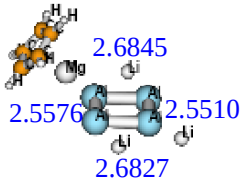
XX
0.41
B1=18.35
B2=138.67
C(0)=-2.010
C(1)=0.820
C(2)=-0.820



XXI
1.15
B1=24.37
B2=141.67
C(0)=-2.756
C(1)=0.798
C(2)=-0.798

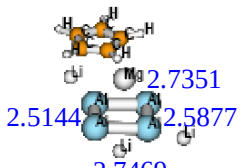


XXII
1.40
B1=17.36
B2=137.65
C(0)=-2.114
C(1)=0.826
C(2)=-0.826

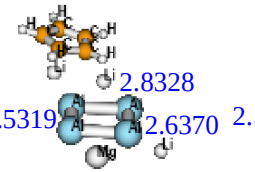


XXIII
3.21
B1=165.74
B2=135.87
C(0)=-2.861
C(1)=0.849
C(2)=-0.849

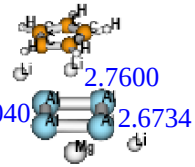
g) [CpMg(Al_4Li_3)]



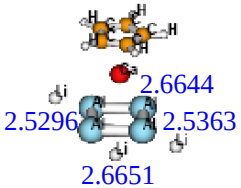
XXIV
4.68
B1=23.07
B2=140.64
C(0)=-3.002
C(1)=0.813
C(2)=-0.813



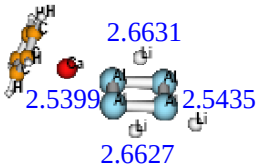
XXV
4.97
B1=20.55
B2=140.35
C(0)=-2.632
C(1)=0.822
C(2)=-0.822



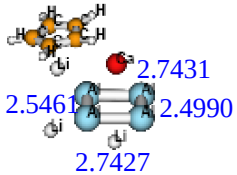
XXVI
8.70
B1=16.82
B2=136.62
C(0)=-2.514
C(1)=0.821
C(2)=-0.821



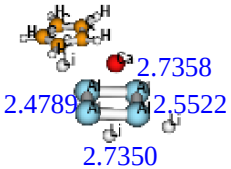
XXVII
0.00
B1=132.07
B2=141.57
C(0)=-3.087
C(1)=0.863
C(2)=-0.863



XXVIII
0.64
B1=131.43
B2=147.44
C(0)=-3.074
C(1)=0.864
C(2)=-0.864

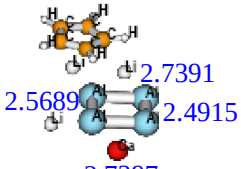


XXIX
5.39
B1=25.80
B2=141.89
C(0)=-2.917
C(1)=0.847
C(2)=-0.847

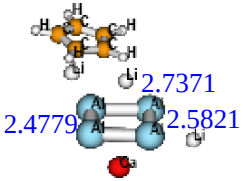


XXX
6.64
B1=24.54
B2=134.92
C(0)=-2.996
C(1)=0.853
C(2)=-0.853

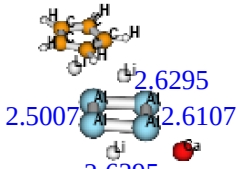
h) [CpCa(Al_4Li_3)]



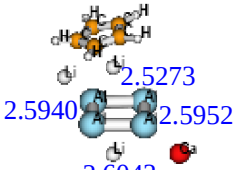
XXXI
9.95
B1=21.93
B2=137.33
C(0)=-2.851
C(1)=0.825
C(2)=-0.825



XXXII
10.55
B1=21.33
B2=131.02
C(0)=-2.901
C(1)=0.831
C(2)=-0.831

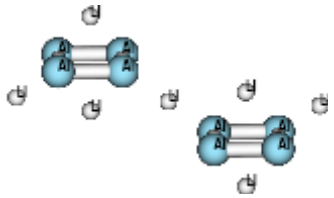


XXXIII
14.44
B1=18.88
B2=133.64
C(0)=-2.406
C(1)=0.835
C(2)=-0.835



XXXIV
16.47
B1=16.86
B2=131.61
C(0)=-2.231
C(1)=0.820
C(2)=-0.820

In the following sections, we listed the structures, Descartes Coordinate, frequencies, absolute energies of our designed cluster-assembled compounds.



Charge = -1 Multiplicity = 1

Li,0,5.201579015,4.621309802,0.
Li,0,2.0247961032,4.8045677039,0.
Al,0,0.9725936015,2.4991074974,-1.2502716905
Al,0,3.6638398002,2.8749741829,-1.2842300556
Al,0,0.9725936015,2.4991074974,1.2502716905
Al,0,3.6638398002,2.8749741829,1.2842300556
Li,0,2.5844589358,0.6600766857,0.
Li,0,-1.177713,3.970304,0.
Li,0,-4.9398849358,7.2805313143,0.
Li,0,-4.3802221032,3.1360402961,0.
Li,0,-7.557005015,3.319298198,0.
Al,0,-3.3280196015,5.4415005026,-1.2502716905
Al,0,-6.0192658002,5.0656338171,-1.2842300556
Al,0,-3.3280196015,5.4415005026,1.2502716905
Al,0,-6.0192658002,5.0656338171,1.2842300556

State=1-AG\HF=-1992.4166778

		1			2			3		
		AU			BU			AU		
Frequencies --		4.3492			10.3936			21.3422		
Red. masses --		15.3248			11.6877			15.3213		
Frc consts --		0.0002			0.0007			0.0041		
IR Inten --		0.7598			1.6368			0.0738		
Atom	AN	X	Y	Z	X	Y	Z	X	Y	Z
1	3	0.00	0.00	0.44	0.38	-0.18	0.00	0.00	0.00	0.01
2	3	0.00	0.00	0.18	0.00	-0.25	0.00	0.00	0.00	-0.30
3	13	-0.12	-0.13	-0.16	-0.18	0.01	0.00	0.17	-0.09	-0.08
4	13	-0.12	-0.13	0.12	0.16	0.01	0.00	0.19	-0.10	0.11
5	13	0.12	0.13	-0.16	-0.18	0.01	0.00	-0.17	0.09	-0.08
6	13	0.12	0.13	0.12	0.16	0.01	0.00	-0.19	0.10	0.11
7	3	0.00	0.00	-0.21	-0.01	0.27	0.00	0.00	0.00	0.32
8	3	0.00	0.00	-0.21	-0.34	-0.14	0.00	0.00	0.00	-0.45
9	3	0.00	0.00	-0.21	-0.01	0.27	0.00	0.00	0.00	0.32
10	3	0.00	0.00	0.18	0.00	-0.25	0.00	0.00	0.00	-0.30
11	3	0.00	0.00	0.44	0.38	-0.18	0.00	0.00	0.00	0.01

12	13	0.12	0.13	-0.16	-0.18	0.01	0.00	-0.17	0.09	-0.08
13	13	0.12	0.13	0.12	0.16	0.01	0.00	-0.19	0.10	0.11
14	13	-0.12	-0.13	-0.16	-0.18	0.01	0.00	0.17	-0.09	-0.08
15	13	-0.12	-0.13	0.12	0.16	0.01	0.00	0.19	-0.10	0.11

	4	5	6
	AG	BG	AG
Frequencies --	44.8795	61.4383	65.7898
Red. masses --	14.3999	18.1198	17.4427
Frc consts --	0.0171	0.0403	0.0445
IR Inten --	0.0000	0.0000	0.0000

Atom	AN	X	Y	Z	X	Y	Z	X	Y	Z
1	3	-0.30	0.33	0.00	0.00	0.00	-0.10	-0.21	0.03	0.00
2	3	0.00	0.33	0.00	0.00	0.00	0.46	0.18	0.06	0.00
3	13	0.12	0.18	0.00	-0.09	0.09	0.27	0.31	-0.11	0.01
4	13	-0.13	0.18	0.00	-0.15	0.16	-0.06	0.02	-0.15	0.00
5	13	0.12	0.18	0.00	0.09	-0.09	0.27	0.31	-0.11	-0.01
6	13	-0.13	0.18	0.00	0.15	-0.16	-0.06	0.02	-0.15	0.00
7	3	0.00	-0.02	0.00	0.00	0.00	-0.05	0.15	-0.37	0.00
8	3	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
9	3	0.00	0.02	0.00	0.00	0.00	0.05	-0.15	0.37	0.00
10	3	0.00	-0.33	0.00	0.00	0.00	-0.46	-0.18	-0.06	0.00
11	3	0.30	-0.33	0.00	0.00	0.00	0.10	0.21	-0.03	0.00
12	13	-0.12	-0.18	0.00	-0.09	0.09	-0.27	-0.31	0.11	0.01
13	13	0.13	-0.18	0.00	-0.15	0.16	0.06	-0.02	0.15	0.00
14	13	-0.12	-0.18	0.00	0.09	-0.09	-0.27	-0.31	0.11	-0.01
15	13	0.13	-0.18	0.00	0.15	-0.16	0.06	-0.02	0.15	0.00

	7	8	9
	AU	BG	BU
Frequencies --	105.1533	109.3833	113.0382
Red. masses --	8.3860	8.9902	8.8777
Frc consts --	0.0546	0.0634	0.0668
IR Inten --	0.1129	0.0000	9.0176

Atom	AN	X	Y	Z	X	Y	Z	X	Y	Z
1	3	0.00	0.00	-0.14	0.00	0.00	0.16	0.54	-0.35	0.00
2	3	0.00	0.00	0.53	0.00	0.00	-0.50	-0.04	-0.04	0.00
3	13	0.00	-0.09	-0.04	0.01	0.08	0.11	0.06	0.02	0.01
4	13	0.00	0.08	-0.04	-0.04	-0.07	0.02	-0.13	0.06	-0.01
5	13	0.00	0.09	-0.04	-0.01	-0.08	0.11	0.06	0.02	-0.01
6	13	0.00	-0.08	-0.04	0.04	0.07	0.02	-0.13	0.06	0.01
7	3	0.00	0.00	0.38	0.00	0.00	-0.42	-0.02	-0.18	0.00
8	3	0.00	0.00	-0.20	0.00	0.00	0.00	0.01	0.00	0.00
9	3	0.00	0.00	0.38	0.00	0.00	0.42	-0.02	-0.18	0.00
10	3	0.00	0.00	0.53	0.00	0.00	0.50	-0.04	-0.04	0.00
11	3	0.00	0.00	-0.14	0.00	0.00	-0.16	0.54	-0.35	0.00

12	13	0.00	0.09	-0.04	0.01	0.08	-0.11	0.06	0.02	-0.01
13	13	0.00	-0.08	-0.04	-0.04	-0.07	-0.02	-0.13	0.06	0.01
14	13	0.00	-0.09	-0.04	-0.01	-0.08	-0.11	0.06	0.02	0.01
15	13	0.00	0.08	-0.04	0.04	0.07	-0.02	-0.13	0.06	-0.01

	10	11	12
	AG	BG	AU
Frequencies --	113.4257	122.0265	123.2152
Red. masses --	8.9814	17.4194	18.1203
Frc consts --	0.0681	0.1528	0.1621
IR Inten --	0.0000	0.0000	2.3274

Atom	AN	X	Y	Z	X	Y	Z	X	Y	Z
1	3	-0.54	0.35	0.00	0.00	0.00	0.35	0.00	0.00	-0.39
2	3	0.03	0.04	0.00	0.00	0.00	-0.05	0.00	0.00	0.08
3	13	-0.07	-0.02	-0.01	0.25	-0.01	-0.03	-0.25	0.02	-0.05
4	13	0.13	-0.05	0.01	-0.24	0.01	-0.08	0.25	0.02	0.11
5	13	-0.07	-0.02	0.01	-0.25	0.01	-0.03	0.25	-0.02	-0.05
6	13	0.13	-0.05	-0.01	0.24	-0.01	-0.08	-0.25	-0.02	0.11
7	3	0.02	0.20	0.00	0.00	0.00	0.34	0.00	0.00	-0.20
8	3	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.22
9	3	-0.02	-0.20	0.00	0.00	0.00	-0.34	0.00	0.00	-0.20
10	3	-0.03	-0.04	0.00	0.00	0.00	0.05	0.00	0.00	0.08
11	3	0.54	-0.35	0.00	0.00	0.00	-0.35	0.00	0.00	-0.39
12	13	0.07	0.02	-0.01	0.25	-0.01	0.03	0.25	-0.02	-0.05
13	13	-0.13	0.05	0.01	-0.24	0.01	0.08	-0.25	-0.02	0.11
14	13	0.07	0.02	0.01	-0.25	0.01	0.03	-0.25	0.02	-0.05
15	13	-0.13	0.05	-0.01	0.24	-0.01	0.08	0.25	0.02	0.11

	13	14	15
	AU	BG	AU
Frequencies --	139.2380	144.8761	147.4034
Red. masses --	11.2754	10.2998	13.5220
Frc consts --	0.1288	0.1274	0.1731
IR Inten --	0.0737	0.0000	0.0104

Atom	AN	X	Y	Z	X	Y	Z	X	Y	Z
1	3	0.00	0.00	-0.06	0.00	0.00	-0.10	0.00	0.00	-0.11
2	3	0.00	0.00	-0.31	0.00	0.00	-0.47	0.00	0.00	0.38
3	13	-0.04	0.07	-0.14	-0.14	0.02	-0.03	0.18	0.13	-0.11
4	13	-0.10	0.10	0.10	-0.09	0.09	0.07	0.00	0.07	0.13
5	13	0.04	-0.07	-0.14	0.14	-0.02	-0.03	-0.18	-0.13	-0.11
6	13	0.10	-0.10	0.10	0.09	-0.09	0.07	0.00	-0.07	0.13
7	3	0.00	0.00	0.46	0.00	0.00	0.43	0.00	0.00	-0.42
8	3	0.00	0.00	0.41	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.09
9	3	0.00	0.00	0.46	0.00	0.00	-0.43	0.00	0.00	-0.42
10	3	0.00	0.00	-0.31	0.00	0.00	0.47	0.00	0.00	0.38
11	3	0.00	0.00	-0.06	0.00	0.00	0.10	0.00	0.00	-0.11

12	13	0.04	-0.07	-0.14	-0.14	0.02	0.03	-0.18	-0.13	-0.11
13	13	0.10	-0.10	0.10	-0.09	0.09	-0.07	0.00	-0.07	0.13
14	13	-0.04	0.07	-0.14	0.14	-0.02	0.03	0.18	0.13	-0.11
15	13	-0.10	0.10	0.10	0.09	-0.09	-0.07	0.00	0.07	0.13

	16	17	18
	BG	AU	BU
Frequencies --	148.3699	166.5567	167.4379
Red. masses --	18.0168	9.2699	7.8291
Frc consts --	0.2337	0.1515	0.1293
IR Inten --	0.0000	5.5771	5.9706

Atom	AN	X	Y	Z	X	Y	Z	X	Y	Z
1	3	0.00	0.00	-0.27	0.00	0.00	0.25	0.10	-0.06	0.00
2	3	0.00	0.00	0.15	0.00	0.00	0.19	-0.10	0.11	0.00
3	13	0.11	0.17	-0.15	0.04	0.02	-0.05	-0.07	-0.07	-0.01
4	13	-0.06	0.16	0.22	0.08	-0.11	-0.08	0.02	0.01	0.00
5	13	-0.11	-0.17	-0.15	-0.04	-0.02	-0.05	-0.07	-0.07	0.01
6	13	0.06	-0.16	0.22	-0.08	0.11	-0.08	0.02	0.01	0.00
7	3	0.00	0.00	-0.36	0.00	0.00	0.13	0.03	0.12	0.00
8	3	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.81	0.78	0.50	0.00
9	3	0.00	0.00	0.36	0.00	0.00	0.13	0.03	0.12	0.00
10	3	0.00	0.00	-0.15	0.00	0.00	0.19	-0.10	0.11	0.00
11	3	0.00	0.00	0.27	0.00	0.00	0.25	0.10	-0.06	0.00
12	13	0.11	0.17	0.15	-0.04	-0.02	-0.05	-0.07	-0.07	0.01
13	13	-0.06	0.16	-0.22	-0.08	0.11	-0.08	0.02	0.01	0.00
14	13	-0.11	-0.17	0.15	0.04	0.02	-0.05	-0.07	-0.07	-0.01
15	13	0.06	-0.16	-0.22	0.08	-0.11	-0.08	0.02	0.01	0.00

	19	20	21
	BG	AU	BU
Frequencies --	207.1466	214.0746	220.7855
Red. masses --	13.1470	11.0428	11.3752
Frc consts --	0.3324	0.2982	0.3267
IR Inten --	0.0000	4.9269	19.5876

Atom	AN	X	Y	Z	X	Y	Z	X	Y	Z
1	3	0.00	0.00	-0.52	0.00	0.00	0.47	0.04	-0.29	0.00
2	3	0.00	0.00	-0.15	0.00	0.00	0.08	0.14	0.46	0.00
3	13	0.06	-0.25	0.05	-0.06	0.20	-0.02	0.00	0.13	-0.03
4	13	-0.09	0.02	0.04	0.07	0.03	-0.04	0.00	-0.19	0.05
5	13	-0.06	0.25	0.05	0.06	-0.20	-0.02	0.00	0.13	0.03
6	13	0.09	-0.02	0.04	-0.07	-0.03	-0.04	0.00	-0.19	-0.05
7	3	0.00	0.00	-0.23	0.00	0.00	0.16	-0.13	0.19	0.00
8	3	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	-0.53	-0.10	0.19	0.00
9	3	0.00	0.00	0.23	0.00	0.00	0.16	-0.13	0.19	0.00
10	3	0.00	0.00	0.15	0.00	0.00	0.08	0.14	0.46	0.00
11	3	0.00	0.00	0.52	0.00	0.00	0.47	0.04	-0.29	0.00

12	13	0.06	-0.25	-0.05	0.06	-0.20	-0.02	0.00	0.13	0.03
13	13	-0.09	0.02	-0.04	-0.07	-0.03	-0.04	0.00	-0.19	-0.05
14	13	-0.06	0.25	-0.05	-0.06	0.20	-0.02	0.00	0.13	-0.03
15	13	0.09	-0.02	-0.04	0.07	0.03	-0.04	0.00	-0.19	0.05

	22	23	24
	AG	AG	BU
Frequencies --	223.4206	232.1970	232.2430
Red. masses --	8.3981	14.8419	9.3017
Frc consts --	0.2470	0.4715	0.2956
IR Inten --	0.0000	0.0000	5.9661

Atom	AN	X	Y	Z	X	Y	Z	X	Y	Z
1	3	-0.09	0.20	0.00	0.15	0.20	0.00	0.10	0.04	0.00
2	3	-0.07	-0.58	0.00	-0.18	0.36	0.00	-0.06	0.34	0.00
3	13	0.00	-0.03	0.04	0.01	-0.27	0.01	0.04	-0.14	-0.02
4	13	0.01	0.11	-0.05	-0.01	0.16	0.00	-0.05	0.05	0.04
5	13	0.00	-0.03	-0.04	0.01	-0.27	-0.01	0.04	-0.14	0.02
6	13	0.01	0.11	0.05	-0.01	0.16	0.00	-0.05	0.05	-0.04
7	3	0.05	-0.28	0.00	0.23	0.16	0.00	0.14	0.47	0.00
8	3	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	-0.20	-0.32	0.00
9	3	-0.05	0.28	0.00	-0.23	-0.16	0.00	0.14	0.47	0.00
10	3	0.07	0.58	0.00	0.18	-0.36	0.00	-0.06	0.34	0.00
11	3	0.09	-0.20	0.00	-0.15	-0.20	0.00	0.10	0.04	0.00
12	13	0.00	0.03	0.04	-0.01	0.27	0.01	0.04	-0.14	0.02
13	13	-0.01	-0.11	-0.05	0.01	-0.16	0.00	-0.05	0.05	-0.04
14	13	0.00	0.03	-0.04	-0.01	0.27	-0.01	0.04	-0.14	-0.02
15	13	-0.01	-0.11	0.05	0.01	-0.16	0.00	-0.05	0.05	0.04

	25	26	27
	AG	BU	BG
Frequencies --	237.6847	238.5342	249.4277
Red. masses --	8.2914	8.2154	14.0125
Frc consts --	0.2760	0.2754	0.5136
IR Inten --	0.0000	1.5423	0.0000

Atom	AN	X	Y	Z	X	Y	Z	X	Y	Z
1	3	0.05	0.03	0.00	0.09	0.06	0.00	0.00	0.00	-0.51
2	3	0.01	0.33	0.00	-0.01	0.48	0.00	0.00	0.00	0.15
3	13	-0.08	0.02	0.01	-0.07	-0.05	0.01	-0.01	0.12	0.01
4	13	0.09	0.02	-0.03	0.07	0.04	-0.02	-0.09	-0.25	0.02
5	13	-0.08	0.02	-0.01	-0.07	-0.05	-0.01	0.01	-0.12	0.01
6	13	0.09	0.02	0.03	0.07	0.04	0.02	0.09	0.25	0.02
7	3	-0.09	-0.59	0.00	-0.03	-0.46	0.00	0.00	0.00	0.20
8	3	0.00	0.00	0.00	-0.15	-0.09	0.00	0.00	0.00	0.00
9	3	0.09	0.59	0.00	-0.03	-0.46	0.00	0.00	0.00	-0.20
10	3	-0.01	-0.33	0.00	-0.01	0.48	0.00	0.00	0.00	-0.15
11	3	-0.05	-0.03	0.00	0.09	0.06	0.00	0.00	0.00	0.51

12	13	0.08	-0.02	0.01	-0.07	-0.05	-0.01	-0.01	0.12	-0.01
13	13	-0.09	-0.02	-0.03	0.07	0.04	0.02	-0.09	-0.25	-0.02
14	13	0.08	-0.02	-0.01	-0.07	-0.05	0.01	0.01	-0.12	-0.01
15	13	-0.09	-0.02	0.03	0.07	0.04	-0.02	0.09	0.25	-0.02

	28	29	30
	AU	BU	AG
Frequencies --	252.1441	290.3805	292.3388
Red. masses --	14.3148	17.2202	17.2596
Frc consts --	0.5362	0.8555	0.8691
IR Inten --	10.9263	62.1785	0.0000

Atom	AN	X	Y	Z	X	Y	Z	X	Y	Z
1	3	0.00	0.00	-0.47	0.19	0.28	0.00	-0.19	-0.26	0.00
2	3	0.00	0.00	0.16	0.23	0.09	0.00	-0.25	-0.10	0.00
3	13	-0.02	0.15	0.01	0.00	-0.02	0.05	0.00	0.00	-0.04
4	13	-0.09	-0.25	0.02	-0.03	-0.06	-0.35	0.03	0.07	0.35
5	13	0.02	-0.15	0.01	0.00	-0.02	-0.05	0.00	0.00	0.04
6	13	0.09	0.25	0.02	-0.03	-0.06	0.35	0.03	0.07	-0.35
7	3	0.00	0.00	0.22	-0.15	0.19	0.00	0.18	-0.19	0.00
8	3	0.00	0.00	-0.22	-0.07	0.14	0.00	0.00	0.00	0.00
9	3	0.00	0.00	0.22	-0.15	0.19	0.00	-0.18	0.19	0.00
10	3	0.00	0.00	0.16	0.23	0.09	0.00	0.25	0.10	0.00
11	3	0.00	0.00	-0.47	0.19	0.28	0.00	0.19	0.26	0.00
12	13	0.02	-0.15	0.01	0.00	-0.02	-0.05	0.00	0.00	-0.04
13	13	0.09	0.25	0.02	-0.03	-0.06	0.35	-0.03	-0.07	0.35
14	13	-0.02	0.15	0.01	0.00	-0.02	0.05	0.00	0.00	0.04
15	13	-0.09	-0.25	0.02	-0.03	-0.06	-0.35	-0.03	-0.07	-0.35

	31	32	33
	BU	AG	BU
Frequencies --	322.6416	326.6581	336.8107
Red. masses --	9.6860	9.2608	10.4947
Frc consts --	0.5941	0.5822	0.7014
IR Inten --	82.9278	0.0000	18.4285

Atom	AN	X	Y	Z	X	Y	Z	X	Y	Z
1	3	0.02	0.05	0.00	-0.02	-0.06	0.00	0.02	0.03	0.00
2	3	0.59	-0.05	0.00	-0.66	0.06	0.00	0.46	0.01	0.00
3	13	-0.05	-0.01	-0.17	0.05	0.04	0.14	-0.05	-0.02	0.18
4	13	-0.04	0.03	0.02	0.04	-0.04	-0.04	-0.05	0.00	0.06
5	13	-0.05	-0.01	0.17	0.05	0.04	-0.14	-0.05	-0.02	-0.18
6	13	-0.04	0.03	-0.02	0.04	-0.04	0.04	-0.05	0.00	-0.06
7	3	-0.06	-0.04	0.00	-0.03	0.05	0.00	0.39	-0.02	0.00
8	3	0.26	-0.27	0.00	0.00	0.00	0.00	-0.15	0.29	0.00
9	3	-0.06	-0.04	0.00	0.03	-0.05	0.00	0.39	-0.02	0.00
10	3	0.59	-0.05	0.00	0.66	-0.06	0.00	0.46	0.01	0.00
11	3	0.02	0.05	0.00	0.02	0.06	0.00	0.02	0.03	0.00

12	13	-0.05	-0.01	0.17	-0.05	-0.04	0.14	-0.05	-0.02	-0.18
13	13	-0.04	0.03	-0.02	-0.04	0.04	-0.04	-0.05	0.00	-0.06
14	13	-0.05	-0.01	-0.17	-0.05	-0.04	-0.14	-0.05	-0.02	0.18
15	13	-0.04	0.03	0.02	-0.04	0.04	0.04	-0.05	0.00	0.06

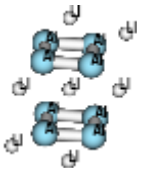
	34	35	36
	AG	BU	AG
Frequencies --	341.9858	352.1127	352.7640
Red. masses --	14.8067	8.7835	8.2836
Frc consts --	1.0203	0.6416	0.6074
IR Inten --	0.0000	22.6794	0.0000

Atom	AN	X	Y	Z	X	Y	Z	X	Y	Z
1	3	0.03	0.03	0.00	-0.24	-0.36	0.00	0.25	0.38	0.00
2	3	0.39	0.05	0.00	-0.04	0.02	0.00	0.04	-0.04	0.00
3	13	-0.06	0.02	0.29	-0.02	0.00	-0.10	0.03	-0.02	0.06
4	13	-0.05	-0.03	0.06	0.00	0.03	-0.10	0.00	-0.03	0.10
5	13	-0.06	0.02	-0.29	-0.02	0.00	0.10	0.03	-0.02	-0.06
6	13	-0.05	-0.03	-0.06	0.00	0.03	0.10	0.00	-0.03	-0.10
7	3	0.39	0.00	0.00	0.48	-0.03	0.00	-0.51	0.02	0.00
8	3	0.00	0.00	0.00	-0.20	0.20	0.00	0.00	0.00	0.00
9	3	-0.39	0.00	0.00	0.48	-0.03	0.00	0.51	-0.02	0.00
10	3	-0.39	-0.05	0.00	-0.04	0.02	0.00	-0.04	0.04	0.00
11	3	-0.03	-0.03	0.00	-0.24	-0.36	0.00	-0.25	-0.38	0.00
12	13	0.06	-0.02	0.29	-0.02	0.00	0.10	-0.03	0.02	0.06
13	13	0.05	0.03	0.06	0.00	0.03	0.10	0.00	0.03	0.10
14	13	0.06	-0.02	-0.29	-0.02	0.00	-0.10	-0.03	0.02	-0.06
15	13	0.05	0.03	-0.06	0.00	0.03	-0.10	0.00	0.03	-0.10

	37	38	39
	BU	AG	BU
Frequencies --	363.2009	368.1931	368.8016
Red. masses --	8.4107	8.6489	8.5480
Frc consts --	0.6537	0.6908	0.6850
IR Inten --	124.4011	0.0000	30.3662

Atom	AN	X	Y	Z	X	Y	Z	X	Y	Z
1	3	0.16	0.27	0.00	0.28	0.43	0.00	0.24	0.36	0.00
2	3	-0.01	-0.08	0.00	-0.17	-0.02	0.00	-0.20	0.01	0.00
3	13	0.03	-0.05	-0.11	-0.03	0.05	-0.08	-0.04	0.07	-0.05
4	13	-0.01	-0.01	0.05	-0.04	-0.09	0.02	-0.04	-0.09	0.01
5	13	0.03	-0.05	0.11	-0.03	0.05	0.08	-0.04	0.07	0.05
6	13	-0.01	-0.01	-0.05	-0.04	-0.09	-0.02	-0.04	-0.09	-0.01
7	3	-0.05	-0.04	0.00	0.41	-0.08	0.00	0.43	-0.06	0.00
8	3	-0.47	0.71	0.00	0.00	0.00	0.00	0.18	-0.27	0.00
9	3	-0.05	-0.04	0.00	-0.41	0.08	0.00	0.43	-0.06	0.00
10	3	-0.01	-0.08	0.00	0.17	0.02	0.00	-0.20	0.01	0.00
11	3	0.16	0.27	0.00	-0.28	-0.43	0.00	0.24	0.36	0.00

12	13	0.03	-0.05	0.11	0.03	-0.05	-0.08	-0.04	0.07	0.05
13	13	-0.01	-0.01	-0.05	0.04	0.09	0.02	-0.04	-0.09	-0.01
14	13	0.03	-0.05	-0.11	0.03	-0.05	0.08	-0.04	0.07	-0.05
15	13	-0.01	-0.01	0.05	0.04	0.09	-0.02	-0.04	-0.09	0.01



Charge = -1 Multiplicity = 1^M

Al,0,1.770371008,-1.5514815377,1.4312234754^M
Al,0,2.3505766286,0.9226784827,1.3182726311^M
Al,0,2.3505766286,0.9226784827,-1.3182726311^M
Al,0,1.770371008,-1.5514815377,-1.4312234754^M
Li,0,0.457581086,2.6205449171,0.^M
Li,0,2.7496581947,-3.5516682129,0.^M
Li,0,4.0916390863,-0.7411827561,0.^M
Li,0,-0.457581086,-2.6205449171,0.^M
Li,0,-2.7496581947,3.5516682129,0.^M
Li,0,-4.0916390863,0.7411827561,0.^M
Al,0,-2.3505766286,-0.9226784827,-1.3182726311^M
Al,0,-1.770371008,1.5514815377,-1.4312234754^M
Al,0,-2.3505766286,-0.9226784827,1.3182726311^M
Al,0,-1.770371008,1.5514815377,1.4312234754^M
Li,0,0.,0.,0.^M

State=1-AG|HF=-1992.4568128

		1			2			3^M		
		AU			BG			BU^M		
Frequencies --		-70.0539			23.9853			24.8076^M		
Red. masses --		14.0087			19.1718			17.0356^M		
Frc consts --		0.0405			0.0065			0.0062^M		
IR Inten --		5.4304			0.0000			7.5420^M		
Atom	AN	X	Y	Z	X	Y	Z	X	Y	Z^M
1	13	0.00	0.22	-0.01	0.02	0.23	0.04	-0.03	-0.22	-0.07^M
2	13	0.02	0.20	0.02	-0.03	-0.31	0.00	0.00	0.26	0.06^M
3	13	-0.02	-0.20	0.02	0.03	0.31	0.00	0.00	0.26	-0.06^M
4	13	0.00	-0.22	-0.01	-0.02	-0.23	0.04	-0.03	-0.22	0.07^M
5	3	0.00	0.00	-0.32	0.00	0.00	0.34	-0.01	0.02	0.00^M
6	3	0.00	0.00	0.16	0.00	0.00	0.21	0.05	-0.34	0.00^M
7	3	0.00	0.00	0.33	0.00	0.00	-0.18	0.33	0.01	0.00^M
8	3	0.00	0.00	-0.32	0.00	0.00	-0.34	-0.01	0.02	0.00^M

9	3	0.00	0.00	0.16	0.00	0.00	-0.21	0.05	-0.34	0.00^M
10	3	0.00	0.00	0.33	0.00	0.00	0.18	0.33	0.01	0.00^M
11	13	0.02	0.20	0.02	0.03	0.31	0.00	0.00	0.26	0.06^M
12	13	0.00	0.22	-0.01	-0.02	-0.23	-0.04	-0.03	-0.22	-0.07^M
13	13	-0.02	-0.20	0.02	-0.03	-0.31	0.00	0.00	0.26	-0.06^M
14	13	0.00	-0.22	-0.01	0.02	0.23	-0.04	-0.03	-0.22	0.07^M
15	3	0.00	0.00	-0.41	0.00	0.00	0.00	-0.21	0.04	0.00^M

	4	5	6^M
	AU	AG	AG^M
Frequencies --	41.8383	87.9974	100.5479^M
Red. masses --	17.6588	21.3913	18.3943^M
Frc consts --	0.0182	0.0976	0.1096^M
IR Inten --	1.4003	0.0000	0.0000^M

Atom	AN	X	Y	Z	X	Y	Z	X	Y	Z^M
1	13	-0.19	-0.10	-0.14	-0.06	0.26	0.04	0.19	0.24	0.07^M
2	13	-0.14	0.13	0.18	-0.06	0.32	0.02	0.16	-0.13	-0.02^M
3	13	0.14	-0.13	0.18	-0.06	0.32	-0.02	0.16	-0.13	0.02^M
4	13	0.19	0.10	-0.14	-0.06	0.26	-0.04	0.19	0.24	-0.07^M
5	3	0.00	0.00	-0.01	0.15	0.04	0.00	-0.01	-0.09	0.00^M
6	3	0.00	0.00	-0.47	0.16	-0.03	0.00	0.12	0.35	0.00^M
7	3	0.00	0.00	0.11	0.14	0.27	0.00	-0.26	0.08	0.00^M
8	3	0.00	0.00	-0.01	-0.15	-0.04	0.00	0.01	0.09	0.00^M
9	3	0.00	0.00	-0.47	-0.16	0.03	0.00	-0.12	-0.35	0.00^M
10	3	0.00	0.00	0.11	-0.14	-0.27	0.00	0.26	-0.08	0.00^M
11	13	-0.14	0.13	0.18	0.06	-0.32	-0.02	-0.16	0.13	0.02^M
12	13	-0.19	-0.10	-0.14	0.06	-0.26	-0.04	-0.19	-0.24	-0.07^M
13	13	0.14	-0.13	0.18	0.06	-0.32	0.02	-0.16	0.13	-0.02^M
14	13	0.19	0.10	-0.14	0.06	-0.26	0.04	-0.19	-0.24	0.07^M
15	3	0.00	0.00	0.08	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00^M

	7	8	9^M
	AU	BG	BU^M
Frequencies --	116.4877	121.6756	124.4050^M
Red. masses --	22.8816	16.2973	8.1497^M
Frc consts --	0.1829	0.1422	0.0743^M
IR Inten --	0.0265	0.0000	6.3934^M

Atom	AN	X	Y	Z	X	Y	Z	X	Y	Z^M
1	13	0.01	-0.25	0.15	-0.01	-0.20	0.20	0.02	-0.10	-0.03^M
2	13	0.07	0.26	-0.19	-0.03	-0.11	0.15	0.03	0.03	-0.01^M
3	13	-0.07	-0.26	-0.19	0.03	0.11	0.15	0.03	0.03	0.01^M
4	13	-0.01	0.25	0.15	0.01	0.20	0.20	0.02	-0.10	0.03^M
5	3	0.00	0.00	-0.06	0.00	0.00	-0.11	0.07	0.06	0.00^M
6	3	0.00	0.00	-0.04	0.00	0.00	-0.08	-0.39	0.55	0.00^M
7	3	0.00	0.00	0.26	0.00	0.00	-0.50	-0.10	-0.01	0.00^M
8	3	0.00	0.00	-0.06	0.00	0.00	0.11	0.07	0.06	0.00^M

9	3	0.00	0.00	-0.04	0.00	0.00	0.08	-0.39	0.55	0.00^M
10	3	0.00	0.00	0.26	0.00	0.00	0.50	-0.10	-0.01	0.00^M
11	13	0.07	0.26	-0.19	0.03	0.11	-0.15	0.03	0.03	-0.01^M
12	13	0.01	-0.25	0.15	0.01	0.20	-0.20	0.02	-0.10	-0.03^M
13	13	-0.07	-0.26	-0.19	-0.03	-0.11	-0.15	0.03	0.03	0.01^M
14	13	-0.01	0.25	0.15	-0.01	-0.20	-0.20	0.02	-0.10	0.03^M
15	3	0.00	0.00	0.25	0.00	0.00	0.00	0.03	-0.01	0.00^M

	10	11	12^M
	AG	BG	AU^M
Frequencies --	132.2283	146.8676	151.0374^M
Red. masses --	8.7959	21.8098	18.9331^M
Frc consts --	0.0906	0.2772	0.2545^M
IR Inten --	0.0000	0.0000	0.0236^M

Atom	AN	X	Y	Z	X	Y	Z	X	Y	Z^M
1	13	-0.04	0.09	-0.03	-0.15	0.03	0.25	0.17	-0.10	-0.22^M
2	13	-0.03	-0.11	0.01	-0.18	0.07	-0.25	0.21	0.05	0.13^M
3	13	-0.03	-0.11	-0.01	0.18	-0.07	-0.25	-0.21	-0.05	0.13^M
4	13	-0.04	0.09	0.03	0.15	-0.03	0.25	-0.17	0.10	-0.22^M
5	3	0.05	-0.09	0.00	0.00	0.00	0.24	0.00	0.00	0.30^M
6	3	0.34	-0.57	0.00	0.00	0.00	-0.26	0.00	0.00	0.20^M
7	3	0.06	-0.04	0.00	0.00	0.00	0.07	0.00	0.00	0.26^M
8	3	-0.05	0.09	0.00	0.00	0.00	-0.24	0.00	0.00	0.30^M
9	3	-0.34	0.57	0.00	0.00	0.00	0.26	0.00	0.00	0.20^M
10	3	-0.06	0.04	0.00	0.00	0.00	-0.07	0.00	0.00	0.26^M
11	13	0.03	0.11	-0.01	0.18	-0.07	0.25	0.21	0.05	0.13^M
12	13	0.04	-0.09	0.03	0.15	-0.03	-0.25	0.17	-0.10	-0.22^M
13	13	0.03	0.11	0.01	-0.18	0.07	0.25	-0.21	-0.05	0.13^M
14	13	0.04	-0.09	-0.03	-0.15	0.03	-0.25	-0.17	0.10	-0.22^M
15	3	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	-0.07^M

	13	14	15^M
	BU	AG	AU^M
Frequencies --	154.6900	173.5337	173.7973^M
Red. masses --	21.4909	19.8650	8.4741^M
Frc consts --	0.3030	0.3525	0.1508^M
IR Inten --	12.2012	0.0000	1.9978^M

Atom	AN	X	Y	Z	X	Y	Z	X	Y	Z^M
1	13	0.05	-0.08	0.40	0.03	0.07	-0.37	-0.03	0.00	-0.01^M
2	13	-0.05	0.09	-0.02	0.07	0.01	0.13	0.07	-0.11	-0.01^M
3	13	-0.05	0.09	0.02	0.07	0.01	-0.13	-0.07	0.11	-0.01^M
4	13	0.05	-0.08	-0.40	0.03	0.07	0.37	0.03	0.00	-0.01^M
5	3	0.09	-0.19	0.00	0.06	-0.26	0.00	0.00	0.00	-0.37^M
6	3	0.16	0.14	0.00	-0.24	0.11	0.00	0.00	0.00	-0.16^M
7	3	-0.14	0.07	0.00	0.20	-0.01	0.00	0.00	0.00	0.45^M
8	3	0.09	-0.19	0.00	-0.06	0.26	0.00	0.00	0.00	-0.37^M

9	3	0.16	0.14	0.00	0.24	-0.11	0.00	0.00	0.00	-0.16^M
10	3	-0.14	0.07	0.00	-0.20	0.01	0.00	0.00	0.00	0.45^M
11	13	-0.05	0.09	-0.02	-0.07	-0.01	-0.13	0.07	-0.11	-0.01^M
12	13	0.05	-0.08	0.40	-0.03	-0.07	0.37	-0.03	0.00	-0.01^M
13	13	-0.05	0.09	0.02	-0.07	-0.01	0.13	-0.07	0.11	-0.01^M
14	13	0.05	-0.08	-0.40	-0.03	-0.07	-0.37	0.03	0.00	-0.01^M
15	3	-0.17	-0.11	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.46^M

	16	17	18^M
	AU	BG	BG^M
Frequencies --	178.6163	193.0711	212.0357^M
Red. masses --	8.1525	8.3466	9.3810^M
Frc consts --	0.1532	0.1833	0.2485^M
IR Inten --	2.0813	0.0000	0.0000^M

Atom	AN	X	Y	Z	X	Y	Z	X	Y	Z^M
1	13	-0.04	0.06	0.00	0.03	-0.02	-0.03	0.01	-0.12	0.03^M
2	13	-0.03	-0.03	-0.09	-0.05	0.11	-0.01	0.11	-0.05	0.00^M
3	13	0.03	0.03	-0.09	0.05	-0.11	-0.01	-0.11	0.05	0.00^M
4	13	0.04	-0.06	0.00	-0.03	0.02	-0.03	-0.01	0.12	0.03^M
5	3	0.00	0.00	0.53	0.00	0.00	0.36	0.00	0.00	0.56^M
6	3	0.00	0.00	-0.16	0.00	0.00	0.44	0.00	0.00	0.00^M
7	3	0.00	0.00	0.40	0.00	0.00	-0.38	0.00	0.00	0.35^M
8	3	0.00	0.00	0.53	0.00	0.00	-0.36	0.00	0.00	-0.56^M
9	3	0.00	0.00	-0.16	0.00	0.00	-0.44	0.00	0.00	0.00^M
10	3	0.00	0.00	0.40	0.00	0.00	0.38	0.00	0.00	-0.35^M
11	13	-0.03	-0.03	-0.09	0.05	-0.11	0.01	-0.11	0.05	0.00^M
12	13	-0.04	0.06	0.00	-0.03	0.02	0.03	-0.01	0.12	-0.03^M
13	13	0.03	0.03	-0.09	-0.05	0.11	0.01	0.11	-0.05	0.00^M
14	13	0.04	-0.06	0.00	0.03	-0.02	0.03	0.01	-0.12	-0.03^M
15	3	0.00	0.00	-0.13	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00^M

	19	20	21^M
	BU	AU	BU^M
Frequencies --	216.0145	222.7416	236.4839^M
Red. masses --	9.0065	8.9834	13.2086^M
Frc consts --	0.2476	0.2626	0.4352^M
IR Inten --	13.1662	0.7709	0.3856^M

Atom	AN	X	Y	Z	X	Y	Z	X	Y	Z^M
1	13	0.00	0.04	0.03	-0.07	-0.03	-0.08	0.05	0.01	-0.04^M
2	13	-0.08	-0.03	0.12	-0.10	0.00	-0.04	0.00	0.01	0.27^M
3	13	-0.08	-0.03	-0.12	0.10	0.00	-0.04	0.00	0.01	-0.27^M
4	13	0.00	0.04	-0.03	0.07	0.03	-0.08	0.05	0.01	0.04^M
5	3	0.03	-0.16	0.00	0.00	0.00	0.02	0.08	-0.30	0.00^M
6	3	-0.03	0.22	0.00	0.00	0.00	0.61	0.01	-0.05	0.00^M
7	3	0.59	-0.13	0.00	0.00	0.00	0.12	-0.45	0.20	0.00^M
8	3	0.03	-0.16	0.00	0.00	0.00	0.02	0.08	-0.30	0.00^M

9	3	-0.03	0.22	0.00	0.00	0.00	0.61	0.01	-0.05	0.00^M
10	3	0.59	-0.13	0.00	0.00	0.00	0.12	-0.45	0.20	0.00^M
11	13	-0.08	-0.03	0.12	-0.10	0.00	-0.04	0.00	0.01	0.27^M
12	13	0.00	0.04	0.03	-0.07	-0.03	-0.08	0.05	0.01	-0.04^M
13	13	-0.08	-0.03	-0.12	0.10	0.00	-0.04	0.00	0.01	-0.27^M
14	13	0.00	0.04	-0.03	0.07	0.03	-0.08	0.05	0.01	0.04^M
15	3	0.17	-0.03	0.00	0.00	0.00	0.35	0.07	0.00	0.00^M

	22	23	24^M
	AG	BU	BG^M
Frequencies --	237.4096	247.4056	258.9229^M
Red. masses --	8.0420	7.5900	10.4372^M
Frc consts --	0.2671	0.2737	0.4123^M
IR Inten --	0.0000	10.5933	0.0000^M

Atom	AN	X	Y	Z	X	Y	Z	X	Y	Z^M
1	13	0.00	-0.03	-0.07	-0.06	0.00	-0.01	0.06	0.10	0.04^M
2	13	0.05	0.05	-0.04	-0.04	0.02	-0.04	0.14	0.09	0.02^M
3	13	0.05	0.05	0.04	-0.04	0.02	0.04	-0.14	-0.09	0.02^M
4	13	0.00	-0.03	0.07	-0.06	0.00	0.01	-0.06	-0.10	0.04^M
5	3	0.09	0.12	0.00	0.59	0.00	0.00	0.00	0.00	0.23^M
6	3	-0.03	-0.21	0.00	0.00	-0.08	0.00	0.00	0.00	-0.50^M
7	3	-0.61	0.19	0.00	-0.05	0.02	0.00	0.00	0.00	-0.34^M
8	3	-0.09	-0.12	0.00	0.59	0.00	0.00	0.00	0.00	-0.23^M
9	3	0.03	0.21	0.00	0.00	-0.08	0.00	0.00	0.00	0.50^M
10	3	0.61	-0.19	0.00	-0.05	0.02	0.00	0.00	0.00	0.34^M
11	13	-0.05	-0.05	0.04	-0.04	0.02	-0.04	-0.14	-0.09	-0.02^M
12	13	0.00	0.03	0.07	-0.06	0.00	-0.01	-0.06	-0.10	-0.04^M
13	13	-0.05	-0.05	-0.04	-0.04	0.02	0.04	0.14	0.09	-0.02^M
14	13	0.00	0.03	-0.07	-0.06	0.00	0.01	0.06	0.10	-0.04^M
15	3	0.00	0.00	0.00	0.49	-0.08	0.00	0.00	0.00	0.00^M

	25	26	27^M
	AG	BU	AG^M
Frequencies --	263.5955	266.1858	287.3225^M
Red. masses --	16.8823	12.4411	8.7025^M
Frc consts --	0.6911	0.5194	0.4233^M
IR Inten --	0.0000	47.6728	0.0000^M

Atom	AN	X	Y	Z	X	Y	Z	X	Y	Z^M
1	13	-0.06	-0.06	0.13	-0.14	-0.01	0.09	0.09	-0.04	-0.01^M
2	13	0.11	0.00	0.29	0.15	-0.05	0.12	-0.07	0.07	-0.03^M
3	13	0.11	0.00	-0.29	0.15	-0.05	-0.12	-0.07	0.07	0.03^M
4	13	-0.06	-0.06	-0.13	-0.14	-0.01	-0.09	0.09	-0.04	0.01^M
5	3	0.01	-0.36	0.00	0.00	0.51	0.00	-0.38	-0.51	0.00^M
6	3	-0.08	-0.10	0.00	-0.15	-0.09	0.00	0.19	-0.02	0.00^M
7	3	-0.11	0.30	0.00	0.10	0.17	0.00	-0.12	-0.02	0.00^M
8	3	-0.01	0.36	0.00	0.00	0.51	0.00	0.38	0.51	0.00^M

9	3	0.08	0.10	0.00	-0.15	-0.09	0.00	-0.19	0.02	0.00^M
10	3	0.11	-0.30	0.00	0.10	0.17	0.00	0.12	0.02	0.00^M
11	13	-0.11	0.00	-0.29	0.15	-0.05	0.12	0.07	-0.07	0.03^M
12	13	0.06	0.06	-0.13	-0.14	-0.01	0.09	-0.09	0.04	0.01^M
13	13	-0.11	0.00	0.29	0.15	-0.05	-0.12	0.07	-0.07	-0.03^M
14	13	0.06	0.06	0.13	-0.14	-0.01	-0.09	-0.09	0.04	-0.01^M
15	3	0.00	0.00	0.00	0.07	-0.25	0.00	0.00	0.00	0.00^M

	28	29	30^M
	AG	AU	AU^M
Frequencies --	290.7739	291.9253	307.0947^M
Red. masses --	8.0829	9.4111	18.8285^M
Frc consts --	0.4027	0.4725	1.0462^M
IR Inten --	0.0000	3.0253	21.6931^M

Atom	AN	X	Y	Z	X	Y	Z	X	Y	Z^M
1	13	-0.02	-0.03	0.02	-0.04	0.12	-0.02	0.30	0.03	-0.02^M
2	13	0.04	0.01	-0.10	0.09	0.08	-0.01	-0.24	0.04	0.00^M
3	13	0.04	0.01	0.10	-0.09	-0.08	-0.01	0.24	-0.04	0.00^M
4	13	-0.02	-0.03	-0.02	0.04	-0.12	-0.02	-0.30	-0.03	-0.02^M
5	3	0.54	-0.42	0.00	0.00	0.00	0.21	0.00	0.00	-0.05^M
6	3	-0.01	0.02	0.00	0.00	0.00	-0.09	0.00	0.00	-0.21^M
7	3	0.06	-0.05	0.00	0.00	0.00	-0.26	0.00	0.00	0.12^M
8	3	-0.54	0.42	0.00	0.00	0.00	0.21	0.00	0.00	-0.05^M
9	3	0.01	-0.02	0.00	0.00	0.00	-0.09	0.00	0.00	-0.21^M
10	3	-0.06	0.05	0.00	0.00	0.00	-0.26	0.00	0.00	0.12^M
11	13	-0.04	-0.01	0.10	0.09	0.08	-0.01	-0.24	0.04	0.00^M
12	13	0.02	0.03	-0.02	-0.04	0.12	-0.02	0.30	0.03	-0.02^M
13	13	-0.04	-0.01	-0.10	-0.09	-0.08	-0.01	0.24	-0.04	0.00^M
14	13	0.02	0.03	0.02	0.04	-0.12	-0.02	-0.30	-0.03	-0.02^M
15	3	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.80	0.00	0.00	0.53^M

	31	32	33^M
	BG	BU	AG^M
Frequencies --	308.3680	312.2907	314.6091^M
Red. masses --	21.1275	8.4171	10.6635^M
Frc consts --	1.1837	0.4837	0.6219^M
IR Inten --	0.0000	12.8436	0.0000^M

Atom	AN	X	Y	Z	X	Y	Z	X	Y	Z^M
1	13	0.35	-0.03	0.00	0.06	-0.03	-0.01	0.10	-0.04	-0.02^M
2	13	-0.23	0.00	0.02	-0.09	-0.01	0.06	-0.13	0.01	0.13^M
3	13	0.23	0.00	0.02	-0.09	-0.01	-0.06	-0.13	0.01	-0.13^M
4	13	-0.35	0.03	0.00	0.06	-0.03	0.01	0.10	-0.04	0.02^M
5	3	0.00	0.00	0.13	0.03	0.49	0.00	0.38	0.14	0.00^M
6	3	0.00	0.00	-0.29	0.33	0.11	0.00	0.36	0.19	0.00^M
7	3	0.00	0.00	0.21	-0.13	-0.29	0.00	-0.18	-0.21	0.00^M
8	3	0.00	0.00	-0.13	0.03	0.49	0.00	-0.38	-0.14	0.00^M

9	3	0.00	0.00	0.29	0.33	0.11	0.00	-0.36	-0.19	0.00^M
10	3	0.00	0.00	-0.21	-0.13	-0.29	0.00	0.18	0.21	0.00^M
11	13	0.23	0.00	-0.02	-0.09	-0.01	0.06	0.13	-0.01	-0.13^M
12	13	-0.35	0.03	0.00	0.06	-0.03	-0.01	-0.10	0.04	0.02^M
13	13	-0.23	0.00	-0.02	-0.09	-0.01	-0.06	0.13	-0.01	0.13^M
14	13	0.35	-0.03	0.00	0.06	-0.03	0.01	-0.10	0.04	-0.02^M
15	3	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00^M

	34	35	36^M
	BU	AG	BU^M
Frequencies --	343.4363	347.2184	370.7975^M
Red. masses --	7.9371	7.7657	9.5536^M
Frc consts --	0.5516	0.5516	0.7739^M
IR Inten --	38.9706	0.0000	59.9601^M

Atom	AN	X	Y	Z	X	Y	Z	X	Y	Z^M
1	13	0.02	-0.06	-0.03	0.00	0.04	0.03	-0.14	-0.01	-0.03^M
2	13	-0.06	-0.05	-0.03	0.05	0.06	0.03	0.09	0.02	0.00^M
3	13	-0.06	-0.05	0.03	0.05	0.06	-0.03	0.09	0.02	0.00^M
4	13	0.02	-0.06	0.03	0.00	0.04	-0.03	-0.14	-0.01	0.03^M
5	3	-0.05	0.08	0.00	-0.04	-0.03	0.00	-0.05	-0.22	0.00^M
6	3	0.24	0.14	0.00	-0.22	-0.15	0.00	0.49	0.34	0.00^M
7	3	0.10	0.61	0.00	-0.14	-0.62	0.00	-0.07	-0.14	0.00^M
8	3	-0.05	0.08	0.00	0.04	0.03	0.00	-0.05	-0.22	0.00^M
9	3	0.24	0.14	0.00	0.22	0.15	0.00	0.49	0.34	0.00^M
10	3	0.10	0.61	0.00	0.14	0.62	0.00	-0.07	-0.14	0.00^M
11	13	-0.06	-0.05	-0.03	-0.05	-0.06	-0.03	0.09	0.02	0.00^M
12	13	0.02	-0.06	-0.03	0.00	-0.04	-0.03	-0.14	-0.01	-0.03^M
13	13	-0.06	-0.05	0.03	-0.05	-0.06	0.03	0.09	0.02	0.00^M
14	13	0.02	-0.06	0.03	0.00	-0.04	0.03	-0.14	-0.01	0.03^M
15	3	0.07	-0.05	0.00	0.00	0.00	0.00	0.04	-0.12	0.00^M

	37	38	39^M
	AG	BU	BU^M
Frequencies --	377.7849	383.3952	456.8653^M
Red. masses --	10.4045	7.2562	7.3902^M
Frc consts --	0.8749	0.6284	0.9088^M
IR Inten --	0.0000	11.3762	10.5295^M

Atom	AN	X	Y	Z	X	Y	Z	X	Y	Z^M
1	13	0.17	0.02	0.04	0.02	-0.01	0.01	0.03	0.04	-0.03^M
2	13	-0.11	-0.01	0.01	-0.01	0.04	-0.01	-0.02	0.03	-0.01^M
3	13	-0.11	-0.01	-0.01	-0.01	0.04	0.01	-0.02	0.03	0.01^M
4	13	0.17	0.02	-0.04	0.02	-0.01	-0.01	0.03	0.04	0.03^M
5	3	0.14	0.01	0.00	-0.36	0.00	0.00	0.05	-0.02	0.00^M
6	3	-0.51	-0.31	0.00	-0.04	-0.05	0.00	-0.03	0.00	0.00^M
7	3	0.08	0.18	0.00	-0.06	-0.04	0.00	0.00	0.00	0.00^M
8	3	-0.14	-0.01	0.00	-0.36	0.00	0.00	0.05	-0.02	0.00^M

9	3	0.51	0.31	0.00	-0.04	-0.05	0.00	-0.03	0.00	0.00^M
10	3	-0.08	-0.18	0.00	-0.06	-0.04	0.00	0.00	0.00	0.00^M
11	13	0.11	0.01	-0.01	-0.01	0.04	-0.01	-0.02	0.03	-0.01^M
12	13	-0.17	-0.02	-0.04	0.02	-0.01	0.01	0.03	0.04	-0.03^M
13	13	0.11	0.01	0.01	-0.01	0.04	0.01	-0.02	0.03	0.01^M
14	13	-0.17	-0.02	0.04	0.02	-0.01	-0.01	0.03	0.04	0.03^M
15	3	0.00	0.00	0.00	0.80	-0.25	0.00	-0.27	-0.95	0.00^M

^M

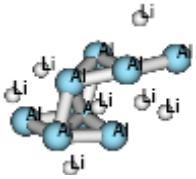
Al4Li3LiAl4Li3-fusion50002-b36311+gx.frq -55.92751901

|State=1-A|HF=-1992.5058039

Al4Li3LiAl4Li3-fusion50001-b36311+gx.frq -65.77283716

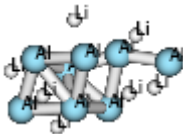
State=1-A|HF=-1992.5214934

Al4Li3LiAl4Li3-fusion50000-b36311+gx.frq -60.9094464

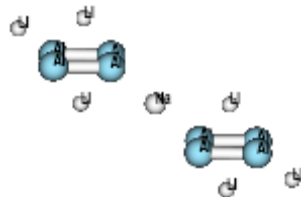


State=1-A|HF=-1992.5137431

Al4Li3LiAl4Li3-fusion123456-b36311+gx.frq



State=1-A\HF=-1992.5137582



Charge = -1 Multiplicity = 1

Li,0,6.1879305193,3.2955578205,0.
Li,0,6.7348416054,0.1924371036,0.
Al,0,4.6356732403,-1.1268711461,1.254931
Al,0,4.6356732403,1.5962420781,1.285832
Al,0,4.6356732403,-1.1268711461,-1.254931
Al,0,4.6356732403,1.5962420781,-1.285832
Li,0,2.5510448796,0.2759311939,0.
Na,0,2.5528915248,-3.2608383317,0.
Li,0,2.5547381701,-6.7976078572,0.
Li,0,-1.6290585557,-6.714113767,0.
Li,0,-1.0821474697,-9.8172344839,0.
Al,0,0.4701098093,-5.3948055172,1.254931
Al,0,0.4701098093,-8.1179187415,1.285832
Al,0,0.4701098093,-5.3948055172,-1.254931
Al,0,0.4701098093,-8.1179187415,-1.285832

State=1-AG\HF=-2147.1896753

		1			2			3		
		AU			BU			AU		
Frequencies --		10.6555			16.7325			22.4920		
Red. masses --		19.6748			13.5920			14.8792		
Frc consts --		0.0013			0.0022			0.0044		
IR Inten --		0.0626			0.3515			0.3162		
Atom	AN	X	Y	Z	X	Y	Z	X	Y	Z
1	3	0.00	0.00	0.19	0.39	-0.20	0.00	0.00	0.00	0.39
2	3	0.00	0.00	-0.27	0.00	-0.26	0.00	0.00	0.00	0.26
3	13	0.16	-0.15	-0.16	-0.16	0.00	0.00	-0.15	-0.07	-0.06
4	13	0.16	-0.16	0.17	0.17	0.00	0.00	-0.17	-0.08	0.09
5	13	-0.16	0.15	-0.16	-0.16	0.00	0.00	0.15	0.07	-0.06
6	13	-0.16	0.16	0.17	0.17	0.00	0.00	0.17	0.08	0.09
7	3	0.00	0.00	0.27	0.02	0.24	0.00	0.00	0.00	-0.26
8	11	0.00	0.00	-0.16	-0.33	0.18	0.00	0.00	0.00	-0.37
9	3	0.00	0.00	0.27	0.02	0.24	0.00	0.00	0.00	-0.26
10	3	0.00	0.00	-0.27	0.00	-0.26	0.00	0.00	0.00	0.26
11	3	0.00	0.00	0.19	0.39	-0.20	0.00	0.00	0.00	0.39
12	13	-0.16	0.15	-0.16	-0.16	0.00	0.00	0.15	0.07	-0.06
13	13	-0.16	0.16	0.17	0.17	0.00	0.00	0.17	0.08	0.09
14	13	0.16	-0.15	-0.16	-0.16	0.00	0.00	-0.15	-0.07	-0.06

15	13	0.16	-0.16	0.17	0.17	0.00	0.00	-0.17	-0.08	0.09

			4			5			6	
			AG			BG			AG	
Frequencies --			45.1839			48.6714			58.6452	
Red. masses --			15.5927			15.4340			15.1647	
Frc consts --			0.0188			0.0215			0.0307	
IR Inten --			0.0000			0.0000			0.0000	
Atom	AN	X	Y	Z	X	Y	Z	X	Y	Z
1	3	0.41	-0.05	0.00	0.00	0.00	-0.37	-0.18	0.33	0.00
2	3	-0.01	-0.08	0.00	0.00	0.00	-0.05	0.15	0.32	0.00
3	13	-0.15	0.18	0.00	0.07	0.08	0.24	0.26	0.11	0.00
4	13	0.14	0.18	0.00	0.13	0.13	-0.02	0.06	0.14	0.00
5	13	-0.15	0.18	0.00	-0.07	-0.08	0.24	0.26	0.11	0.00
6	13	0.14	0.18	0.00	-0.13	-0.13	-0.02	0.06	0.14	0.00
7	3	-0.01	0.33	0.00	0.00	0.00	0.39	0.17	0.00	0.00
8	11	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
9	3	0.01	-0.33	0.00	0.00	0.00	-0.39	-0.17	0.00	0.00
10	3	0.01	0.08	0.00	0.00	0.00	0.05	-0.15	-0.32	0.00
11	3	-0.41	0.05	0.00	0.00	0.00	0.37	0.18	-0.33	0.00
12	13	0.15	-0.18	0.00	0.07	0.08	-0.24	-0.26	-0.11	0.00
13	13	-0.14	-0.18	0.00	0.13	0.13	0.02	-0.06	-0.14	0.00
14	13	0.15	-0.18	0.00	-0.07	-0.08	-0.24	-0.26	-0.11	0.00
15	13	-0.14	-0.18	0.00	-0.13	-0.13	0.02	-0.06	-0.14	0.00

			7			8			9	
			AU			BU			BG	
Frequencies --			80.0699			80.8295			100.3394	
Red. masses --			16.1261			15.2974			9.6964	
Frc consts --			0.0609			0.0589			0.0575	
IR Inten --			2.0096			9.1193			0.0000	
Atom	AN	X	Y	Z	X	Y	Z	X	Y	Z
1	3	0.00	0.00	0.28	-0.41	0.24	0.00	0.00	0.00	-0.15
2	3	0.00	0.00	-0.08	0.05	0.14	0.00	0.00	0.00	0.49
3	13	0.03	0.01	-0.12	0.13	-0.07	0.00	-0.10	-0.07	-0.11
4	13	-0.09	-0.09	0.01	0.01	-0.06	0.01	0.05	0.07	-0.01
5	13	-0.03	-0.01	-0.12	0.13	-0.07	0.00	0.10	0.07	-0.11
6	13	0.09	0.09	0.01	0.01	-0.06	-0.01	-0.05	-0.07	-0.01
7	3	0.00	0.00	-0.38	0.08	-0.01	0.00	0.00	0.00	0.42
8	11	0.00	0.00	0.64	-0.50	0.38	0.00	0.00	0.00	0.00
9	3	0.00	0.00	-0.38	0.08	-0.01	0.00	0.00	0.00	-0.42
10	3	0.00	0.00	-0.08	0.05	0.14	0.00	0.00	0.00	-0.49
11	3	0.00	0.00	0.28	-0.41	0.24	0.00	0.00	0.00	0.15
12	13	-0.03	-0.01	-0.12	0.13	-0.07	0.00	-0.10	-0.07	0.11
13	13	0.09	0.09	0.01	0.01	-0.06	-0.01	0.05	0.07	0.01
14	13	0.03	0.01	-0.12	0.13	-0.07	0.00	0.10	0.07	0.11

15	13	-0.09	-0.09	0.01	0.01	-0.06	0.01	-0.05	-0.07	0.01

			10			11			12	
			AU			AG			BU	
Frequencies --			102.8369			116.7286			119.7720	
Red. masses --			10.0845			9.6881			10.6161	
Frc consts --			0.0628			0.0778			0.0897	
IR Inten --			0.1186			0.0000			4.9915	
Atom	AN	X	Y	Z	X	Y	Z	X	Y	Z
1	3	0.00	0.00	-0.11	-0.52	0.35	0.00	0.49	-0.36	0.00
2	3	0.00	0.00	0.51	0.01	-0.01	0.00	-0.02	0.01	0.00
3	13	-0.08	-0.07	-0.13	-0.10	-0.01	-0.01	0.11	-0.01	0.01
4	13	0.03	0.06	-0.01	0.14	-0.06	0.01	-0.15	0.05	-0.01
5	13	0.08	0.07	-0.13	-0.10	-0.01	0.01	0.11	-0.01	-0.01
6	13	-0.03	-0.06	-0.01	0.14	-0.06	-0.01	-0.15	0.05	0.01
7	3	0.00	0.00	0.38	-0.01	0.20	0.00	0.01	-0.20	0.00
8	11	0.00	0.00	0.17	0.00	0.00	0.00	-0.13	0.15	0.00
9	3	0.00	0.00	0.38	0.01	-0.20	0.00	0.01	-0.20	0.00
10	3	0.00	0.00	0.51	-0.01	0.01	0.00	-0.02	0.01	0.00
11	3	0.00	0.00	-0.11	0.52	-0.35	0.00	0.49	-0.36	0.00
12	13	0.08	0.07	-0.13	0.10	0.01	-0.01	0.11	-0.01	-0.01
13	13	-0.03	-0.06	-0.01	-0.14	0.06	0.01	-0.15	0.05	0.01
14	13	-0.08	-0.07	-0.13	0.10	0.01	0.01	0.11	-0.01	0.01
15	13	0.03	0.06	-0.01	-0.14	0.06	-0.01	-0.15	0.05	-0.01

			13			14			15	
			BG			AU			AU	
Frequencies --			126.1368			126.3806			139.2858	
Red. masses --			16.1413			16.5571			10.8930	
Frc consts --			0.1513			0.1558			0.1245	
IR Inten --			0.0000			0.4827			0.2278	
Atom	AN	X	Y	Z	X	Y	Z	X	Y	Z
1	3	0.00	0.00	0.28	0.00	0.00	-0.29	0.00	0.00	0.00
2	3	0.00	0.00	0.13	0.00	0.00	-0.10	0.00	0.00	0.49
3	13	0.21	-0.08	0.03	-0.22	0.08	-0.04	0.09	-0.09	0.08
4	13	-0.21	0.02	-0.13	0.21	-0.02	0.13	0.11	-0.08	-0.09
5	13	-0.21	0.08	0.03	0.22	-0.08	-0.04	-0.09	0.09	0.08
6	13	0.21	-0.02	-0.13	-0.21	0.02	0.13	-0.11	0.08	-0.09
7	3	0.00	0.00	0.42	0.00	0.00	-0.41	0.00	0.00	-0.41
8	11	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.04	0.00	0.00	-0.02
9	3	0.00	0.00	-0.42	0.00	0.00	-0.41	0.00	0.00	-0.41
10	3	0.00	0.00	-0.13	0.00	0.00	-0.10	0.00	0.00	0.49
11	3	0.00	0.00	-0.28	0.00	0.00	-0.29	0.00	0.00	0.00
12	13	0.21	-0.08	-0.03	0.22	-0.08	-0.04	-0.09	0.09	0.08
13	13	-0.21	0.02	0.13	-0.21	0.02	0.13	-0.11	0.08	-0.09
14	13	-0.21	0.08	-0.03	-0.22	0.08	-0.04	0.09	-0.09	0.08

15	13	0.21	-0.02	0.13	0.21	-0.02	0.13	0.11	-0.08	-0.09

	16	17	18
	BG	BG	AU
Frequencies --	139.5125	156.4233	157.1315
Red. masses --	10.6037	16.7083	16.5089
Frc consts --	0.1216	0.2409	0.2402
IR Inten --	0.0000	0.0000	1.5135

Atom	AN	X	Y	Z	X	Y	Z	X	Y	Z
1	3	0.00	0.00	-0.01	0.00	0.00	-0.28	0.00	0.00	0.28
2	3	0.00	0.00	-0.50	0.00	0.00	0.27	0.00	0.00	-0.26
3	13	-0.09	0.09	-0.07	0.18	0.09	-0.11	-0.19	-0.08	0.10
4	13	-0.11	0.07	0.08	-0.07	0.18	0.17	0.07	-0.18	-0.17
5	13	0.09	-0.09	-0.07	-0.18	-0.09	-0.11	0.19	0.08	0.10
6	13	0.11	-0.07	0.08	0.07	-0.18	0.17	-0.07	0.18	-0.17
7	3	0.00	0.00	0.40	0.00	0.00	-0.33	0.00	0.00	0.34
8	11	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.10
9	3	0.00	0.00	-0.40	0.00	0.00	0.33	0.00	0.00	0.34
10	3	0.00	0.00	0.50	0.00	0.00	-0.27	0.00	0.00	-0.26
11	3	0.00	0.00	0.01	0.00	0.00	0.28	0.00	0.00	0.28
12	13	-0.09	0.09	0.07	0.18	0.09	0.11	0.19	0.08	0.10
13	13	-0.11	0.07	-0.08	-0.07	0.18	-0.17	-0.07	0.18	-0.17
14	13	0.09	-0.09	0.07	-0.18	-0.09	0.11	-0.19	-0.08	0.10
15	13	0.11	-0.07	-0.08	0.07	-0.18	-0.17	0.07	-0.18	-0.17

	19	20	21
	BU	BG	AU
Frequencies --	168.5546	208.1509	209.4063
Red. masses --	20.9282	14.0124	14.0277
Frc consts --	0.3503	0.3577	0.3624
IR Inten --	106.4589	0.0000	13.4072

Atom	AN	X	Y	Z	X	Y	Z	X	Y	Z
1	3	-0.07	-0.15	0.00	0.00	0.00	-0.49	0.00	0.00	0.49
2	3	0.00	-0.13	0.00	0.00	0.00	-0.24	0.00	0.00	0.25
3	13	-0.04	0.02	0.01	-0.03	-0.27	0.06	0.04	0.26	-0.05
4	13	-0.04	-0.15	0.00	-0.09	0.05	0.04	0.09	-0.04	-0.04
5	13	-0.04	0.02	-0.01	0.03	0.27	0.06	-0.04	-0.26	-0.05
6	13	-0.04	-0.15	0.00	0.09	-0.05	0.04	-0.09	0.04	-0.04
7	3	-0.11	0.15	0.00	0.00	0.00	-0.15	0.00	0.00	0.15
8	11	0.51	0.69	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	-0.09
9	3	-0.11	0.15	0.00	0.00	0.00	0.15	0.00	0.00	0.15
10	3	0.00	-0.13	0.00	0.00	0.00	0.24	0.00	0.00	0.25
11	3	-0.07	-0.15	0.00	0.00	0.00	0.49	0.00	0.00	0.49
12	13	-0.04	0.02	-0.01	-0.03	-0.27	-0.06	-0.04	-0.26	-0.05
13	13	-0.04	-0.15	0.00	-0.09	0.05	-0.04	-0.09	0.04	-0.04
14	13	-0.04	0.02	0.01	0.03	0.27	-0.06	0.04	0.26	-0.05

15	13	-0.04	-0.15	0.00	0.09	-0.05	-0.04	0.09	-0.04	-0.04

		22			23			24		
		AG			BU			AG		
Frequencies --		224.4682			226.1513			230.4691		
Red. masses --		9.0542			8.1300			12.9618		
Frc consts --		0.2688			0.2450			0.4056		
IR Inten --		0.0000			10.0598			0.0000		
Atom	AN	X	Y	Z	X	Y	Z	X	Y	Z
1	3	-0.07	0.22	0.00	0.09	-0.17	0.00	0.11	0.15	0.00
2	3	-0.07	-0.42	0.00	0.03	0.48	0.00	-0.21	0.14	0.00
3	13	-0.02	-0.06	0.04	0.01	0.00	-0.04	0.01	-0.24	0.00
4	13	0.02	0.13	-0.06	-0.02	-0.08	0.06	-0.03	0.13	0.01
5	13	-0.02	-0.06	-0.04	0.01	0.00	0.04	0.01	-0.24	0.00
6	13	0.02	0.13	0.06	-0.02	-0.08	-0.06	-0.03	0.13	-0.01
7	3	0.09	-0.45	0.00	-0.05	0.45	0.00	0.16	0.48	0.00
8	11	0.00	0.00	0.00	-0.03	-0.09	0.00	0.00	0.00	0.00
9	3	-0.09	0.45	0.00	-0.05	0.45	0.00	-0.16	-0.48	0.00
10	3	0.07	0.42	0.00	0.03	0.48	0.00	0.21	-0.14	0.00
11	3	0.07	-0.22	0.00	0.09	-0.17	0.00	-0.11	-0.15	0.00
12	13	0.02	0.06	0.04	0.01	0.00	0.04	-0.01	0.24	0.00
13	13	-0.02	-0.13	-0.06	-0.02	-0.08	-0.06	0.03	-0.13	0.01
14	13	0.02	0.06	-0.04	0.01	0.00	-0.04	-0.01	0.24	0.00
15	13	-0.02	-0.13	0.06	-0.02	-0.08	0.06	0.03	-0.13	-0.01

		25			26			27		
		BU			AG			BU		
Frequencies --		231.8513			241.7700			244.0177		
Red. masses --		13.7257			8.1960			8.9979		
Frc consts --		0.4347			0.2823			0.3157		
IR Inten --		33.9676			0.0000			6.4131		
Atom	AN	X	Y	Z	X	Y	Z	X	Y	Z
1	3	-0.07	-0.20	0.00	-0.10	-0.01	0.00	0.11	0.05	0.00
2	3	0.22	0.08	0.00	0.04	-0.56	0.00	-0.07	0.52	0.00
3	13	-0.01	0.24	-0.02	0.08	0.05	0.00	-0.09	-0.08	0.01
4	13	0.04	-0.15	0.01	-0.07	-0.02	0.00	0.07	0.03	-0.02
5	13	-0.01	0.24	0.02	0.08	0.05	0.00	-0.09	-0.08	-0.01
6	13	0.04	-0.15	-0.01	-0.07	-0.02	0.00	0.07	0.03	0.02
7	3	-0.18	-0.44	0.00	0.02	0.38	0.00	0.00	-0.40	0.00
8	11	-0.13	-0.06	0.00	0.00	0.00	0.00	0.07	0.12	0.00
9	3	-0.18	-0.44	0.00	-0.02	-0.38	0.00	0.00	-0.40	0.00
10	3	0.22	0.08	0.00	-0.04	0.56	0.00	-0.07	0.52	0.00
11	3	-0.07	-0.20	0.00	0.10	0.01	0.00	0.11	0.05	0.00
12	13	-0.01	0.24	0.02	-0.08	-0.05	0.00	-0.09	-0.08	-0.01
13	13	0.04	-0.15	-0.01	0.07	0.02	0.00	0.07	0.03	0.02
14	13	-0.01	0.24	-0.02	-0.08	-0.05	0.00	-0.09	-0.08	0.01

15	13	0.04	-0.15	0.01	0.07	0.02	0.00	0.07	0.03	-0.02

			28			29			30	
			BG			AU			BU	
Frequencies --			253.6236			253.8021			288.6774	
Red. masses --			12.9561			13.0199			17.5666	
Frc consts --			0.4910			0.4941			0.8625	
IR Inten --			0.0000			8.5888			19.6855	
Atom	AN	X	Y	Z	X	Y	Z	X	Y	Z
1	3	0.00	0.00	-0.55	0.00	0.00	0.55	0.17	0.23	0.00
2	3	0.00	0.00	0.17	0.00	0.00	-0.17	0.18	0.10	0.00
3	13	0.02	0.09	0.01	-0.02	-0.10	-0.01	0.02	0.00	0.06
4	13	-0.10	-0.23	0.03	0.10	0.24	-0.03	-0.02	-0.06	-0.35
5	13	-0.02	-0.09	0.01	0.02	0.10	-0.01	0.02	0.00	-0.06
6	13	0.10	0.23	0.03	-0.10	-0.24	-0.03	-0.02	-0.06	0.35
7	3	0.00	0.00	0.15	0.00	0.00	-0.15	-0.27	0.19	0.00
8	11	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.01	-0.03	-0.04	0.00
9	3	0.00	0.00	-0.15	0.00	0.00	-0.15	-0.27	0.19	0.00
10	3	0.00	0.00	-0.17	0.00	0.00	-0.17	0.18	0.10	0.00
11	3	0.00	0.00	0.55	0.00	0.00	0.55	0.17	0.23	0.00
12	13	0.02	0.09	-0.01	0.02	0.10	-0.01	0.02	0.00	-0.06
13	13	-0.10	-0.23	-0.03	-0.10	-0.24	-0.03	-0.02	-0.06	0.35
14	13	-0.02	-0.09	-0.01	-0.02	-0.10	-0.01	0.02	0.00	0.06
15	13	0.10	0.23	-0.03	0.10	0.24	-0.03	-0.02	-0.06	-0.35

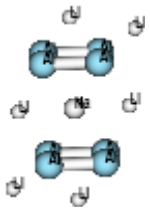
			31			32			33	
			AG			AG			BU	
Frequencies --			288.6903			328.9791			328.9901	
Red. masses --			17.6737			15.3742			15.7988	
Frc consts --			0.8678			0.9803			1.0075	
IR Inten --			0.0000			0.0000			13.9088	
Atom	AN	X	Y	Z	X	Y	Z	X	Y	Z
1	3	-0.17	-0.23	0.00	-0.03	-0.09	0.00	0.03	0.09	0.00
2	3	-0.17	-0.10	0.00	-0.46	0.08	0.00	0.49	-0.07	0.00
3	13	-0.01	0.00	-0.06	0.02	0.06	0.31	-0.03	-0.06	-0.32
4	13	0.02	0.06	0.35	0.02	-0.06	0.01	-0.02	0.05	-0.01
5	13	-0.01	0.00	0.06	0.02	0.06	-0.31	-0.03	-0.06	0.32
6	13	0.02	0.06	-0.35	0.02	-0.06	-0.01	-0.02	0.05	0.01
7	3	0.28	-0.18	0.00	0.24	0.06	0.00	-0.15	-0.06	0.00
8	11	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.02	0.05	0.00
9	3	-0.28	0.18	0.00	-0.24	-0.06	0.00	-0.15	-0.06	0.00
10	3	0.17	0.10	0.00	0.46	-0.08	0.00	0.49	-0.07	0.00
11	3	0.17	0.23	0.00	0.03	0.09	0.00	0.03	0.09	0.00
12	13	0.01	0.00	-0.06	-0.02	-0.06	0.31	-0.03	-0.06	0.32
13	13	-0.02	-0.06	0.35	-0.02	0.06	0.01	-0.02	0.05	0.01
14	13	0.01	0.00	0.06	-0.02	-0.06	-0.31	-0.03	-0.06	-0.32

15	13	-0.02	-0.06	-0.35	-0.02	0.06	-0.01	-0.02	0.05	-0.01

			34			35			36	
			BU			AG			BU	
Frequencies --			333.9351			335.4414			346.8421	
Red. masses --			8.0656			7.9416			9.5418	
Frc consts --			0.5299			0.5265			0.6763	
IR Inten --			21.4699			0.0000			4.7560	
Atom	AN	X	Y	Z	X	Y	Z	X	Y	Z
1	3	0.02	0.04	0.00	-0.02	-0.04	0.00	-0.11	-0.18	0.00
2	3	0.45	0.04	0.00	-0.50	-0.04	0.00	-0.40	0.03	0.00
3	13	-0.07	0.01	0.07	0.07	0.00	-0.06	0.00	0.05	-0.12
4	13	-0.06	-0.02	0.00	0.06	0.01	0.00	0.01	-0.03	-0.11
5	13	-0.07	0.01	-0.07	0.07	0.00	0.06	0.00	0.05	0.12
6	13	-0.06	-0.02	0.00	0.06	0.01	0.00	0.01	-0.03	0.11
7	3	0.51	0.01	0.00	-0.48	-0.01	0.00	0.48	-0.01	0.00
8	11	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	-0.01	0.00
9	3	0.51	0.01	0.00	0.48	0.01	0.00	0.48	-0.01	0.00
10	3	0.45	0.04	0.00	0.50	0.04	0.00	-0.40	0.03	0.00
11	3	0.02	0.04	0.00	0.02	0.04	0.00	-0.11	-0.18	0.00
12	13	-0.07	0.01	-0.07	-0.07	0.00	-0.06	0.00	0.05	0.12
13	13	-0.06	-0.02	0.00	-0.06	-0.01	0.00	0.01	-0.03	0.11
14	13	-0.07	0.01	0.07	-0.07	0.00	0.06	0.00	0.05	-0.12
15	13	-0.06	-0.02	0.00	-0.06	-0.01	0.00	0.01	-0.03	-0.11

			37			38			39	
			AG			BU			AG	
Frequencies --			347.1458			374.1933			374.8854	
Red. masses --			9.7947			8.2748			8.2768	
Frc consts --			0.6954			0.6827			0.6853	
IR Inten --			0.0000			14.5141			0.0000	
Atom	AN	X	Y	Z	X	Y	Z	X	Y	Z
1	3	0.12	0.19	0.00	0.37	0.53	0.00	0.37	0.53	0.00
2	3	0.35	-0.03	0.00	-0.19	-0.04	0.00	-0.19	-0.03	0.00
3	13	0.01	-0.04	0.14	0.00	0.04	-0.04	0.00	0.04	-0.04
4	13	0.00	0.02	0.12	-0.03	-0.09	0.05	-0.03	-0.09	0.05
5	13	0.01	-0.04	-0.14	0.00	0.04	0.04	0.00	0.04	0.04
6	13	0.00	0.02	-0.12	-0.03	-0.09	-0.05	-0.03	-0.09	-0.05
7	3	-0.50	0.01	0.00	0.09	-0.04	0.00	0.12	-0.04	0.00
8	11	0.00	0.00	0.00	-0.01	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
9	3	0.50	-0.01	0.00	0.09	-0.04	0.00	-0.12	0.04	0.00
10	3	-0.35	0.03	0.00	-0.19	-0.04	0.00	0.19	0.03	0.00
11	3	-0.12	-0.19	0.00	0.37	0.53	0.00	-0.37	-0.53	0.00
12	13	-0.01	0.04	0.14	0.00	0.04	0.04	0.00	-0.04	-0.04
13	13	0.00	-0.02	0.12	-0.03	-0.09	-0.05	0.03	0.09	0.05
14	13	-0.01	0.04	-0.14	0.00	0.04	-0.04	0.00	-0.04	0.04

15	13	0.00	-0.02	-0.12	-0.03	-0.09	0.05	0.03	0.09	-0.05



Charge = -1 Multiplicity = 1

Al,0,-2.8818969868,0.0699592836,1.2938094866
Al,0,1.5774787308,-2.4601623379,1.2478337582
Al,0,1.5774787308,-2.4601623379,-1.2478337582
Al,0,-2.8818969868,0.0699592836,-1.2938094866
Li,0,4.0616266935,-2.2401093488,0.
Li,0,-4.9716379387,-0.8340236265,0.
Li,0,-1.3565874842,-2.3413471468,0.
Li,0,-4.0616266935,2.2401093488,0.
Li,0,4.9716379387,0.8340236265,0.
Li,0,1.3565874842,2.3413471468,0.
Al,0,-1.5774787308,2.4601623379,-1.2478337582
Al,0,2.8818969868,-0.0699592836,-1.2938094866
Al,0,-1.5774787308,2.4601623379,1.2478337582
Al,0,2.8818969868,-0.0699592836,1.2938094866
Na,0,0.,0.,0.

State=1-AG\HF=-2147.1956574

		1			2			3		
		AU			AU			BG		
Frequencies --		-59.0815			16.6870			56.8659		
Red. masses --		16.6337			20.8387			18.6906		
Frc consts --		0.0342			0.0034			0.0356		
IR Inten --		0.5516			0.6485			0.0000		
Atom	AN	X	Y	Z	X	Y	Z	X	Y	Z
1	13	0.12	0.01	-0.02	-0.05	0.19	-0.19	-0.21	0.04	-0.18
2	13	-0.12	0.00	-0.02	-0.01	-0.18	0.25	-0.21	-0.04	0.15
3	13	0.12	0.00	-0.02	0.01	0.18	0.25	0.21	0.04	0.15
4	13	-0.12	-0.01	-0.02	0.05	-0.19	-0.19	0.21	-0.04	-0.18
5	3	0.00	0.00	-0.26	0.00	0.00	0.05	0.00	0.00	-0.45
6	3	0.00	0.00	-0.18	0.00	0.00	-0.39	0.00	0.00	0.06
7	3	0.00	0.00	-0.34	0.00	0.00	-0.02	0.00	0.00	0.02
8	3	0.00	0.00	-0.26	0.00	0.00	0.05	0.00	0.00	0.45
9	3	0.00	0.00	-0.18	0.00	0.00	-0.39	0.00	0.00	-0.06
10	3	0.00	0.00	-0.34	0.00	0.00	-0.02	0.00	0.00	-0.02
11	13	-0.12	0.00	-0.02	-0.01	-0.18	0.25	0.21	0.04	-0.15

12	13	0.12	0.01	-0.02	-0.05	0.19	-0.19	0.21	-0.04	0.18
13	13	0.12	0.00	-0.02	0.01	0.18	0.25	-0.21	-0.04	-0.15
14	13	-0.12	-0.01	-0.02	0.05	-0.19	-0.19	-0.21	0.04	0.18
15	11	0.00	0.00	0.67	0.00	0.00	-0.04	0.00	0.00	0.00

	4	5	6
	BU	BG	AU
Frequencies --	66.5932	67.4637	72.6316
Red. masses --	9.0067	8.2095	11.8286
Frc consts --	0.0235	0.0220	0.0368
IR Inten --	0.2481	0.0000	0.9342

Atom	AN	X	Y	Z	X	Y	Z	X	Y	Z
1	13	0.06	0.01	-0.01	0.06	-0.05	0.05	0.19	-0.01	0.02
2	13	-0.13	0.00	0.00	-0.06	-0.03	0.05	-0.12	-0.02	0.01
3	13	-0.13	0.00	0.00	0.06	0.03	0.05	0.12	0.02	0.01
4	13	0.06	0.01	0.01	-0.06	0.05	0.05	-0.19	0.01	0.02
5	3	-0.02	-0.23	0.00	0.00	0.00	-0.03	0.00	0.00	-0.27
6	3	0.55	-0.28	0.00	0.00	0.00	0.01	0.00	0.00	-0.19
7	3	0.02	0.12	0.00	0.00	0.00	-0.69	0.00	0.00	0.52
8	3	-0.02	-0.23	0.00	0.00	0.00	0.03	0.00	0.00	-0.27
9	3	0.55	-0.28	0.00	0.00	0.00	-0.01	0.00	0.00	-0.19
10	3	0.02	0.12	0.00	0.00	0.00	0.69	0.00	0.00	0.52
11	13	-0.13	0.00	0.00	0.06	0.03	-0.05	-0.12	-0.02	0.01
12	13	0.06	0.01	-0.01	-0.06	0.05	-0.05	0.19	-0.01	0.02
13	13	-0.13	0.00	0.00	-0.06	-0.03	-0.05	0.12	0.02	0.01
14	13	0.06	0.01	0.01	0.06	-0.05	-0.05	-0.19	0.01	0.02
15	11	-0.02	0.15	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	-0.19

	7	8	9
	AG	AU	AG
Frequencies --	73.7010	90.6261	95.9661
Red. masses --	10.1876	10.4753	22.2009
Frc consts --	0.0326	0.0507	0.1205
IR Inten --	0.0000	0.0440	0.0000

Atom	AN	X	Y	Z	X	Y	Z	X	Y	Z
1	13	0.08	0.13	-0.01	0.05	0.07	-0.06	0.32	-0.02	0.00
2	13	0.07	-0.11	0.01	0.11	0.04	-0.08	-0.30	0.01	0.00
3	13	0.07	-0.11	-0.01	-0.11	-0.04	-0.08	-0.30	0.01	0.00
4	13	0.08	0.13	0.01	-0.05	-0.07	-0.06	0.32	-0.02	0.00
5	3	-0.01	0.09	0.00	0.00	0.00	0.44	-0.30	-0.04	0.00
6	3	0.61	-0.18	0.00	0.00	0.00	-0.16	0.02	0.15	0.00
7	3	0.06	0.01	0.00	0.00	0.00	0.43	0.07	-0.01	0.00
8	3	0.01	-0.09	0.00	0.00	0.00	0.44	0.30	0.04	0.00
9	3	-0.61	0.18	0.00	0.00	0.00	-0.16	-0.02	-0.15	0.00
10	3	-0.06	-0.01	0.00	0.00	0.00	0.43	-0.07	0.01	0.00
11	13	-0.07	0.11	-0.01	0.11	0.04	-0.08	0.30	-0.01	0.00

12	13	-0.08	-0.13	0.01	0.05	0.07	-0.06	-0.32	0.02	0.00
13	13	-0.07	0.11	0.01	-0.11	-0.04	-0.08	0.30	-0.01	0.00
14	13	-0.08	-0.13	-0.01	-0.05	-0.07	-0.06	-0.32	0.02	0.00
15	11	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.24	0.00	0.00	0.00

	10	11	12
	BU	BG	AU
Frequencies --	100.4356	102.2426	102.9544
Red. masses --	12.9115	16.3404	16.9455
Frc consts --	0.0767	0.1006	0.1058
IR Inten --	16.5960	0.0000	0.4892

Atom	AN	X	Y	Z	X	Y	Z	X	Y	Z
1	13	-0.19	0.07	-0.01	-0.23	-0.09	-0.09	0.18	0.05	0.14
2	13	0.13	0.03	0.00	0.21	-0.02	-0.05	0.24	-0.09	-0.01
3	13	0.13	0.03	0.00	-0.21	0.02	-0.05	-0.24	0.09	-0.01
4	13	-0.19	0.07	0.01	0.23	0.09	-0.09	-0.18	-0.05	0.14
5	3	-0.02	0.14	0.00	0.00	0.00	0.18	0.00	0.00	-0.13
6	3	0.48	-0.25	0.00	0.00	0.00	0.37	0.00	0.00	-0.30
7	3	-0.02	-0.18	0.00	0.00	0.00	-0.31	0.00	0.00	-0.38
8	3	-0.02	0.14	0.00	0.00	0.00	-0.18	0.00	0.00	-0.13
9	3	0.48	-0.25	0.00	0.00	0.00	-0.37	0.00	0.00	-0.30
10	3	-0.02	-0.18	0.00	0.00	0.00	0.31	0.00	0.00	-0.38
11	13	0.13	0.03	0.00	-0.21	0.02	0.05	0.24	-0.09	-0.01
12	13	-0.19	0.07	-0.01	0.23	0.09	0.09	0.18	0.05	0.14
13	13	0.13	0.03	0.00	0.21	-0.02	0.05	-0.24	0.09	-0.01
14	13	-0.19	0.07	0.01	-0.23	-0.09	0.09	-0.18	-0.05	0.14
15	11	0.00	-0.29	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	-0.11

	13	14	15
	AG	BG	AU
Frequencies --	103.5913	132.3798	134.7943
Red. masses --	11.8628	11.1758	23.2270
Frc consts --	0.0750	0.1154	0.2486
IR Inten --	0.0000	0.0000	1.4220

Atom	AN	X	Y	Z	X	Y	Z	X	Y	Z
1	13	0.15	0.04	0.01	0.05	0.08	0.00	0.10	-0.25	-0.21
2	13	0.18	-0.07	0.00	0.16	-0.13	0.01	0.18	0.11	0.19
3	13	0.18	-0.07	0.00	-0.16	0.13	0.01	-0.18	-0.11	0.19
4	13	0.15	0.04	-0.01	-0.05	-0.08	0.00	-0.10	0.25	-0.21
5	3	0.02	0.06	0.00	0.00	0.00	-0.61	0.00	0.00	-0.24
6	3	-0.41	0.31	0.00	0.00	0.00	-0.13	0.00	0.00	0.19
7	3	0.33	0.00	0.00	0.00	0.00	-0.05	0.00	0.00	0.06
8	3	-0.02	-0.06	0.00	0.00	0.00	0.61	0.00	0.00	-0.24
9	3	0.41	-0.31	0.00	0.00	0.00	0.13	0.00	0.00	0.19
10	3	-0.33	0.00	0.00	0.00	0.00	0.05	0.00	0.00	0.06
11	13	-0.18	0.07	0.00	-0.16	0.13	-0.01	0.18	0.11	0.19

12	13	-0.15	-0.04	-0.01	-0.05	-0.08	0.00	0.10	-0.25	-0.21
13	13	-0.18	0.07	0.00	0.16	-0.13	-0.01	-0.18	-0.11	0.19
14	13	-0.15	-0.04	0.01	0.05	0.08	0.00	-0.10	0.25	-0.21
15	11	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.08

	16	17	18
	BG	AU	BU
Frequencies --	144.6665	153.6950	153.9524
Red. masses --	25.0864	11.8729	14.4935
Frc consts --	0.3093	0.1652	0.2024
IR Inten --	0.0000	4.1023	2.9780

Atom	AN	X	Y	Z	X	Y	Z	X	Y	Z
1	13	-0.17	0.20	0.24	0.10	0.01	-0.01	0.13	0.10	-0.01
2	13	0.10	0.20	0.22	-0.09	0.17	0.07	-0.11	0.05	-0.02
3	13	-0.10	-0.20	0.22	0.09	-0.17	0.07	-0.11	0.05	0.02
4	13	0.17	-0.20	0.24	-0.10	-0.01	-0.01	0.13	0.10	0.01
5	3	0.00	0.00	0.08	0.00	0.00	0.46	-0.03	-0.17	0.00
6	3	0.00	0.00	-0.18	0.00	0.00	-0.19	-0.01	0.17	0.00
7	3	0.00	0.00	-0.08	0.00	0.00	-0.35	-0.31	-0.36	0.00
8	3	0.00	0.00	-0.08	0.00	0.00	0.46	-0.03	-0.17	0.00
9	3	0.00	0.00	0.18	0.00	0.00	-0.19	-0.01	0.17	0.00
10	3	0.00	0.00	0.08	0.00	0.00	-0.35	-0.31	-0.36	0.00
11	13	-0.10	-0.20	-0.22	-0.09	0.17	0.07	-0.11	0.05	-0.02
12	13	0.17	-0.20	-0.24	0.10	0.01	-0.01	0.13	0.10	-0.01
13	13	0.10	0.20	-0.22	0.09	-0.17	0.07	-0.11	0.05	0.02
14	13	-0.17	0.20	-0.24	-0.10	-0.01	-0.01	0.13	0.10	0.01
15	11	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	-0.19	0.15	-0.48	0.00

	19	20	21
	BU	AG	BG
Frequencies --	163.3319	175.9924	202.2221
Red. masses --	11.0552	7.7876	13.8452
Frc consts --	0.1738	0.1421	0.3336
IR Inten --	14.6952	0.0000	0.0000

Atom	AN	X	Y	Z	X	Y	Z	X	Y	Z
1	13	0.04	-0.04	-0.01	0.08	-0.01	-0.01	-0.10	0.10	0.05
2	13	-0.04	0.10	0.01	0.06	0.00	0.00	-0.05	-0.24	-0.05
3	13	-0.04	0.10	-0.01	0.06	0.00	0.00	0.05	0.24	-0.05
4	13	0.04	-0.04	0.01	0.08	-0.01	0.01	0.10	-0.10	0.05
5	3	0.06	-0.01	0.00	0.00	0.16	0.00	0.00	0.00	0.41
6	3	-0.04	-0.01	0.00	-0.06	0.05	0.00	0.00	0.00	-0.40
7	3	0.60	-0.14	0.00	-0.67	-0.03	0.00	0.00	0.00	-0.03
8	3	0.06	-0.01	0.00	0.00	-0.16	0.00	0.00	0.00	-0.41
9	3	-0.04	-0.01	0.00	0.06	-0.05	0.00	0.00	0.00	0.40
10	3	0.60	-0.14	0.00	0.67	0.03	0.00	0.00	0.00	0.03
11	13	-0.04	0.10	0.01	-0.06	0.00	0.00	0.05	0.24	0.05

12	13	0.04	-0.04	-0.01	-0.08	0.01	0.01	0.10	-0.10	-0.05
13	13	-0.04	0.10	-0.01	-0.06	0.00	0.00	-0.05	-0.24	0.05
14	13	0.04	-0.04	0.01	-0.08	0.01	-0.01	-0.10	0.10	-0.05
15	11	-0.38	-0.19	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00

	22	23	24
	AU	AG	BU
Frequencies --	207.3599	221.2973	224.7499
Red. masses --	12.7570	17.2747	11.7934
Frc consts --	0.3232	0.4984	0.3510
IR Inten --	11.9658	0.0000	62.9714

Atom	AN	X	Y	Z	X	Y	Z	X	Y	Z
1	13	0.12	-0.09	-0.05	-0.01	0.24	-0.07	-0.05	0.15	-0.04
2	13	-0.05	-0.21	-0.04	-0.03	0.25	0.04	-0.03	-0.15	-0.02
3	13	0.05	0.21	-0.04	-0.03	0.25	-0.04	-0.03	-0.15	0.02
4	13	-0.12	0.09	-0.05	-0.01	0.24	0.07	-0.05	0.15	0.04
5	3	0.00	0.00	0.42	0.22	0.26	0.00	-0.18	-0.17	0.00
6	3	0.00	0.00	0.40	0.07	0.34	0.00	-0.01	0.22	0.00
7	3	0.00	0.00	-0.13	0.03	0.07	0.00	0.52	0.00	0.00
8	3	0.00	0.00	0.42	-0.22	-0.26	0.00	-0.18	-0.17	0.00
9	3	0.00	0.00	0.40	-0.07	-0.34	0.00	-0.01	0.22	0.00
10	3	0.00	0.00	-0.13	-0.03	-0.07	0.00	0.52	0.00	0.00
11	13	-0.05	-0.21	-0.04	0.03	-0.25	-0.04	-0.03	-0.15	-0.02
12	13	0.12	-0.09	-0.05	0.01	-0.24	0.07	-0.05	0.15	-0.04
13	13	0.05	0.21	-0.04	0.03	-0.25	0.04	-0.03	-0.15	0.02
14	13	-0.12	0.09	-0.05	0.01	-0.24	-0.07	-0.05	0.15	0.04
15	11	0.00	0.00	-0.01	0.00	0.00	0.00	0.21	0.01	0.00

	25	26	27
	BU	AU	AG
Frequencies --	234.7738	244.3311	247.9896
Red. masses --	17.9079	11.4571	8.5106
Frc consts --	0.5816	0.4030	0.3084
IR Inten --	27.2368	12.8660	0.0000

Atom	AN	X	Y	Z	X	Y	Z	X	Y	Z
1	13	0.07	0.12	-0.08	0.08	0.20	-0.05	0.06	0.01	0.04
2	13	0.10	-0.15	-0.02	0.02	0.07	0.00	0.07	0.09	-0.02
3	13	0.10	-0.15	0.02	-0.02	-0.07	0.00	0.07	0.09	0.02
4	13	0.07	0.12	0.08	-0.08	-0.20	-0.05	0.06	0.01	-0.04
5	3	-0.04	-0.10	0.00	0.00	0.00	-0.18	0.04	-0.65	0.00
6	3	0.11	0.25	0.00	0.00	0.00	0.60	0.10	-0.03	0.00
7	3	-0.32	0.01	0.00	0.00	0.00	-0.03	-0.08	0.12	0.00
8	3	-0.04	-0.10	0.00	0.00	0.00	-0.18	-0.04	0.65	0.00
9	3	0.11	0.25	0.00	0.00	0.00	0.60	-0.10	0.03	0.00
10	3	-0.32	0.01	0.00	0.00	0.00	-0.03	0.08	-0.12	0.00
11	13	0.10	-0.15	-0.02	0.02	0.07	0.00	-0.07	-0.09	0.02

12	13	0.07	0.12	-0.08	0.08	0.20	-0.05	-0.06	-0.01	-0.04
13	13	0.10	-0.15	0.02	-0.02	-0.07	0.00	-0.07	-0.09	-0.02
14	13	0.07	0.12	0.08	-0.08	-0.20	-0.05	-0.06	-0.01	0.04
15	11	-0.62	0.05	0.00	0.00	0.00	-0.03	0.00	0.00	0.00

	28	29	30
	BG	BU	AG
Frequencies --	250.8600	250.9022	277.8998
Red. masses --	11.0882	8.5367	7.8342
Frc consts --	0.4111	0.3166	0.3565
IR Inten --	0.0000	1.5816	0.0000

Atom	AN	X	Y	Z	X	Y	Z	X	Y	Z
1	13	-0.08	-0.20	0.04	0.06	0.01	0.04	0.00	0.01	0.10
2	13	0.01	0.05	-0.01	-0.07	-0.09	0.02	-0.02	-0.01	0.00
3	13	-0.01	-0.05	-0.01	-0.07	-0.09	-0.02	-0.02	-0.01	0.00
4	13	0.08	0.20	0.04	0.06	0.01	-0.04	0.00	0.01	-0.10
5	3	0.00	0.00	-0.17	-0.04	0.67	0.00	0.01	0.15	0.00
6	3	0.00	0.00	-0.60	0.11	-0.02	0.00	-0.08	-0.09	0.00
7	3	0.00	0.00	0.04	0.04	0.01	0.00	-0.02	0.66	0.00
8	3	0.00	0.00	0.17	-0.04	0.67	0.00	-0.01	-0.15	0.00
9	3	0.00	0.00	0.60	0.11	-0.02	0.00	0.08	0.09	0.00
10	3	0.00	0.00	-0.04	0.04	0.01	0.00	0.02	-0.66	0.00
11	13	-0.01	-0.05	0.01	-0.07	-0.09	0.02	0.02	0.01	0.00
12	13	0.08	0.20	-0.04	0.06	0.01	0.04	0.00	-0.01	-0.10
13	13	0.01	0.05	0.01	-0.07	-0.09	-0.02	0.02	0.01	0.00
14	13	-0.08	-0.20	-0.04	0.06	0.01	-0.04	0.00	-0.01	0.10
15	11	0.00	0.00	0.00	-0.01	-0.06	0.00	0.00	0.00	0.00

	31	32	33
	BU	AG	BU
Frequencies --	286.0190	288.1577	317.5900
Red. masses --	20.1869	15.5593	8.5336
Frc consts --	0.9730	0.7612	0.5071
IR Inten --	8.5615	0.0000	7.1081

Atom	AN	X	Y	Z	X	Y	Z	X	Y	Z
1	13	0.03	0.10	0.38	-0.02	-0.07	-0.31	0.00	0.00	0.00
2	13	0.04	-0.04	0.06	0.03	-0.03	0.07	0.00	-0.01	-0.01
3	13	0.04	-0.04	-0.06	0.03	-0.03	-0.07	0.00	-0.01	0.01
4	13	0.03	0.10	-0.38	-0.02	-0.07	0.31	0.00	0.00	0.00
5	3	-0.25	-0.21	0.00	-0.22	-0.13	0.00	0.02	-0.06	0.00
6	3	-0.12	-0.21	0.00	0.09	0.16	0.00	-0.04	-0.03	0.00
7	3	0.03	-0.05	0.00	0.00	0.43	0.00	0.00	0.67	0.00
8	3	-0.25	-0.21	0.00	0.22	0.13	0.00	0.02	-0.06	0.00
9	3	-0.12	-0.21	0.00	-0.09	-0.16	0.00	-0.04	-0.03	0.00
10	3	0.03	-0.05	0.00	0.00	-0.43	0.00	0.00	0.67	0.00
11	13	0.04	-0.04	0.06	-0.03	0.03	-0.07	0.00	-0.01	-0.01

12	13	0.03	0.10	0.38	0.02	0.07	0.31	0.00	0.00	0.00
13	13	0.04	-0.04	-0.06	-0.03	0.03	0.07	0.00	-0.01	0.01
14	13	0.03	0.10	-0.38	0.02	0.07	-0.31	0.00	0.00	0.00
15	11	-0.12	-0.01	0.00	0.00	0.00	0.00	-0.01	-0.31	0.00

	34	35	36
	BU	AG	AG
Frequencies --	340.8423	343.4783	344.8538
Red. masses --	10.8009	10.6253	14.1307
Frc consts --	0.7393	0.7386	0.9901
IR Inten --	11.3509	0.0000	0.0000

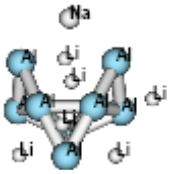
Atom	AN	X	Y	Z	X	Y	Z	X	Y	Z
1	13	-0.05	0.04	0.02	0.05	-0.03	-0.02	0.04	0.00	-0.12
2	13	-0.04	-0.04	0.20	-0.04	-0.04	0.20	-0.04	-0.02	-0.27
3	13	-0.04	-0.04	-0.20	-0.04	-0.04	-0.20	-0.04	-0.02	0.27
4	13	-0.05	0.04	-0.02	0.05	-0.03	0.02	0.04	0.00	0.12
5	3	0.62	-0.07	0.00	0.62	-0.06	0.00	0.52	0.00	0.00
6	3	0.03	0.12	0.00	-0.05	-0.14	0.00	-0.09	-0.19	0.00
7	3	0.00	0.00	0.00	0.00	-0.01	0.00	0.01	0.06	0.00
8	3	0.62	-0.07	0.00	-0.62	0.06	0.00	-0.52	0.00	0.00
9	3	0.03	0.12	0.00	0.05	0.14	0.00	0.09	0.19	0.00
10	3	0.00	0.00	0.00	0.00	0.01	0.00	-0.01	-0.06	0.00
11	13	-0.04	-0.04	0.20	0.04	0.04	-0.20	0.04	0.02	0.27
12	13	-0.05	0.04	0.02	-0.05	0.03	0.02	-0.04	0.00	0.12
13	13	-0.04	-0.04	-0.20	0.04	0.04	0.20	0.04	0.02	-0.27
14	13	-0.05	0.04	-0.02	-0.05	0.03	-0.02	-0.04	0.00	-0.12
15	11	0.01	-0.01	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00

	37	38	39
	BU	AG	BU
Frequencies --	347.1364	379.8267	380.7038
Red. masses --	13.8367	8.2451	8.2995
Frc consts --	0.9824	0.7008	0.7087
IR Inten --	3.5443	0.0000	31.0235

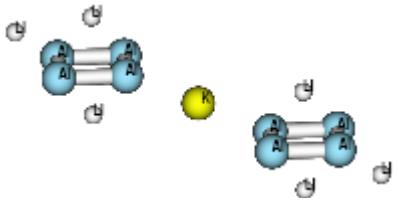
Atom	AN	X	Y	Z	X	Y	Z	X	Y	Z
1	13	0.04	0.00	-0.11	0.02	0.10	-0.06	-0.02	-0.10	0.06
2	13	0.04	0.02	0.27	0.00	0.03	0.04	0.01	0.03	0.04
3	13	0.04	0.02	-0.27	0.00	0.03	-0.04	0.01	0.03	-0.04
4	13	0.04	0.00	0.11	0.02	0.10	0.06	-0.02	-0.10	-0.06
5	3	-0.54	-0.02	0.00	-0.21	-0.02	0.00	-0.19	-0.02	0.00
6	3	-0.09	-0.17	0.00	-0.32	-0.56	0.00	0.32	0.57	0.00
7	3	-0.02	0.03	0.00	0.01	-0.05	0.00	-0.01	0.04	0.00
8	3	-0.54	-0.02	0.00	0.21	0.02	0.00	-0.19	-0.02	0.00
9	3	-0.09	-0.17	0.00	0.32	0.56	0.00	0.32	0.57	0.00
10	3	-0.02	0.03	0.00	-0.01	0.05	0.00	-0.01	0.04	0.00
11	13	0.04	0.02	0.27	0.00	-0.03	-0.04	0.01	0.03	0.04

12	13	0.04	0.00	-0.11	-0.02	-0.10	0.06	-0.02	-0.10	0.06
13	13	0.04	0.02	-0.27	0.00	-0.03	0.04	0.01	0.03	-0.04
14	13	0.04	0.00	0.11	-0.02	-0.10	-0.06	-0.02	-0.10	-0.06
15	11	0.02	-0.02	0.00	0.00	0.00	0.00	0.01	-0.02	0.00

Al4Li3NaAl4Li3-fusion50000-b36311+gx.frq -59.9609023



|State=1-A|HF=-2147.285229



Charge = -1 Multiplicity = 1

Li,0,6.844682344,3.3980534454,0.

Li,0,4.3736850173,5.3400252737,0.

Al,0,2.2078961052,4.1025252305,-1.2539749524

Al,0,4.601842949,2.8150297541,-1.2850999471

Al,0,2.2078961052,4.1025252305,1.2539749524

Al,0,4.601842949,2.8150297541,1.2850999471

Li,0,2.4134482017,1.6325792158,0.

K,0,-1.177713,3.970304,0.

Li,0,-4.7688742017,6.3080287842,0.

Li,0,-6.7291110173,2.6005827263,0.

Li,0,-9.200108344,4.5425545546,0.

Al,0,-4.5633221052,3.8380827695,-1.2539749524

Al,0,-6.957268949,5.1255782459,-1.2850999471

Al,0,-4.5633221052,3.8380827695,1.2539749524

Al,0,-6.957268949,5.1255782459,1.2850999471

State=1-AG\HF=-2584.8253197

		1			2			3		
		AU			BU			AU		
Frequencies --		-0.6110			7.2610			16.4209		
Red. masses --		17.5944			14.6572			18.5257		
Frc consts --		0.0000			0.0005			0.0029		
IR Inten --		0.0004			0.0142			0.0434		
Atom	AN	X	Y	Z	X	Y	Z	X	Y	Z
1	3	0.00	0.00	0.00	0.45	-0.04	0.00	0.00	0.00	0.45
2	3	0.00	0.00	-0.34	0.12	-0.24	0.00	0.00	0.00	0.21
3	13	0.23	-0.02	-0.10	-0.13	-0.06	0.00	-0.05	-0.14	-0.08
4	13	0.23	-0.02	0.12	0.18	0.07	0.00	-0.06	-0.15	0.16
5	13	-0.23	0.02	-0.10	-0.13	-0.06	0.00	0.05	0.14	-0.08
6	13	-0.23	0.02	0.12	0.18	0.07	0.00	0.06	0.15	0.16
7	3	0.00	0.00	0.35	-0.07	0.23	0.00	0.00	0.00	-0.14
8	19	0.00	0.00	-0.07	-0.31	-0.01	0.00	0.00	0.00	-0.41
9	3	0.00	0.00	0.35	-0.07	0.23	0.00	0.00	0.00	-0.14
10	3	0.00	0.00	-0.34	0.12	-0.24	0.00	0.00	0.00	0.21
11	3	0.00	0.00	0.00	0.45	-0.04	0.00	0.00	0.00	0.45
12	13	-0.23	0.02	-0.10	-0.13	-0.06	0.00	0.05	0.14	-0.08
13	13	-0.23	0.02	0.12	0.18	0.07	0.00	0.06	0.15	0.16

14	13	0.23	-0.02	-0.10	-0.13	-0.06	0.00	-0.05	-0.14	-0.08
15	13	0.23	-0.02	0.12	0.18	0.07	0.00	-0.06	-0.15	0.16

			4			5			6	
			AG			BG			BU	
Frequencies --			25.9080			41.2049			41.6011	
Red. masses --			14.2885			17.1141			24.2611	
Frc consts --			0.0057			0.0171			0.0247	
IR Inten --			0.0000			0.0000			5.1621	
Atom	AN	X	Y	Z	X	Y	Z	X	Y	Z
1	3	-0.40	0.00	0.00	0.00	0.00	-0.39	0.31	-0.03	0.00
2	3	-0.01	0.23	0.00	0.00	0.00	0.02	-0.01	-0.20	0.00
3	13	0.27	0.01	0.00	0.01	0.12	0.27	-0.24	-0.03	0.00
4	13	-0.07	-0.11	0.00	0.05	0.18	-0.05	0.01	0.06	0.00
5	13	0.27	0.01	0.00	-0.01	-0.12	0.27	-0.24	-0.03	0.00
6	13	-0.07	-0.11	0.00	-0.05	-0.18	-0.05	0.01	0.06	0.00
7	3	0.20	-0.26	0.00	0.00	0.00	0.31	-0.18	0.13	0.00
8	19	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.62	-0.05	0.00
9	3	-0.20	0.26	0.00	0.00	0.00	-0.31	-0.18	0.13	0.00
10	3	0.01	-0.23	0.00	0.00	0.00	-0.02	-0.01	-0.20	0.00
11	3	0.40	0.00	0.00	0.00	0.00	0.39	0.31	-0.03	0.00
12	13	-0.27	-0.01	0.00	0.01	0.12	-0.27	-0.24	-0.03	0.00
13	13	0.07	0.11	0.00	0.05	0.18	0.05	0.01	0.06	0.00
14	13	-0.27	-0.01	0.00	-0.01	-0.12	-0.27	-0.24	-0.03	0.00
15	13	0.07	0.11	0.00	-0.05	-0.18	0.05	0.01	0.06	0.00

			7			8			9	
			AG			AU			BG	
Frequencies --			50.2510			56.8179			102.9451	
Red. masses --			17.5548			22.3391			9.8469	
Frc consts --			0.0261			0.0425			0.0615	
IR Inten --			0.0000			4.4970			0.0000	
Atom	AN	X	Y	Z	X	Y	Z	X	Y	Z
1	3	-0.10	0.28	0.00	0.00	0.00	0.33	0.00	0.00	0.18
2	3	-0.01	0.32	0.00	0.00	0.00	-0.08	0.00	0.00	-0.53
3	13	0.06	0.25	0.00	0.01	-0.06	-0.23	0.06	0.10	0.11
4	13	-0.01	0.25	0.00	-0.05	-0.14	0.04	-0.05	-0.09	0.00
5	13	0.06	0.25	0.00	-0.01	0.06	-0.23	-0.06	-0.10	0.11
6	13	-0.01	0.25	0.00	0.05	0.14	0.04	0.05	0.09	0.00
7	3	0.04	0.22	0.00	0.00	0.00	-0.29	0.00	0.00	-0.33
8	19	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.53	0.00	0.00	0.00
9	3	-0.04	-0.22	0.00	0.00	0.00	-0.29	0.00	0.00	0.33
10	3	0.01	-0.32	0.00	0.00	0.00	-0.08	0.00	0.00	0.53
11	3	0.10	-0.28	0.00	0.00	0.00	0.33	0.00	0.00	-0.18
12	13	-0.06	-0.25	0.00	-0.01	0.06	-0.23	0.06	0.10	-0.11
13	13	0.01	-0.25	0.00	0.05	0.14	0.04	-0.05	-0.09	0.00

14	13	-0.06	-0.25	0.00	0.01	-0.06	-0.23	-0.06	-0.10	-0.11
15	13	0.01	-0.25	0.00	-0.05	-0.14	0.04	0.05	0.09	0.00

			10			11			12	
			AU			BU			AU	
Frequencies --			103.5352			115.6046			115.8651	
Red. masses --			9.9271			9.4267			14.6255	
Frc consts --			0.0627			0.0742			0.1157	
IR Inten --			0.0968			4.4870			0.6211	
Atom	AN	X	Y	Z	X	Y	Z	X	Y	Z
1	3	0.00	0.00	-0.17	0.61	-0.16	0.00	0.00	0.00	-0.22
2	3	0.00	0.00	0.54	0.00	-0.07	0.00	0.00	0.00	-0.15
3	13	-0.06	-0.10	-0.11	0.05	0.02	0.01	-0.20	0.00	0.00
4	13	0.05	0.09	0.00	-0.13	-0.02	-0.01	0.21	0.04	0.11
5	13	0.06	0.10	-0.11	0.05	0.02	-0.01	0.20	0.00	0.00
6	13	-0.05	-0.09	0.00	-0.13	-0.02	0.01	-0.21	-0.04	0.11
7	3	0.00	0.00	0.33	0.05	-0.20	0.00	0.00	0.00	-0.49
8	19	0.00	0.00	0.05	-0.02	0.14	0.00	0.00	0.00	0.01
9	3	0.00	0.00	0.33	0.05	-0.20	0.00	0.00	0.00	-0.49
10	3	0.00	0.00	0.54	0.00	-0.07	0.00	0.00	0.00	-0.15
11	3	0.00	0.00	-0.17	0.61	-0.16	0.00	0.00	0.00	-0.22
12	13	0.06	0.10	-0.11	0.05	0.02	-0.01	0.20	0.00	0.00
13	13	-0.05	-0.09	0.00	-0.13	-0.02	0.01	-0.21	-0.04	0.11
14	13	-0.06	-0.10	-0.11	0.05	0.02	0.01	-0.20	0.00	0.00
15	13	0.05	0.09	0.00	-0.13	-0.02	-0.01	0.21	0.04	0.11

			13			14			15	
			BG			AG			BU	
Frequencies --			115.9262			116.4575			123.3781	
Red. masses --			14.5231			9.1293			28.6389	
Frc consts --			0.1150			0.0729			0.2569	
IR Inten --			0.0000			0.0000			102.0474	
Atom	AN	X	Y	Z	X	Y	Z	X	Y	Z
1	3	0.00	0.00	0.22	-0.62	0.14	0.00	-0.31	-0.08	0.00
2	3	0.00	0.00	0.15	0.01	0.04	0.00	0.05	-0.12	0.00
3	13	0.20	0.00	0.00	-0.06	-0.04	-0.01	-0.07	-0.09	0.00
4	13	-0.21	-0.04	-0.11	0.14	-0.01	0.01	0.10	-0.16	0.00
5	13	-0.20	0.00	0.00	-0.06	-0.04	0.01	-0.07	-0.09	0.00
6	13	0.21	0.04	-0.11	0.14	-0.01	-0.01	0.10	-0.16	0.00
7	3	0.00	0.00	0.49	-0.07	0.19	0.00	-0.08	0.01	0.00
8	19	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.04	0.75	0.00
9	3	0.00	0.00	-0.49	0.07	-0.19	0.00	-0.08	0.01	0.00
10	3	0.00	0.00	-0.15	-0.01	-0.04	0.00	0.05	-0.12	0.00
11	3	0.00	0.00	-0.22	0.62	-0.14	0.00	-0.31	-0.08	0.00
12	13	0.20	0.00	0.00	0.06	0.04	-0.01	-0.07	-0.09	0.00
13	13	-0.21	-0.04	0.11	-0.14	0.01	0.01	0.10	-0.16	0.00

14	13	-0.20	0.00	0.00	0.06	0.04	0.01	-0.07	-0.09	0.00
15	13	0.21	0.04	0.11	-0.14	0.01	-0.01	0.10	-0.16	0.00

	16	17	18
	AU	BG	BG
Frequencies --	141.9724	141.9880	154.9164
Red. masses --	11.6391	11.7299	14.7259
Frc consts --	0.1382	0.1393	0.2082
IR Inten --	0.1403	0.0000	0.0000

Atom	AN	X	Y	Z	X	Y	Z	X	Y	Z
1	3	0.00	0.00	0.11	0.00	0.00	-0.11	0.00	0.00	0.24
2	3	0.00	0.00	0.46	0.00	0.00	-0.46	0.00	0.00	-0.29
3	13	0.13	-0.03	0.08	-0.13	0.03	-0.09	-0.14	-0.15	0.09
4	13	0.13	-0.07	-0.11	-0.13	0.07	0.11	0.10	-0.12	-0.15
5	13	-0.13	0.03	0.08	0.13	-0.03	-0.09	0.14	0.15	0.09
6	13	-0.13	0.07	-0.11	0.13	-0.07	0.11	-0.10	0.12	-0.15
7	3	0.00	0.00	-0.40	0.00	0.00	0.39	0.00	0.00	0.41
8	19	0.00	0.00	0.01	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
9	3	0.00	0.00	-0.40	0.00	0.00	-0.39	0.00	0.00	-0.41
10	3	0.00	0.00	0.46	0.00	0.00	0.46	0.00	0.00	0.29
11	3	0.00	0.00	0.11	0.00	0.00	0.11	0.00	0.00	-0.24
12	13	-0.13	0.03	0.08	-0.13	0.03	0.09	-0.14	-0.15	-0.09
13	13	-0.13	0.07	-0.11	-0.13	0.07	-0.11	0.10	-0.12	0.15
14	13	0.13	-0.03	0.08	0.13	-0.03	0.09	0.14	0.15	-0.09
15	13	0.13	-0.07	-0.11	0.13	-0.07	-0.11	-0.10	0.12	0.15

	19	20	21
	AU	BG	AU
Frequencies --	155.2282	208.3693	208.8445
Red. masses --	14.8590	13.7670	13.8126
Frc consts --	0.2110	0.3522	0.3550
IR Inten --	0.9129	0.0000	14.3855

Atom	AN	X	Y	Z	X	Y	Z	X	Y	Z
1	3	0.00	0.00	-0.25	0.00	0.00	-0.52	0.00	0.00	0.52
2	3	0.00	0.00	0.28	0.00	0.00	-0.18	0.00	0.00	0.18
3	13	0.14	0.15	-0.09	0.08	-0.25	0.06	-0.08	0.25	-0.06
4	13	-0.10	0.12	0.15	-0.09	-0.01	0.04	0.09	0.01	-0.04
5	13	-0.14	-0.15	-0.09	-0.08	0.25	0.06	0.08	-0.25	-0.06
6	13	0.10	-0.12	0.15	0.09	0.01	0.04	-0.09	-0.01	-0.04
7	3	0.00	0.00	-0.40	0.00	0.00	-0.18	0.00	0.00	0.17
8	19	0.00	0.00	-0.04	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	-0.04
9	3	0.00	0.00	-0.40	0.00	0.00	0.18	0.00	0.00	0.17
10	3	0.00	0.00	0.28	0.00	0.00	0.18	0.00	0.00	0.18
11	3	0.00	0.00	-0.25	0.00	0.00	0.52	0.00	0.00	0.52
12	13	-0.14	-0.15	-0.09	0.08	-0.25	-0.06	0.08	-0.25	-0.06
13	13	0.10	-0.12	0.15	-0.09	-0.01	-0.04	-0.09	-0.01	-0.04

14	13	0.14	0.15	-0.09	-0.08	0.25	-0.06	-0.08	0.25	-0.06
15	13	-0.10	0.12	0.15	0.09	0.01	-0.04	0.09	0.01	-0.04

	22	23	24
	AG	BU	AG
Frequencies --	220.4757	220.5016	228.2266
Red. masses --	8.0784	8.0360	11.7517
Frc consts --	0.2314	0.2302	0.3606
IR Inten --	0.0000	2.4437	0.0000

Atom	AN	X	Y	Z	X	Y	Z	X	Y	Z
1	3	-0.15	0.12	0.00	0.15	-0.11	0.00	0.06	-0.17	0.00
2	3	0.13	-0.38	0.00	-0.14	0.38	0.00	0.05	0.36	0.00
3	13	-0.03	0.00	0.04	0.03	-0.01	-0.04	-0.11	0.16	-0.01
4	13	0.01	0.09	-0.05	-0.01	-0.09	0.05	0.11	-0.11	0.01
5	13	-0.03	0.00	-0.04	0.03	-0.01	0.04	-0.11	0.16	0.01
6	13	0.01	0.09	0.05	-0.01	-0.09	-0.05	0.11	-0.11	-0.01
7	3	0.19	-0.49	0.00	-0.19	0.49	0.00	-0.06	-0.46	0.00
8	19	0.00	0.00	0.00	0.01	-0.01	0.00	0.00	0.00	0.00
9	3	-0.19	0.49	0.00	-0.19	0.49	0.00	0.06	0.46	0.00
10	3	-0.13	0.38	0.00	-0.14	0.38	0.00	-0.05	-0.36	0.00
11	3	0.15	-0.12	0.00	0.15	-0.11	0.00	-0.06	0.17	0.00
12	13	0.03	0.00	0.04	0.03	-0.01	0.04	0.11	-0.16	-0.01
13	13	-0.01	-0.09	-0.05	-0.01	-0.09	-0.05	-0.11	0.11	0.01
14	13	0.03	0.00	-0.04	0.03	-0.01	-0.04	0.11	-0.16	0.01
15	13	-0.01	-0.09	0.05	-0.01	-0.09	0.05	-0.11	0.11	-0.01

	25	26	27
	BU	AG	BU
Frequencies --	228.9239	236.2317	236.9707
Red. masses --	11.0804	9.9484	10.5886
Frc consts --	0.3421	0.3271	0.3503
IR Inten --	38.5285	0.0000	15.6286

Atom	AN	X	Y	Z	X	Y	Z	X	Y	Z
1	3	-0.07	0.16	0.00	-0.10	-0.14	0.00	0.10	0.16	0.00
2	3	-0.02	-0.40	0.00	0.32	-0.47	0.00	-0.33	0.45	0.00
3	13	0.10	-0.14	0.01	0.02	0.16	-0.01	-0.01	-0.18	0.01
4	13	-0.10	0.09	-0.01	-0.03	-0.10	0.01	0.02	0.11	-0.01
5	13	0.10	-0.14	-0.01	0.02	0.16	0.01	-0.01	-0.18	-0.01
6	13	-0.10	0.09	0.01	-0.03	-0.10	-0.01	0.02	0.11	0.01
7	3	0.05	0.45	0.00	-0.12	0.24	0.00	0.13	-0.22	0.00
8	19	0.02	0.04	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.06	0.00
9	3	0.05	0.45	0.00	0.12	-0.24	0.00	0.13	-0.22	0.00
10	3	-0.02	-0.40	0.00	-0.32	0.47	0.00	-0.33	0.45	0.00
11	3	-0.07	0.16	0.00	0.10	0.14	0.00	0.10	0.16	0.00
12	13	0.10	-0.14	-0.01	-0.02	-0.16	-0.01	-0.01	-0.18	-0.01
13	13	-0.10	0.09	0.01	0.03	0.10	0.01	0.02	0.11	0.01

14	13	0.10	-0.14	0.01	-0.02	-0.16	0.01	-0.01	-0.18	0.01
15	13	-0.10	0.09	-0.01	0.03	0.10	-0.01	0.02	0.11	-0.01

			28			29			30	
			BG			AU			BU	
Frequencies --			248.3283			248.5638			290.2158	
Red. masses --			13.3261			13.3670			17.9445	
Frc consts --			0.4842			0.4866			0.8905	
IR Inten --			0.0000			10.8898			20.8220	
Atom	AN	X	Y	Z	X	Y	Z	X	Y	Z
1	3	0.00	0.00	-0.53	0.00	0.00	0.53	0.07	0.31	0.00
2	3	0.00	0.00	0.16	0.00	0.00	-0.16	0.17	0.16	0.00
3	13	-0.03	0.11	0.00	0.03	-0.11	0.00	0.01	0.00	0.06
4	13	0.00	-0.26	0.03	0.00	0.26	-0.03	-0.01	-0.07	-0.36
5	13	0.03	-0.11	0.00	-0.03	0.11	0.00	0.01	0.00	-0.06
6	13	0.00	0.26	0.03	0.00	-0.26	-0.03	-0.01	-0.07	0.36
7	3	0.00	0.00	0.17	0.00	0.00	-0.17	-0.24	0.10	0.00
8	19	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	-0.02	0.00
9	3	0.00	0.00	-0.17	0.00	0.00	-0.17	-0.24	0.10	0.00
10	3	0.00	0.00	-0.16	0.00	0.00	-0.16	0.17	0.16	0.00
11	3	0.00	0.00	0.53	0.00	0.00	0.53	0.07	0.31	0.00
12	13	-0.03	0.11	0.00	-0.03	0.11	0.00	0.01	0.00	-0.06
13	13	0.00	-0.26	-0.03	0.00	-0.26	-0.03	-0.01	-0.07	0.36
14	13	0.03	-0.11	0.00	0.03	-0.11	0.00	0.01	0.00	0.06
15	13	0.00	0.26	-0.03	0.00	0.26	-0.03	-0.01	-0.07	-0.36

			31			32			33	
			AG			AG			BU	
Frequencies --			290.3516			325.7661			325.8481	
Red. masses --			17.9703			12.0978			12.3305	
Frc consts --			0.8926			0.7564			0.7714	
IR Inten --			0.0000			0.0000			11.5242	
Atom	AN	X	Y	Z	X	Y	Z	X	Y	Z
1	3	-0.07	-0.31	0.00	0.00	-0.12	0.00	0.00	0.12	0.00
2	3	-0.17	-0.16	0.00	-0.57	-0.17	0.00	0.56	0.17	0.00
3	13	-0.01	0.00	-0.06	0.02	0.06	0.24	-0.02	-0.06	-0.24
4	13	0.01	0.07	0.36	0.05	-0.03	-0.01	-0.05	0.03	0.01
5	13	-0.01	0.00	0.06	0.02	0.06	-0.24	-0.02	-0.06	0.24
6	13	0.01	0.07	-0.36	0.05	-0.03	0.01	-0.05	0.03	-0.01
7	3	0.24	-0.10	0.00	0.03	0.06	0.00	-0.03	-0.06	0.00
8	19	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.02	0.00
9	3	-0.24	0.10	0.00	-0.03	-0.06	0.00	-0.03	-0.06	0.00
10	3	0.17	0.16	0.00	0.57	0.17	0.00	0.56	0.17	0.00
11	3	0.07	0.31	0.00	0.00	0.12	0.00	0.00	0.12	0.00
12	13	0.01	0.00	-0.06	-0.02	-0.06	0.24	-0.02	-0.06	0.24
13	13	-0.01	-0.07	0.36	-0.05	0.03	-0.01	-0.05	0.03	-0.01

14	13	0.01	0.00	0.06	-0.02	-0.06	-0.24	-0.02	-0.06	-0.24
15	13	-0.01	-0.07	-0.36	-0.05	0.03	0.01	-0.05	0.03	0.01

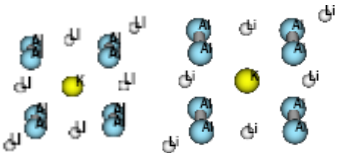
	34	35	36
	BU	AG	BU
Frequencies --	331.8810	331.9925	347.1084
Red. masses --	9.6199	9.7209	9.2152
Frc consts --	0.6243	0.6313	0.6542
IR Inten --	13.0894	0.0000	16.8098

Atom	AN	X	Y	Z	X	Y	Z	X	Y	Z
1	3	0.01	0.06	0.00	-0.01	-0.07	0.00	-0.05	-0.28	0.00
2	3	0.40	0.21	0.00	-0.40	-0.21	0.00	-0.22	-0.04	0.00
3	13	-0.07	-0.02	0.15	0.07	0.02	-0.15	-0.04	0.03	-0.11
4	13	-0.05	-0.04	0.04	0.05	0.04	-0.05	0.01	-0.01	-0.11
5	13	-0.07	-0.02	-0.15	0.07	0.02	0.15	-0.04	0.03	0.11
6	13	-0.05	-0.04	-0.04	0.05	0.04	0.05	0.01	-0.01	0.11
7	3	0.45	0.15	0.00	-0.45	-0.15	0.00	0.54	0.16	0.00
8	19	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
9	3	0.45	0.15	0.00	0.45	0.15	0.00	0.54	0.16	0.00
10	3	0.40	0.21	0.00	0.40	0.21	0.00	-0.22	-0.04	0.00
11	3	0.01	0.06	0.00	0.01	0.07	0.00	-0.05	-0.28	0.00
12	13	-0.07	-0.02	-0.15	-0.07	-0.02	-0.15	-0.04	0.03	0.11
13	13	-0.05	-0.04	-0.04	-0.05	-0.04	-0.05	0.01	-0.01	0.11
14	13	-0.07	-0.02	0.15	-0.07	-0.02	0.15	-0.04	0.03	-0.11
15	13	-0.05	-0.04	0.04	-0.05	-0.04	0.05	0.01	-0.01	-0.11

	37	38	39
	AG	BU	AG
Frequencies --	347.5439	368.6933	368.8962
Red. masses --	9.2092	8.4046	8.4074
Frc consts --	0.6554	0.6731	0.6741
IR Inten --	0.0000	7.0103	0.0000

Atom	AN	X	Y	Z	X	Y	Z	X	Y	Z
1	3	0.06	0.29	0.00	0.14	0.60	0.00	-0.14	-0.60	0.00
2	3	0.20	0.03	0.00	-0.20	-0.12	0.00	0.20	0.12	0.00
3	13	0.04	-0.03	0.11	-0.02	0.04	-0.05	0.02	-0.04	0.06
4	13	0.00	0.01	0.11	0.01	-0.10	0.05	-0.01	0.10	-0.04
5	13	0.04	-0.03	-0.11	-0.02	0.04	0.05	0.02	-0.04	-0.06
6	13	0.00	0.01	-0.11	0.01	-0.10	-0.05	-0.01	0.10	0.04
7	3	-0.54	-0.16	0.00	0.18	0.01	0.00	-0.19	-0.01	0.00
8	19	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
9	3	0.54	0.16	0.00	0.18	0.01	0.00	0.19	0.01	0.00
10	3	-0.20	-0.03	0.00	-0.20	-0.12	0.00	-0.20	-0.12	0.00
11	3	-0.06	-0.29	0.00	0.14	0.60	0.00	0.14	0.60	0.00
12	13	-0.04	0.03	0.11	-0.02	0.04	0.05	-0.02	0.04	0.06
13	13	0.00	-0.01	0.11	0.01	-0.10	-0.05	0.01	-0.10	-0.04

14	13	-0.04	0.03	-0.11	-0.02	0.04	-0.05	-0.02	0.04	-0.06
15	13	0.00	-0.01	-0.11	0.01	-0.10	0.05	0.01	-0.10	0.04



Charge = -1 Multiplicity = 1

Al,0,-3.4877511995,-0.8498810906,1.185653095
Al,0,0.8779980618,-3.6039025001,1.1959494814
Al,0,0.8779980618,-3.6039025001,-1.1959494814
Al,0,-3.4877511995,-0.8498810906,-1.185653095
Li,0,2.8964484448,-1.8231072934,0.
Li,0,-5.8708640143,-1.3809907513,0.
Li,0,-1.7334620581,-2.9532097582,0.
Li,0,-2.8964484448,1.8231072934,0.
Li,0,5.8708640143,1.3809907513,0.
Li,0,1.7334620581,2.9532097582,0.
Al,0,-0.8779980618,3.6039025001,-1.1959494814
Al,0,3.4877511995,0.8498810906,-1.185653095
Al,0,-0.8779980618,3.6039025001,1.1959494814
Al,0,3.4877511995,0.8498810906,1.185653095
K,0,0.,0.,0.

State=1-AG\HF=-2584.7395455

		1			2			3		
		AU			AG			BU		
Frequencies --		-25.1068			-20.4358			-19.6869		
Red. masses --		20.9673			7.7032			7.2382		
Frc consts --		0.0078			0.0019			0.0017		
IR Inten --		0.0211			0.0000			21.1546		
Atom	AN	X	Y	Z	X	Y	Z	X	Y	Z
1	13	-0.16	0.16	0.05	0.05	0.05	0.00	-0.03	-0.03	0.00
2	13	-0.08	-0.08	0.08	-0.05	0.04	0.00	-0.02	-0.02	0.00
3	13	0.08	0.08	0.08	-0.05	0.04	0.00	-0.02	-0.02	0.00
4	13	0.16	-0.16	0.05	0.05	0.05	0.00	-0.03	-0.03	0.00
5	3	0.00	0.00	-0.01	-0.07	-0.02	0.00	-0.03	-0.04	0.00
6	3	0.00	0.00	0.47	-0.49	-0.48	0.00	0.50	0.49	0.00
7	3	0.00	0.00	-0.01	0.01	0.07	0.00	-0.04	-0.03	0.00
8	3	0.00	0.00	-0.01	0.07	0.02	0.00	-0.03	-0.04	0.00
9	3	0.00	0.00	0.47	0.49	0.48	0.00	0.50	0.49	0.00
10	3	0.00	0.00	-0.01	-0.01	-0.07	0.00	-0.04	-0.03	0.00
11	13	-0.08	-0.08	0.08	0.05	-0.04	0.00	-0.02	-0.02	0.00

12	13	-0.16	0.16	0.05	-0.05	-0.05	0.00	-0.03	-0.03	0.00
13	13	0.08	0.08	0.08	0.05	-0.04	0.00	-0.02	-0.02	0.00
14	13	0.16	-0.16	0.05	-0.05	-0.05	0.00	-0.03	-0.03	0.00
15	19	0.00	0.00	-0.50	0.00	0.00	0.00	-0.02	-0.02	0.00

	4	5	6
	AU	BG	AU
Frequencies --	26.9283	37.0112	37.5936
Red. masses --	19.7893	14.9835	16.5478
Frc consts --	0.0085	0.0121	0.0138
IR Inten --	4.4953	0.0000	0.0020

Atom	AN	X	Y	Z	X	Y	Z	X	Y	Z
1	13	0.08	-0.08	-0.18	-0.19	0.18	-0.10	-0.19	-0.20	0.00
2	13	-0.13	-0.14	0.27	0.10	-0.10	0.00	-0.15	0.15	0.00
3	13	0.13	0.14	0.27	-0.10	0.10	0.00	0.15	-0.15	0.00
4	13	-0.08	0.08	-0.18	0.19	-0.18	-0.10	0.19	0.20	0.00
5	3	0.00	0.00	0.01	0.00	0.00	0.23	0.00	0.00	-0.36
6	3	0.00	0.00	-0.43	0.00	0.00	0.45	0.00	0.00	-0.01
7	3	0.00	0.00	0.01	0.00	0.00	-0.22	0.00	0.00	0.36
8	3	0.00	0.00	0.01	0.00	0.00	-0.23	0.00	0.00	-0.36
9	3	0.00	0.00	-0.43	0.00	0.00	-0.45	0.00	0.00	-0.01
10	3	0.00	0.00	0.01	0.00	0.00	0.22	0.00	0.00	0.36
11	13	-0.13	-0.14	0.27	-0.10	0.10	0.00	-0.15	0.15	0.00
12	13	0.08	-0.08	-0.18	0.19	-0.18	0.10	-0.19	-0.20	0.00
13	13	0.13	0.14	0.27	0.10	-0.10	0.00	0.15	-0.15	0.00
14	13	-0.08	0.08	-0.18	-0.19	0.18	0.10	0.19	0.20	0.00
15	19	0.00	0.00	-0.10	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00

	7	8	9
	AG	BG	AU
Frequencies --	52.7123	55.3426	64.2597
Red. masses --	21.0641	18.6226	20.7655
Frc consts --	0.0345	0.0336	0.0505
IR Inten --	0.0000	0.0000	1.3111

Atom	AN	X	Y	Z	X	Y	Z	X	Y	Z
1	13	-0.23	0.22	0.00	-0.19	-0.19	0.00	0.17	-0.16	0.20
2	13	0.19	0.20	0.00	0.18	0.19	-0.06	0.03	0.03	-0.06
3	13	0.19	0.20	0.00	-0.18	-0.19	-0.06	-0.03	-0.03	-0.06
4	13	-0.23	0.22	0.00	0.19	0.19	0.00	-0.17	0.16	0.20
5	3	0.14	0.00	0.00	0.00	0.00	0.32	0.00	0.00	0.21
6	3	-0.23	0.23	0.00	0.00	0.00	-0.01	0.00	0.00	-0.35
7	3	0.00	0.14	0.00	0.00	0.00	0.32	0.00	0.00	0.21
8	3	-0.14	0.00	0.00	0.00	0.00	-0.32	0.00	0.00	0.21
9	3	0.23	-0.23	0.00	0.00	0.00	0.01	0.00	0.00	-0.35
10	3	0.00	-0.14	0.00	0.00	0.00	-0.32	0.00	0.00	0.21
11	13	-0.19	-0.20	0.00	-0.18	-0.19	0.06	0.03	0.03	-0.06

12	13	0.23	-0.22	0.00	0.19	0.19	0.00	0.17	-0.16	0.20
13	13	-0.19	-0.20	0.00	0.18	0.19	0.06	-0.03	-0.03	-0.06
14	13	0.23	-0.22	0.00	-0.19	-0.19	0.00	-0.17	0.16	0.20
15	19	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	-0.42

	10	11	12
	AG	BU	BU
Frequencies --	74.4251	79.6646	81.9278
Red. masses --	20.8152	21.9796	26.9262
Frc consts --	0.0679	0.0822	0.1065
IR Inten --	0.0000	18.0345	3.0887

Atom	AN	X	Y	Z	X	Y	Z	X	Y	Z
1	13	0.21	0.22	0.00	0.19	-0.19	0.00	0.25	0.26	0.00
2	13	0.21	-0.20	0.00	-0.23	0.23	0.00	-0.21	-0.21	0.00
3	13	0.21	-0.20	0.00	-0.23	0.23	0.00	-0.21	-0.21	0.00
4	13	0.21	0.22	0.00	0.19	-0.19	0.00	0.25	0.26	0.00
5	3	0.05	-0.27	0.00	-0.14	0.07	0.00	0.06	0.06	0.00
6	3	0.02	0.02	0.00	0.20	-0.20	0.00	0.05	0.06	0.00
7	3	0.27	-0.04	0.00	-0.07	0.14	0.00	0.06	0.07	0.00
8	3	-0.05	0.27	0.00	-0.14	0.07	0.00	0.06	0.06	0.00
9	3	-0.02	-0.02	0.00	0.20	-0.20	0.00	0.05	0.06	0.00
10	3	-0.27	0.04	0.00	-0.07	0.14	0.00	0.06	0.07	0.00
11	13	-0.21	0.20	0.00	-0.23	0.23	0.00	-0.21	-0.21	0.00
12	13	-0.21	-0.22	0.00	0.19	-0.19	0.00	0.25	0.26	0.00
13	13	-0.21	0.20	0.00	-0.23	0.23	0.00	-0.21	-0.21	0.00
14	13	-0.21	-0.22	0.00	0.19	-0.19	0.00	0.25	0.26	0.00
15	19	0.00	0.00	0.00	0.11	-0.10	0.00	-0.18	-0.19	0.00

	13	14	15
	AG	AU	BG
Frequencies --	83.9095	85.6161	94.2897
Red. masses --	23.3592	23.3181	26.8979
Frc consts --	0.0969	0.1007	0.1409
IR Inten --	0.0000	0.5287	0.0000

Atom	AN	X	Y	Z	X	Y	Z	X	Y	Z
1	13	0.20	-0.19	0.00	-0.04	0.04	-0.15	-0.19	-0.21	0.02
2	13	0.25	0.26	0.00	0.26	0.27	0.16	-0.22	-0.27	-0.21
3	13	0.25	0.26	0.00	-0.26	-0.27	0.16	0.22	0.27	-0.21
4	13	0.20	-0.19	0.00	0.04	-0.04	-0.15	0.19	0.21	0.02
5	3	0.06	0.01	0.00	0.00	0.00	0.22	0.00	0.00	0.04
6	3	0.20	-0.20	0.00	0.00	0.00	-0.03	0.00	0.00	-0.02
7	3	0.00	0.06	0.00	0.00	0.00	0.22	0.00	0.00	-0.01
8	3	-0.06	-0.01	0.00	0.00	0.00	0.22	0.00	0.00	-0.04
9	3	-0.20	0.20	0.00	0.00	0.00	-0.03	0.00	0.00	0.02
10	3	0.00	-0.06	0.00	0.00	0.00	0.22	0.00	0.00	0.01
11	13	-0.25	-0.26	0.00	0.26	0.27	0.16	0.22	0.27	0.21

12	13	-0.20	0.19	0.00	-0.04	0.04	-0.15	0.19	0.21	-0.02
13	13	-0.25	-0.26	0.00	-0.26	-0.27	0.16	-0.22	-0.27	0.21
14	13	-0.20	0.19	0.00	0.04	-0.04	-0.15	-0.19	-0.21	-0.02
15	19	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	-0.16	0.00	0.00	0.00

	16	17	18
	BG	BU	BU
Frequencies --	97.1224	102.2019	108.0314
Red. masses --	21.1417	27.5660	25.7073
Frc consts --	0.1175	0.1696	0.1768
IR Inten --	0.0000	7.5694	0.9386

Atom	AN	X	Y	Z	X	Y	Z	X	Y	Z
1	13	0.10	-0.07	0.22	0.03	0.02	0.00	0.13	-0.13	0.00
2	13	0.26	-0.21	0.02	0.17	0.18	0.01	0.04	-0.05	0.00
3	13	-0.26	0.21	0.02	0.17	0.18	-0.01	0.04	-0.05	0.00
4	13	-0.10	0.07	0.22	0.03	0.02	0.00	0.13	-0.13	0.00
5	3	0.00	0.00	0.25	0.10	-0.23	0.00	0.10	0.25	0.00
6	3	0.00	0.00	-0.14	-0.02	-0.03	0.00	0.14	-0.14	0.00
7	3	0.00	0.00	-0.26	-0.24	0.08	0.00	-0.24	-0.11	0.00
8	3	0.00	0.00	-0.25	0.10	-0.23	0.00	0.10	0.25	0.00
9	3	0.00	0.00	0.14	-0.02	-0.03	0.00	0.14	-0.14	0.00
10	3	0.00	0.00	0.26	-0.24	0.08	0.00	-0.24	-0.11	0.00
11	13	-0.26	0.21	-0.02	0.17	0.18	0.01	0.04	-0.05	0.00
12	13	-0.10	0.07	-0.22	0.03	0.02	0.00	0.13	-0.13	0.00
13	13	0.26	-0.21	-0.02	0.17	0.18	-0.01	0.04	-0.05	0.00
14	13	0.10	-0.07	-0.22	0.03	0.02	0.00	0.13	-0.13	0.00
15	19	0.00	0.00	0.00	-0.49	-0.49	0.00	-0.49	0.50	0.00

	19	20	21
	AU	AU	BG
Frequencies --	114.0626	177.1630	197.6976
Red. masses --	26.3283	8.4319	9.2919
Frc consts --	0.2018	0.1559	0.2140
IR Inten --	0.0030	0.0804	0.0000

Atom	AN	X	Y	Z	X	Y	Z	X	Y	Z
1	13	0.23	0.23	0.00	0.02	-0.02	-0.09	-0.07	0.05	0.08
2	13	-0.27	0.26	0.00	-0.04	-0.05	-0.07	-0.08	0.09	0.01
3	13	0.27	-0.26	0.00	0.04	0.05	-0.07	0.08	-0.09	0.01
4	13	-0.23	-0.23	0.00	-0.02	0.02	-0.09	0.07	-0.05	0.08
5	3	0.00	0.00	-0.09	0.00	0.00	0.45	0.00	0.00	0.32
6	3	0.00	0.00	0.01	0.00	0.00	0.23	0.00	0.00	-0.38
7	3	0.00	0.00	0.09	0.00	0.00	0.46	0.00	0.00	-0.44
8	3	0.00	0.00	-0.09	0.00	0.00	0.45	0.00	0.00	-0.32
9	3	0.00	0.00	0.01	0.00	0.00	0.23	0.00	0.00	0.38
10	3	0.00	0.00	0.09	0.00	0.00	0.46	0.00	0.00	0.44
11	13	-0.27	0.26	0.00	-0.04	-0.05	-0.07	0.08	-0.09	-0.01

12	13	0.23	0.23	0.00	0.02	-0.02	-0.09	0.07	-0.05	-0.08
13	13	0.27	-0.26	0.00	0.04	0.05	-0.07	-0.08	0.09	-0.01
14	13	-0.23	-0.23	0.00	-0.02	0.02	-0.09	-0.07	0.05	-0.08
15	19	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.03	0.00	0.00	0.00

	22	23	24
	BG	AU	BG
Frequencies --	202.3015	210.4842	211.2858
Red. masses --	8.5731	9.9408	9.2855
Frc consts --	0.2067	0.2595	0.2442
IR Inten --	0.0000	5.6485	0.0000

Atom	AN	X	Y	Z	X	Y	Z	X	Y	Z
1	13	-0.07	-0.09	-0.01	0.13	-0.13	-0.05	0.10	-0.11	-0.03
2	13	0.05	0.03	0.06	0.02	0.02	0.03	-0.05	0.05	0.00
3	13	-0.05	-0.03	0.06	-0.02	-0.02	0.03	0.05	-0.05	0.00
4	13	0.07	0.09	-0.01	-0.13	0.13	-0.05	-0.10	0.11	-0.03
5	3	0.00	0.00	-0.53	0.00	0.00	-0.20	0.00	0.00	0.31
6	3	0.00	0.00	0.03	0.00	0.00	0.60	0.00	0.00	0.49
7	3	0.00	0.00	-0.43	0.00	0.00	-0.17	0.00	0.00	-0.33
8	3	0.00	0.00	0.53	0.00	0.00	-0.20	0.00	0.00	-0.31
9	3	0.00	0.00	-0.03	0.00	0.00	0.60	0.00	0.00	-0.49
10	3	0.00	0.00	0.43	0.00	0.00	-0.17	0.00	0.00	0.33
11	13	-0.05	-0.03	-0.06	0.02	0.02	0.03	0.05	-0.05	0.00
12	13	0.07	0.09	0.01	0.13	-0.13	-0.05	-0.10	0.11	0.03
13	13	0.05	0.03	-0.06	-0.02	-0.02	0.03	-0.05	0.05	0.00
14	13	-0.07	-0.09	0.01	-0.13	0.13	-0.05	0.10	-0.11	0.03
15	19	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	-0.04	0.00	0.00	0.00

	25	26	27
	AG	AG	BU
Frequencies --	213.0083	215.4785	219.8354
Red. masses --	7.0258	7.5789	7.7246
Frc consts --	0.1878	0.2073	0.2199
IR Inten --	0.0000	0.0000	6.3214

Atom	AN	X	Y	Z	X	Y	Z	X	Y	Z
1	13	-0.01	0.00	0.00	0.04	0.04	0.00	0.00	-0.01	0.00
2	13	-0.01	0.00	0.00	0.04	-0.04	0.00	-0.03	0.03	0.00
3	13	-0.01	0.00	0.00	0.04	-0.04	0.00	-0.03	0.03	0.00
4	13	-0.01	0.00	0.00	0.04	0.04	0.00	0.00	-0.01	0.00
5	3	0.01	0.45	0.00	-0.01	0.55	0.00	-0.03	-0.43	0.00
6	3	0.02	-0.02	0.00	-0.01	-0.01	0.00	0.03	-0.03	0.00
7	3	0.55	0.03	0.00	-0.43	-0.01	0.00	0.55	0.04	0.00
8	3	-0.01	-0.45	0.00	0.01	-0.55	0.00	-0.03	-0.43	0.00
9	3	-0.02	0.02	0.00	0.01	0.01	0.00	0.03	-0.03	0.00
10	3	-0.55	-0.03	0.00	0.43	0.01	0.00	0.55	0.04	0.00
11	13	0.01	0.00	0.00	-0.04	0.04	0.00	-0.03	0.03	0.00

12	13	0.01	0.00	0.00	-0.04	-0.04	0.00	0.00	-0.01	0.00
13	13	0.01	0.00	0.00	-0.04	0.04	0.00	-0.03	0.03	0.00
14	13	0.01	0.00	0.00	-0.04	-0.04	0.00	0.00	-0.01	0.00
15	19	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	-0.11	0.08	0.00

	28	29	30
	AU	BU	BU
Frequencies --	220.3800	221.8219	274.0445
Red. masses --	8.4574	7.7133	7.3948
Frc consts --	0.2420	0.2236	0.3272
IR Inten --	0.0001	67.4510	52.1557

Atom	AN	X	Y	Z	X	Y	Z	X	Y	Z
1	13	-0.06	-0.06	0.00	-0.03	-0.04	0.00	-0.04	-0.04	0.00
2	13	-0.07	0.07	0.00	0.01	0.00	0.00	-0.03	-0.03	-0.02
3	13	0.07	-0.07	0.00	0.01	0.00	0.00	-0.03	-0.03	0.02
4	13	0.06	0.06	0.00	-0.03	-0.04	0.00	-0.04	-0.04	0.00
5	3	0.00	0.00	0.48	-0.03	0.55	0.00	0.49	0.01	0.00
6	3	0.00	0.00	0.01	0.01	0.01	0.00	0.01	0.01	0.00
7	3	0.00	0.00	-0.48	0.43	-0.02	0.00	-0.01	0.50	0.00
8	3	0.00	0.00	0.48	-0.03	0.55	0.00	0.49	0.01	0.00
9	3	0.00	0.00	0.01	0.01	0.01	0.00	0.01	0.01	0.00
10	3	0.00	0.00	-0.48	0.43	-0.02	0.00	-0.01	0.50	0.00
11	13	-0.07	0.07	0.00	0.01	0.00	0.00	-0.03	-0.03	-0.02
12	13	-0.06	-0.06	0.00	-0.03	-0.04	0.00	-0.04	-0.04	0.00
13	13	0.07	-0.07	0.00	0.01	0.00	0.00	-0.03	-0.03	0.02
14	13	0.06	0.06	0.00	-0.03	-0.04	0.00	-0.04	-0.04	0.00
15	19	0.00	0.00	0.00	-0.07	-0.10	0.00	0.00	0.00	0.00

	31	32	33
	AG	AG	BU
Frequencies --	278.5930	297.5611	297.7503
Red. masses --	7.1761	7.6249	7.4628
Frc consts --	0.3282	0.3978	0.3898
IR Inten --	0.0000	0.0000	0.4402

Atom	AN	X	Y	Z	X	Y	Z	X	Y	Z
1	13	0.01	-0.01	-0.01	0.04	0.04	0.00	0.01	0.00	-0.01
2	13	-0.03	-0.03	-0.02	-0.05	0.05	0.00	0.05	-0.05	0.00
3	13	-0.03	-0.03	0.02	-0.05	0.05	0.00	0.05	-0.05	0.00
4	13	0.01	-0.01	0.01	0.04	0.04	0.00	0.01	0.00	0.01
5	3	0.49	-0.01	0.00	0.50	0.01	0.00	-0.49	0.01	0.00
6	3	0.07	-0.07	0.00	-0.01	-0.01	0.00	0.09	-0.09	0.00
7	3	-0.03	0.49	0.00	0.00	-0.49	0.00	-0.03	0.48	0.00
8	3	-0.49	0.01	0.00	-0.50	-0.01	0.00	-0.49	0.01	0.00
9	3	-0.07	0.07	0.00	0.01	0.01	0.00	0.09	-0.09	0.00
10	3	0.03	-0.49	0.00	0.00	0.49	0.00	-0.03	0.48	0.00
11	13	0.03	0.03	0.02	0.05	-0.05	0.00	0.05	-0.05	0.00

12	13	-0.01	0.01	0.01	-0.04	-0.04	0.00	0.01	0.00	-0.01
13	13	0.03	0.03	-0.02	0.05	-0.05	0.00	0.05	-0.05	0.00
14	13	-0.01	0.01	-0.01	-0.04	-0.04	0.00	0.01	0.00	0.01
15	19	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	-0.01	0.01	0.00

	34	35	36
	AG	BU	BU
Frequencies --	345.7564	346.0169	374.3689
Red. masses --	7.8571	7.8543	26.6820
Frc consts --	0.5534	0.5541	2.2033
IR Inten --	0.0000	64.1765	4.9520

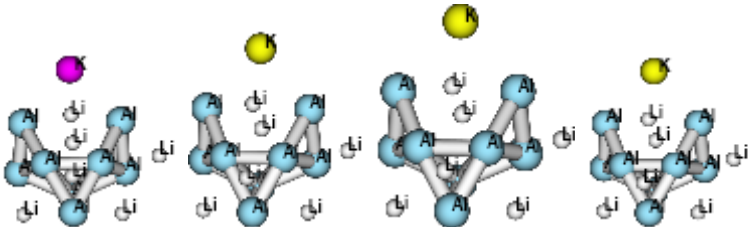
Atom	AN	X	Y	Z	X	Y	Z	X	Y	Z
1	13	0.07	-0.07	0.04	-0.07	0.07	-0.04	-0.01	-0.01	0.00
2	13	0.00	0.00	-0.01	-0.01	0.01	0.00	0.00	0.00	0.50
3	13	0.00	0.00	0.01	-0.01	0.01	0.00	0.00	0.00	-0.50
4	13	0.07	-0.07	-0.04	-0.07	0.07	0.04	-0.01	-0.01	0.00
5	3	0.06	0.02	0.00	0.08	0.02	0.00	0.06	-0.01	0.00
6	3	-0.48	0.49	0.00	0.48	-0.49	0.00	0.00	0.00	0.00
7	3	0.02	0.07	0.00	-0.02	-0.08	0.00	-0.01	0.06	0.00
8	3	-0.06	-0.02	0.00	0.08	0.02	0.00	0.06	-0.01	0.00
9	3	0.48	-0.49	0.00	0.48	-0.49	0.00	0.00	0.00	0.00
10	3	-0.02	-0.07	0.00	-0.02	-0.08	0.00	-0.01	0.06	0.00
11	13	0.00	0.00	0.01	-0.01	0.01	0.00	0.00	0.00	0.50
12	13	-0.07	0.07	-0.04	-0.07	0.07	-0.04	-0.01	-0.01	0.00
13	13	0.00	0.00	-0.01	-0.01	0.01	0.00	0.00	0.00	-0.50
14	13	-0.07	0.07	0.04	-0.07	0.07	0.04	-0.01	-0.01	0.00
15	19	0.00	0.00	0.00	0.01	-0.01	0.00	0.01	0.01	0.00

	37	38	39
	AG	BU	AG
Frequencies --	374.3863	410.8292	411.2574
Red. masses --	26.6457	25.8022	25.6745
Frc consts --	2.2005	2.5658	2.5585
IR Inten --	0.0000	75.1320	0.0000

Atom	AN	X	Y	Z	X	Y	Z	X	Y	Z
1	13	-0.01	0.01	0.00	-0.02	0.02	0.48	0.01	-0.02	-0.48
2	13	0.00	0.00	-0.50	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
3	13	0.00	0.00	0.50	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
4	13	-0.01	0.01	0.00	-0.02	0.02	-0.48	0.01	-0.02	0.48
5	3	-0.06	0.01	0.00	-0.01	0.00	0.00	-0.02	0.02	0.00
6	3	0.02	-0.02	0.00	0.12	-0.12	0.00	-0.13	0.13	0.00
7	3	0.02	-0.06	0.00	0.00	0.00	0.00	0.02	-0.01	0.00
8	3	0.06	-0.01	0.00	-0.01	0.00	0.00	0.02	-0.02	0.00
9	3	-0.02	0.02	0.00	0.12	-0.12	0.00	0.13	-0.13	0.00
10	3	-0.02	0.06	0.00	0.00	0.00	0.00	-0.02	0.01	0.00
11	13	0.00	0.00	0.50	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00

12	13	0.01	-0.01	0.00	-0.02	0.02	0.48	-0.01	0.02	0.48
13	13	0.00	0.00	-0.50	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
14	13	0.01	-0.01	0.00	-0.02	0.02	-0.48	-0.01	0.02	-0.48
15	19	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00

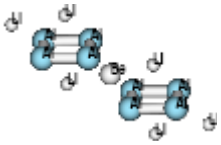
Al4Li3KAl4Li3-fusion20000-b36311+gx.frq -57.8200892



State=1-A\HF=-2584.9174618

Al4Li3KAl4Li3-fusion20000-b36311+gx.frq

State=1-A\HF=-2584.9174618



Charge = 0 Multiplicity = 1

Li,0,6.3892336065,-0.8344806678,0.
Li,0,4.2453801495,1.506514197,0.
Al,0,1.9013792174,0.5908484413,-1.2675951428
Al,0,4.0300120033,-1.009092,-1.2610150807
Al,0,1.9013792174,0.5908484413,1.2675951428
Al,0,4.0300120033,-1.009092,1.2610150807
Li,0,1.6696218382,-1.9713576627,0.
Be,0,0.,0.,0.
Li,0,-1.6696218382,1.9713576627,0.
Li,0,-4.2453801495,-1.506514197,0.
Li,0,-6.3892336065,0.8344806678,0.
Al,0,-1.9013792174,-0.5908484413,-1.2675951428
Al,0,-4.0300120033,1.009092,-1.2610150807
Al,0,-1.9013792174,-0.5908484413,1.2675951428
Al,0,-4.0300120033,1.009092,1.2610150807

State=1-AG\HF=-1999.5777275

		1			2			3		
		AU			BG			BU		
Frequencies --		-65.2773			-35.8809			-26.0794		
Red. masses --		19.6915			18.2110			12.3449		
Frc consts --		0.0494			0.0138			0.0049		
IR Inten --		0.0548			0.0000			4.5638		
Atom	AN	X	Y	Z	X	Y	Z	X	Y	Z
1	3	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	-0.07	0.36	-0.17	0.00
2	3	0.00	0.00	0.17	0.00	0.00	0.20	-0.02	-0.26	0.00
3	13	0.13	-0.30	-0.07	-0.14	0.12	-0.21	-0.19	0.00	0.00
4	13	0.18	-0.13	0.00	0.07	0.20	0.13	0.17	0.00	0.00
5	13	-0.13	0.30	-0.07	0.14	-0.12	-0.21	-0.19	0.00	0.00
6	13	-0.18	0.13	0.00	-0.07	-0.20	0.13	0.17	0.00	0.00
7	3	0.00	0.00	0.38	0.00	0.00	0.42	0.03	0.29	0.00
8	4	0.00	0.00	-0.11	0.00	0.00	0.00	-0.31	0.17	0.00
9	3	0.00	0.00	0.38	0.00	0.00	-0.42	0.03	0.29	0.00
10	3	0.00	0.00	0.17	0.00	0.00	-0.20	-0.02	-0.26	0.00
11	3	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.07	0.36	-0.17	0.00
12	13	-0.13	0.30	-0.07	-0.14	0.12	0.21	-0.19	0.00	0.00
13	13	-0.18	0.13	0.00	0.07	0.20	-0.13	0.17	0.00	0.00
14	13	0.13	-0.30	-0.07	0.14	-0.12	0.21	-0.19	0.00	0.00

15	13	0.18	-0.13	0.00	-0.07	-0.20	-0.13	0.17	0.00	0.00

		4			5			6	
		AU			AU			AG	
Frequencies --		-25.1495			53.9941			71.9930	
Red. masses --		13.6471			13.4890			17.1362	
Frc consts --		0.0051			0.0232			0.0523	
IR Inten --		5.5083			0.1012			0.0000	
Atom	AN	X	Y	Z	X	Y	Z	X	Y	Z
1	3	0.00	0.00	0.39	0.00	0.00	-0.19	0.44	-0.04	0.00
2	3	0.00	0.00	0.19	0.00	0.00	0.55	-0.01	-0.06	0.00
3	13	-0.15	-0.11	-0.08	-0.10	-0.08	0.15	-0.10	0.22	0.00
4	13	-0.15	-0.11	0.07	-0.03	0.06	-0.20	0.12	0.24	0.00
5	13	0.15	0.11	-0.08	0.10	0.08	0.15	-0.10	0.22	0.00
6	13	0.15	0.11	0.07	0.03	-0.06	-0.20	0.12	0.24	0.00
7	3	0.00	0.00	-0.27	0.00	0.00	0.00	0.05	0.21	0.00
8	4	0.00	0.00	-0.40	0.00	0.00	-0.03	0.00	0.00	0.00
9	3	0.00	0.00	-0.27	0.00	0.00	0.00	-0.05	-0.21	0.00
10	3	0.00	0.00	0.19	0.00	0.00	0.55	0.01	0.06	0.00
11	3	0.00	0.00	0.39	0.00	0.00	-0.19	-0.44	0.04	0.00
12	13	0.15	0.11	-0.08	0.10	0.08	0.15	0.10	-0.22	0.00
13	13	0.15	0.11	0.07	0.03	-0.06	-0.20	-0.12	-0.24	0.00
14	13	-0.15	-0.11	-0.08	-0.10	-0.08	0.15	0.10	-0.22	0.00
15	13	-0.15	-0.11	0.07	-0.03	0.06	-0.20	-0.12	-0.24	0.00

		7			8			9	
		BG			AG			AU	
Frequencies --		72.2706			101.0715			106.9731	
Red. masses --		17.3755			9.7048			13.5518	
Frc consts --		0.0535			0.0584			0.0914	
IR Inten --		0.0000			0.0000			0.1818	
Atom	AN	X	Y	Z	X	Y	Z	X	Y	Z
1	3	0.00	0.00	-0.38	-0.40	0.41	0.00	0.00	0.00	0.24
2	3	0.00	0.00	0.04	0.13	0.24	0.00	0.00	0.00	-0.35
3	13	-0.05	0.02	0.26	0.12	0.04	-0.01	0.14	-0.06	0.16
4	13	0.24	0.05	-0.02	0.13	0.05	0.01	-0.06	-0.12	-0.11
5	13	0.05	-0.02	0.26	0.12	0.04	0.01	-0.14	0.06	0.16
6	13	-0.24	-0.05	-0.02	0.13	0.05	-0.01	0.06	0.12	-0.11
7	3	0.00	0.00	0.31	0.14	0.10	0.00	0.00	0.00	-0.39
8	4	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.14
9	3	0.00	0.00	-0.31	-0.14	-0.10	0.00	0.00	0.00	-0.39
10	3	0.00	0.00	-0.04	-0.13	-0.24	0.00	0.00	0.00	-0.35
11	3	0.00	0.00	0.38	0.40	-0.41	0.00	0.00	0.00	0.24
12	13	-0.05	0.02	-0.26	-0.12	-0.04	-0.01	-0.14	0.06	0.16
13	13	0.24	0.05	0.02	-0.13	-0.05	0.01	0.06	0.12	-0.11
14	13	0.05	-0.02	-0.26	-0.12	-0.04	0.01	0.14	-0.06	0.16

15	13	-0.24	-0.05	0.02	-0.13	-0.05	-0.01	-0.06	-0.12	-0.11

	10	11	12
	BU	AU	BG
Frequencies --	109.0985	115.0116	118.2342
Red. masses --	8.3573	14.4522	9.2832
Frc consts --	0.0586	0.1126	0.0765
IR Inten --	14.5946	2.7269	0.0000

Atom	AN	X	Y	Z	X	Y	Z	X	Y	Z
1	3	0.53	-0.36	0.00	0.00	0.00	-0.25	0.00	0.00	0.08
2	3	-0.05	-0.08	0.00	0.00	0.00	-0.31	0.00	0.00	0.51
3	13	0.04	0.04	0.00	-0.18	-0.02	0.09	0.07	-0.09	-0.01
4	13	-0.10	0.05	-0.01	0.21	-0.05	0.05	-0.04	0.00	-0.12
5	13	0.04	0.04	0.00	0.18	0.02	0.09	-0.07	0.09	-0.01
6	13	-0.10	0.05	0.01	-0.21	0.05	0.05	0.04	0.00	-0.12
7	3	-0.06	-0.16	0.00	0.00	0.00	-0.35	0.00	0.00	0.42
8	4	0.15	-0.10	0.00	0.00	0.00	-0.25	0.00	0.00	0.00
9	3	-0.06	-0.16	0.00	0.00	0.00	-0.35	0.00	0.00	-0.42
10	3	-0.05	-0.08	0.00	0.00	0.00	-0.31	0.00	0.00	-0.51
11	3	0.53	-0.36	0.00	0.00	0.00	-0.25	0.00	0.00	-0.08
12	13	0.04	0.04	0.00	0.18	0.02	0.09	0.07	-0.09	0.01
13	13	-0.10	0.05	0.01	-0.21	0.05	0.05	-0.04	0.00	0.12
14	13	0.04	0.04	0.00	-0.18	-0.02	0.09	-0.07	0.09	0.01
15	13	-0.10	0.05	-0.01	0.21	-0.05	0.05	0.04	0.00	0.12

	13	14	15
	AG	AU	BG
Frequencies --	140.7590	141.1934	141.4940
Red. masses --	14.4887	8.6648	8.5327
Frc consts --	0.1691	0.1018	0.1006
IR Inten --	0.0000	1.8557	0.0000

Atom	AN	X	Y	Z	X	Y	Z	X	Y	Z
1	3	0.40	-0.20	0.00	0.00	0.00	0.15	0.00	0.00	0.13
2	3	0.06	0.31	0.00	0.00	0.00	-0.38	0.00	0.00	-0.47
3	13	0.26	-0.01	-0.03	-0.11	-0.01	0.04	-0.01	0.03	0.06
4	13	-0.12	0.09	0.01	-0.04	-0.03	-0.07	-0.12	0.03	-0.02
5	13	0.26	-0.01	0.03	0.11	0.01	0.04	0.01	-0.03	0.06
6	13	-0.12	0.09	-0.01	0.04	0.03	-0.07	0.12	-0.03	-0.02
7	3	0.10	-0.07	0.00	0.00	0.00	0.53	0.00	0.00	0.48
8	4	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	-0.10	0.00	0.00	0.00
9	3	-0.10	0.07	0.00	0.00	0.00	0.53	0.00	0.00	-0.48
10	3	-0.06	-0.31	0.00	0.00	0.00	-0.38	0.00	0.00	0.47
11	3	-0.40	0.20	0.00	0.00	0.00	0.15	0.00	0.00	-0.13
12	13	-0.26	0.01	-0.03	0.11	0.01	0.04	-0.01	0.03	-0.06
13	13	0.12	-0.09	0.01	0.04	0.03	-0.07	-0.12	0.03	0.02
14	13	-0.26	0.01	0.03	-0.11	-0.01	0.04	0.01	-0.03	-0.06

15	13	0.12	-0.09	-0.01	-0.04	-0.03	-0.07	0.12	-0.03	0.02
		16			17			18		
		BG			AU			BU		
Frequencies --		159.5219			181.5436			187.4260		
Red. masses --		14.0384			10.8733			10.2822		
Frc consts --		0.2105			0.2111			0.2128		
IR Inten --		0.0000			4.7057			9.4341		
Atom	AN	X	Y	Z	X	Y	Z	X	Y	Z
1	3	0.00	0.00	-0.56	0.00	0.00	0.59	0.09	-0.07	0.00
2	3	0.00	0.00	0.06	0.00	0.00	0.21	-0.11	0.10	0.00
3	13	0.19	-0.02	0.04	-0.03	0.12	-0.03	0.10	-0.12	-0.02
4	13	-0.13	0.12	0.13	0.15	-0.04	-0.09	-0.09	0.02	0.02
5	13	-0.19	0.02	0.04	0.03	-0.12	-0.03	0.10	-0.12	0.02
6	13	0.13	-0.12	0.13	-0.15	0.04	-0.09	-0.09	0.02	-0.02
7	3	0.00	0.00	-0.04	0.00	0.00	-0.02	0.17	0.50	0.00
8	4	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.13	-0.34	0.33	0.00
9	3	0.00	0.00	0.04	0.00	0.00	-0.02	0.17	0.50	0.00
10	3	0.00	0.00	-0.06	0.00	0.00	0.21	-0.11	0.10	0.00
11	3	0.00	0.00	0.56	0.00	0.00	0.59	0.09	-0.07	0.00
12	13	0.19	-0.02	-0.04	0.03	-0.12	-0.03	0.10	-0.12	0.02
13	13	-0.13	0.12	-0.13	-0.15	0.04	-0.09	-0.09	0.02	-0.02
14	13	-0.19	0.02	-0.04	-0.03	0.12	-0.03	0.10	-0.12	-0.02
15	13	0.13	-0.12	-0.13	0.15	-0.04	-0.09	-0.09	0.02	0.02
		19			20			21		
		BG			BU			AG		
Frequencies --		208.8158			223.5819			232.3582		
Red. masses --		14.0301			7.5960			8.7070		
Frc consts --		0.3604			0.2237			0.2770		
IR Inten --		0.0000			16.0637			0.0000		
Atom	AN	X	Y	Z	X	Y	Z	X	Y	Z
1	3	0.00	0.00	-0.55	0.16	-0.09	0.00	-0.08	0.14	0.00
2	3	0.00	0.00	-0.07	0.06	0.66	0.00	-0.13	-0.53	0.00
3	13	-0.19	-0.17	-0.06	-0.05	-0.02	-0.02	0.05	-0.07	0.03
4	13	-0.07	-0.13	0.02	0.04	-0.05	0.02	-0.06	0.09	-0.01
5	13	0.19	0.17	-0.06	-0.05	-0.02	0.02	0.05	-0.07	-0.03
6	13	0.07	0.13	0.02	0.04	-0.05	-0.02	-0.06	0.09	0.01
7	3	0.00	0.00	0.12	-0.08	-0.03	0.00	0.27	0.26	0.00
8	4	0.00	0.00	0.00	-0.01	-0.01	0.00	0.00	0.00	0.00
9	3	0.00	0.00	-0.12	-0.08	-0.03	0.00	-0.27	-0.26	0.00
10	3	0.00	0.00	0.07	0.06	0.66	0.00	0.13	0.53	0.00
11	3	0.00	0.00	0.55	0.16	-0.09	0.00	0.08	-0.14	0.00
12	13	-0.19	-0.17	0.06	-0.05	-0.02	0.02	-0.05	0.07	0.03
13	13	-0.07	-0.13	-0.02	0.04	-0.05	-0.02	0.06	-0.09	-0.01
14	13	0.19	0.17	0.06	-0.05	-0.02	-0.02	-0.05	0.07	-0.03

15	13	0.07	0.13	-0.02	0.04	-0.05	0.02	0.06	-0.09	0.01

		22			23			24		
		BU			AG			BG		
Frequencies --		241.5932			244.4665			245.6147		
Red. masses --		13.6808			9.5727			20.0615		
Frc consts --		0.4705			0.3371			0.7131		
IR Inten --		0.9261			0.0000			0.0000		
Atom	AN	X	Y	Z	X	Y	Z	X	Y	Z
1	3	-0.14	-0.32	0.00	-0.14	-0.04	0.00	0.00	0.00	0.26
2	3	0.18	-0.09	0.00	0.18	-0.45	0.00	0.00	0.00	-0.24
3	13	0.06	0.19	-0.06	0.09	0.15	-0.03	-0.05	-0.30	0.01
4	13	-0.03	-0.19	0.02	-0.01	-0.03	-0.01	0.04	0.27	-0.02
5	13	0.06	0.19	0.06	0.09	0.15	0.03	0.05	0.30	0.01
6	13	-0.03	-0.19	-0.02	-0.01	-0.03	0.01	-0.04	-0.27	-0.02
7	3	-0.26	0.27	0.00	-0.18	-0.38	0.00	0.00	0.00	-0.22
8	4	-0.03	0.24	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
9	3	-0.26	0.27	0.00	0.18	0.38	0.00	0.00	0.00	0.22
10	3	0.18	-0.09	0.00	-0.18	0.45	0.00	0.00	0.00	0.24
11	3	-0.14	-0.32	0.00	0.14	0.04	0.00	0.00	0.00	-0.26
12	13	0.06	0.19	0.06	-0.09	-0.15	-0.03	-0.05	-0.30	-0.01
13	13	-0.03	-0.19	-0.02	0.01	0.03	-0.01	0.04	0.27	0.02
14	13	0.06	0.19	-0.06	-0.09	-0.15	0.03	0.05	0.30	-0.01
15	13	-0.03	-0.19	0.02	0.01	0.03	0.01	-0.04	-0.27	0.02

		25			26			27		
		AU			AG			BU		
Frequencies --		246.5354			256.0152			293.4381		
Red. masses --		16.4854			10.0355			11.8184		
Frc consts --		0.5903			0.3875			0.5996		
IR Inten --		4.4992			0.0000			64.1604		
Atom	AN	X	Y	Z	X	Y	Z	X	Y	Z
1	3	0.00	0.00	-0.41	-0.13	-0.29	0.00	0.20	0.30	0.00
2	3	0.00	0.00	0.24	0.07	-0.01	0.00	0.07	-0.01	0.00
3	13	-0.01	0.15	-0.01	0.03	0.11	-0.07	0.04	-0.03	0.09
4	13	-0.04	-0.31	0.00	-0.04	-0.11	0.07	-0.01	-0.03	-0.22
5	13	0.01	-0.15	-0.01	0.03	0.11	0.07	0.04	-0.03	-0.09
6	13	0.04	0.31	0.00	-0.04	-0.11	-0.07	-0.01	-0.03	0.22
7	3	0.00	0.00	0.16	0.10	0.56	0.00	-0.47	0.06	0.00
8	4	0.00	0.00	0.13	0.00	0.00	0.00	-0.05	0.19	0.00
9	3	0.00	0.00	0.16	-0.10	-0.56	0.00	-0.47	0.06	0.00
10	3	0.00	0.00	0.24	-0.07	0.01	0.00	0.07	-0.01	0.00
11	3	0.00	0.00	-0.41	0.13	0.29	0.00	0.20	0.30	0.00
12	13	0.01	-0.15	-0.01	-0.03	-0.11	-0.07	0.04	-0.03	-0.09
13	13	0.04	0.31	0.00	0.04	0.11	0.07	-0.01	-0.03	0.22
14	13	-0.01	0.15	-0.01	-0.03	-0.11	0.07	0.04	-0.03	0.09

15	13	-0.04	-0.31	0.00	0.04	0.11	-0.07	-0.01	-0.03	-0.22

	28	29	30
	BU	AG	AG
Frequencies --	299.9876	305.4217	314.9742
Red. masses --	12.9933	10.1303	11.6369
Frc consts --	0.6889	0.5568	0.6802
IR Inten --	121.1289	0.0000	0.0000

Atom	AN	X	Y	Z	X	Y	Z	X	Y	Z
1	3	-0.02	0.02	0.00	-0.16	-0.23	0.00	-0.02	0.03	0.00
2	3	-0.08	-0.08	0.00	-0.10	0.01	0.00	-0.26	-0.10	0.00
3	13	0.05	-0.06	-0.23	-0.04	0.00	-0.03	0.03	-0.08	-0.15
4	13	0.05	0.08	0.06	0.01	0.04	0.18	0.05	0.07	0.15
5	13	0.05	-0.06	0.23	-0.04	0.00	0.03	0.03	-0.08	0.15
6	13	0.05	0.08	-0.06	0.01	0.04	-0.18	0.05	0.07	-0.15
7	3	-0.53	-0.16	0.00	0.47	-0.34	0.00	-0.54	0.10	0.00
8	4	-0.28	0.03	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
9	3	-0.53	-0.16	0.00	-0.47	0.34	0.00	0.54	-0.10	0.00
10	3	-0.08	-0.08	0.00	0.10	-0.01	0.00	0.26	0.10	0.00
11	3	-0.02	0.02	0.00	0.16	0.23	0.00	0.02	-0.03	0.00
12	13	0.05	-0.06	0.23	0.04	0.00	-0.03	-0.03	0.08	-0.15
13	13	0.05	0.08	-0.06	-0.01	-0.04	0.18	-0.05	-0.07	0.15
14	13	0.05	-0.06	-0.23	0.04	0.00	0.03	-0.03	0.08	0.15
15	13	0.05	0.08	0.06	-0.01	-0.04	-0.18	-0.05	-0.07	-0.15

	31	32	33
	BU	AG	BU
Frequencies --	323.6872	338.7569	339.9850
Red. masses --	11.8001	8.5470	9.3817
Frc consts --	0.7284	0.5779	0.6389
IR Inten --	108.6229	0.0000	15.1593

Atom	AN	X	Y	Z	X	Y	Z	X	Y	Z
1	3	0.09	0.13	0.00	-0.06	-0.10	0.00	0.01	0.02	0.00
2	3	0.47	-0.02	0.00	-0.67	0.04	0.00	0.63	-0.06	0.00
3	13	-0.05	0.01	-0.19	0.06	0.06	0.06	-0.02	-0.05	0.08
4	13	-0.06	-0.01	-0.14	0.05	-0.04	-0.05	-0.04	0.05	0.13
5	13	-0.05	0.01	0.19	0.06	0.06	-0.06	-0.02	-0.05	-0.08
6	13	-0.06	-0.01	0.14	0.05	-0.04	0.05	-0.04	0.05	-0.13
7	3	0.36	0.00	0.00	0.01	-0.04	0.00	-0.19	0.02	0.00
8	4	-0.05	-0.11	0.00	0.00	0.00	0.00	-0.05	0.03	0.00
9	3	0.36	0.00	0.00	-0.01	0.04	0.00	-0.19	0.02	0.00
10	3	0.47	-0.02	0.00	0.67	-0.04	0.00	0.63	-0.06	0.00
11	3	0.09	0.13	0.00	0.06	0.10	0.00	0.01	0.02	0.00
12	13	-0.05	0.01	0.19	-0.06	-0.06	0.06	-0.02	-0.05	-0.08
13	13	-0.06	-0.01	0.14	-0.05	0.04	-0.05	-0.04	0.05	-0.13
14	13	-0.05	0.01	-0.19	-0.06	-0.06	-0.06	-0.02	-0.05	0.08

15	13	-0.06	-0.01	-0.14	-0.05	0.04	0.05	-0.04	0.05	0.13

		34			35			36		
		AG			BU			AU		
Frequencies --		348.5772			355.8165			360.5190		
Red. masses --		19.3498			8.6726			10.4683		
Frc consts --		1.3852			0.6469			0.8016		
IR Inten --		0.0000			191.8051			1.8294		
Atom	AN	X	Y	Z	X	Y	Z	X	Y	Z
1	3	-0.08	-0.14	0.00	0.24	0.37	0.00	0.00	0.00	-0.02
2	3	0.18	-0.01	0.00	-0.10	-0.05	0.00	0.00	0.00	-0.07
3	13	0.05	0.01	0.34	-0.02	0.00	-0.05	-0.10	-0.08	-0.06
4	13	0.01	0.02	0.19	-0.02	-0.06	0.09	-0.01	-0.01	0.00
5	13	0.05	0.01	-0.34	-0.02	0.00	0.05	0.10	0.08	-0.06
6	13	0.01	0.02	-0.19	-0.02	-0.06	-0.09	0.01	0.01	0.00
7	3	-0.34	0.13	0.00	-0.10	0.33	0.00	0.00	0.00	-0.07
8	4	0.00	0.00	0.00	0.41	-0.34	0.00	0.00	0.00	0.95
9	3	0.34	-0.13	0.00	-0.10	0.33	0.00	0.00	0.00	-0.07
10	3	-0.18	0.01	0.00	-0.10	-0.05	0.00	0.00	0.00	-0.07
11	3	0.08	0.14	0.00	0.24	0.37	0.00	0.00	0.00	-0.02
12	13	-0.05	-0.01	0.34	-0.02	0.00	0.05	0.10	0.08	-0.06
13	13	-0.01	-0.02	0.19	-0.02	-0.06	-0.09	0.01	0.01	0.00
14	13	-0.05	-0.01	-0.34	-0.02	0.00	-0.05	-0.10	-0.08	-0.06
15	13	-0.01	-0.02	-0.19	-0.02	-0.06	0.09	-0.01	-0.01	0.00

		37			38			39		
		AG			BU			BU		
Frequencies --		368.2829			373.9067			608.0266		
Red. masses --		9.3788			8.9779			9.5380		
Frc consts --		0.7495			0.7395			2.0776		
IR Inten --		0.0000			44.9678			76.1677		
Atom	AN	X	Y	Z	X	Y	Z	X	Y	Z
1	3	0.37	0.53	0.00	0.26	0.37	0.00	-0.03	-0.02	0.00
2	3	-0.10	-0.04	0.00	-0.06	-0.04	0.00	0.00	-0.03	0.00
3	13	0.00	0.06	0.00	0.02	0.05	0.01	-0.05	-0.05	-0.05
4	13	-0.04	-0.11	0.11	-0.03	-0.08	0.08	0.00	0.01	0.01
5	13	0.00	0.06	0.00	0.02	0.05	-0.01	-0.05	-0.05	0.05
6	13	-0.04	-0.11	-0.11	-0.03	-0.08	-0.08	0.00	0.01	-0.01
7	3	0.10	-0.03	0.00	0.14	-0.33	0.00	0.01	-0.07	0.00
8	4	0.00	0.00	0.00	-0.36	0.37	0.00	0.65	0.73	0.00
9	3	-0.10	0.03	0.00	0.14	-0.33	0.00	0.01	-0.07	0.00
10	3	0.10	0.04	0.00	-0.06	-0.04	0.00	0.00	-0.03	0.00
11	3	-0.37	-0.53	0.00	0.26	0.37	0.00	-0.03	-0.02	0.00
12	13	0.00	-0.06	0.00	0.02	0.05	-0.01	-0.05	-0.05	0.05
13	13	0.04	0.11	0.11	-0.03	-0.08	-0.08	0.00	0.01	-0.01
14	13	0.00	-0.06	0.00	0.02	0.05	0.01	-0.05	-0.05	-0.05

15	13	0.04	0.11	-0.11	-0.03	-0.08	0.08	0.00	0.01	0.01

Charge = 0 Multiplicity = 1

Al,0,-1.9831245215,-0.8186151855,1.4111605702
Al,0,0.0374075794,-2.2821622297,1.3180182037
Al,0,0.0374075794,-2.2821622297,-1.3180182037
Al,0,-1.9831245215,-0.8186151855,-1.4111605702
Li,0,2.3122140738,-1.4946438618,0.
Li,0,-4.2269526317,-1.0713403465,0.
Li,0,-2.0824094978,-3.4234316386,0.
Li,0,-2.3122140738,1.4946438618,0.
Li,0,4.2269526317,1.0713403465,0.
Li,0,2.0824094978,3.4234316386,0.
Al,0,-0.0374075794,2.2821622297,-1.3180182037
Al,0,1.9831245215,0.8186151855,-1.4111605702
Al,0,-0.0374075794,2.2821622297,1.3180182037
Al,0,1.9831245215,0.8186151855,1.4111605702
Be,0,0.,0.,0.

State=1-AG\HF=-1999.6425106

		1			2			3		
		AU			BU			BG		
Frequencies --		-73.1579			-64.3671			-42.5091		
Red. masses --		14.1586			18.5638			15.9954		
Frc consts --		0.0446			0.0453			0.0170		
IR Inten --		3.0770			0.8858			0.0000		
Atom	AN	X	Y	Z	X	Y	Z	X	Y	Z
1	13	-0.02	0.20	-0.02	-0.02	-0.25	-0.05	0.02	0.21	0.03
2	13	0.01	0.21	0.03	0.00	0.27	0.05	-0.01	-0.26	0.03
3	13	-0.01	-0.21	0.03	0.00	0.27	-0.05	0.01	0.26	0.03
4	13	0.02	-0.20	-0.02	-0.02	-0.25	0.05	-0.02	-0.21	0.03
5	3	0.00	0.00	-0.34	0.12	0.00	0.00	0.00	0.00	0.33
6	3	0.00	0.00	0.14	0.04	-0.30	0.00	0.00	0.00	0.25
7	3	0.00	0.00	0.38	0.22	0.08	0.00	0.00	0.00	-0.32
8	3	0.00	0.00	-0.34	0.12	0.00	0.00	0.00	0.00	-0.33
9	3	0.00	0.00	0.14	0.04	-0.30	0.00	0.00	0.00	-0.25
10	3	0.00	0.00	0.38	0.22	0.08	0.00	0.00	0.00	0.32
11	13	0.01	0.21	0.03	0.00	0.27	0.05	0.01	0.26	-0.03

12	13	-0.02	0.20	-0.02	-0.02	-0.25	-0.05	-0.02	-0.21	-0.03
13	13	-0.01	-0.21	0.03	0.00	0.27	-0.05	-0.01	-0.26	-0.03
14	13	0.02	-0.20	-0.02	-0.02	-0.25	0.05	0.02	0.21	-0.03
15	4	0.00	0.00	-0.33	-0.34	0.06	0.00	0.00	0.00	0.00

	4	5	6
	AU	AG	AU
Frequencies --	4.9313	90.8359	113.6330
Red. masses --	16.1117	20.1531	18.0123
Frc consts --	0.0002	0.0980	0.1370
IR Inten --	1.7997	0.0000	0.6201

Atom	AN	X	Y	Z	X	Y	Z	X	Y	Z
1	13	0.14	0.17	0.13	0.20	0.05	0.02	-0.04	0.19	-0.15
2	13	0.11	-0.13	-0.14	0.18	-0.30	-0.03	-0.06	-0.14	0.23
3	13	-0.11	0.13	-0.14	0.18	-0.30	0.03	0.06	0.14	0.23
4	13	-0.14	-0.17	0.13	0.20	0.05	-0.02	0.04	-0.19	-0.15
5	3	0.00	0.00	-0.03	-0.14	-0.02	0.00	0.00	0.00	0.02
6	3	0.00	0.00	0.45	-0.01	0.22	0.00	0.00	0.00	-0.02
7	3	0.00	0.00	-0.24	-0.30	-0.12	0.00	0.00	0.00	-0.45
8	3	0.00	0.00	-0.03	0.14	0.02	0.00	0.00	0.00	0.02
9	3	0.00	0.00	0.45	0.01	-0.22	0.00	0.00	0.00	-0.02
10	3	0.00	0.00	-0.24	0.30	0.12	0.00	0.00	0.00	-0.45
11	13	0.11	-0.13	-0.14	-0.18	0.30	0.03	-0.06	-0.14	0.23
12	13	0.14	0.17	0.13	-0.20	-0.05	-0.02	-0.04	0.19	-0.15
13	13	-0.11	0.13	-0.14	-0.18	0.30	-0.03	0.06	0.14	0.23
14	13	-0.14	-0.17	0.13	-0.20	-0.05	0.02	0.04	-0.19	-0.15
15	4	0.00	0.00	-0.13	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	-0.23

	7	8	9
	BG	AG	BU
Frequencies --	116.9565	117.9628	130.0875
Red. masses --	14.7272	18.7266	7.9488
Frc consts --	0.1187	0.1535	0.0793
IR Inten --	0.0000	0.0000	12.5192

Atom	AN	X	Y	Z	X	Y	Z	X	Y	Z
1	13	-0.03	-0.17	0.22	0.05	0.36	0.04	0.04	-0.09	-0.01
2	13	-0.05	-0.04	0.12	0.05	0.10	0.00	0.05	0.01	-0.02
3	13	0.05	0.04	0.12	0.05	0.10	0.00	0.05	0.01	0.02
4	13	0.03	0.17	0.22	0.05	0.36	-0.04	0.04	-0.09	0.01
5	3	0.00	0.00	-0.09	0.24	-0.04	0.00	0.12	0.06	0.00
6	3	0.00	0.00	-0.14	0.36	-0.01	0.00	-0.41	0.44	0.00
7	3	0.00	0.00	-0.53	0.00	0.15	0.00	-0.31	0.06	0.00
8	3	0.00	0.00	0.09	-0.24	0.04	0.00	0.12	0.06	0.00
9	3	0.00	0.00	0.14	-0.36	0.01	0.00	-0.41	0.44	0.00
10	3	0.00	0.00	0.53	0.00	-0.15	0.00	-0.31	0.06	0.00
11	13	0.05	0.04	-0.12	-0.05	-0.10	0.00	0.05	0.01	-0.02

12	13	0.03	0.17	-0.22	-0.05	-0.36	-0.04	0.04	-0.09	-0.01
13	13	-0.05	-0.04	-0.12	-0.05	-0.10	0.00	0.05	0.01	0.02
14	13	-0.03	-0.17	-0.22	-0.05	-0.36	0.04	0.04	-0.09	0.01
15	4	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	-0.05	0.00	0.00

	10	11	12
	BG	AG	AU
Frequencies --	146.6917	147.9966	148.0774
Red. masses --	20.8387	9.3381	13.6845
Frc consts --	0.2642	0.1205	0.1768
IR Inten --	0.0000	0.0000	2.7339

Atom	AN	X	Y	Z	X	Y	Z	X	Y	Z
1	13	-0.11	0.08	0.21	0.06	-0.02	0.02	0.12	-0.03	-0.18
2	13	-0.19	0.05	-0.27	0.06	0.14	-0.01	0.16	-0.09	0.06
3	13	0.19	-0.05	-0.27	0.06	0.14	0.01	-0.16	0.09	0.06
4	13	0.11	-0.08	0.21	0.06	-0.02	-0.02	-0.12	0.03	-0.18
5	3	0.00	0.00	0.32	-0.03	0.08	0.00	0.00	0.00	0.09
6	3	0.00	0.00	-0.20	-0.34	0.49	0.00	0.00	0.00	0.15
7	3	0.00	0.00	0.11	-0.23	0.15	0.00	0.00	0.00	0.54
8	3	0.00	0.00	-0.32	0.03	-0.08	0.00	0.00	0.00	0.09
9	3	0.00	0.00	0.20	0.34	-0.49	0.00	0.00	0.00	0.15
10	3	0.00	0.00	-0.11	0.23	-0.15	0.00	0.00	0.00	0.54
11	13	0.19	-0.05	0.27	-0.06	-0.14	0.01	0.16	-0.09	0.06
12	13	0.11	-0.08	-0.21	-0.06	0.02	-0.02	0.12	-0.03	-0.18
13	13	-0.19	0.05	0.27	-0.06	-0.14	-0.01	-0.16	0.09	0.06
14	13	-0.11	0.08	-0.21	-0.06	0.02	0.02	-0.12	0.03	-0.18
15	4	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.18

	13	14	15
	BU	AU	AG
Frequencies --	172.1096	175.1049	180.0276
Red. masses --	14.5195	12.4120	17.6480
Frc consts --	0.2534	0.2242	0.3370
IR Inten --	20.7216	0.0229	0.0000

Atom	AN	X	Y	Z	X	Y	Z	X	Y	Z
1	13	0.03	-0.01	0.29	0.10	-0.12	-0.06	0.02	0.04	-0.32
2	13	-0.01	0.04	-0.09	0.07	0.17	0.07	0.05	-0.01	0.16
3	13	-0.01	0.04	0.09	-0.07	-0.17	0.07	0.05	-0.01	-0.16
4	13	0.03	-0.01	-0.29	-0.10	0.12	-0.06	0.02	0.04	0.32
5	3	0.19	-0.13	0.00	0.00	0.00	0.12	0.09	-0.26	0.00
6	3	0.25	-0.12	0.00	0.00	0.00	0.38	-0.22	0.14	0.00
7	3	-0.39	0.06	0.00	0.00	0.00	-0.44	0.30	-0.02	0.00
8	3	0.19	-0.13	0.00	0.00	0.00	0.12	-0.09	0.26	0.00
9	3	0.25	-0.12	0.00	0.00	0.00	0.38	0.22	-0.14	0.00
10	3	-0.39	0.06	0.00	0.00	0.00	-0.44	-0.30	0.02	0.00
11	13	-0.01	0.04	-0.09	0.07	0.17	0.07	-0.05	0.01	-0.16

12	13	0.03	-0.01	0.29	0.10	-0.12	-0.06	-0.02	-0.04	0.32
13	13	-0.01	0.04	0.09	-0.07	-0.17	0.07	-0.05	0.01	0.16
14	13	0.03	-0.01	-0.29	-0.10	0.12	-0.06	-0.02	-0.04	-0.32
15	4	-0.25	-0.03	0.00	0.00	0.00	-0.19	0.00	0.00	0.00

	16	17	18
	BG	BU	AU
Frequencies --	191.7211	195.2084	209.0977
Red. masses --	9.7001	8.5297	8.1418
Frc consts --	0.2101	0.1915	0.2097
IR Inten --	0.0000	14.8638	4.5684

Atom	AN	X	Y	Z	X	Y	Z	X	Y	Z
1	13	0.00	-0.01	0.07	-0.01	-0.02	0.12	-0.01	0.05	-0.03
2	13	0.08	-0.15	0.02	-0.05	0.01	-0.02	-0.07	0.02	-0.06
3	13	-0.08	0.15	0.02	-0.05	0.01	0.02	0.07	-0.02	-0.06
4	13	0.00	0.01	0.07	-0.01	-0.02	-0.12	0.01	-0.05	-0.03
5	3	0.00	0.00	-0.08	0.07	-0.03	0.00	0.00	0.00	0.65
6	3	0.00	0.00	-0.46	-0.15	0.31	0.00	0.00	0.00	0.06
7	3	0.00	0.00	0.46	0.56	-0.16	0.00	0.00	0.00	0.14
8	3	0.00	0.00	0.08	0.07	-0.03	0.00	0.00	0.00	0.65
9	3	0.00	0.00	0.46	-0.15	0.31	0.00	0.00	0.00	0.06
10	3	0.00	0.00	-0.46	0.56	-0.16	0.00	0.00	0.00	0.14
11	13	-0.08	0.15	-0.02	-0.05	0.01	-0.02	-0.07	0.02	-0.06
12	13	0.00	0.01	-0.07	-0.01	-0.02	0.12	-0.01	0.05	-0.03
13	13	0.08	-0.15	-0.02	-0.05	0.01	0.02	0.07	-0.02	-0.06
14	13	0.00	-0.01	-0.07	-0.01	-0.02	-0.12	0.01	-0.05	-0.03
15	4	0.00	0.00	0.00	0.05	-0.05	0.00	0.00	0.00	-0.26

	19	20	21
	AG	AU	BG
Frequencies --	215.9284	218.5320	237.9277
Red. masses --	7.8792	9.7791	9.8139
Frc consts --	0.2164	0.2752	0.3273
IR Inten --	0.0000	2.8700	0.0000

Atom	AN	X	Y	Z	X	Y	Z	X	Y	Z
1	13	-0.01	-0.04	-0.08	-0.10	-0.03	-0.06	-0.05	-0.17	0.01
2	13	0.04	0.03	0.02	-0.13	-0.03	-0.04	0.01	-0.06	-0.01
3	13	0.04	0.03	-0.02	0.13	0.03	-0.04	-0.01	0.06	-0.01
4	13	-0.01	-0.04	0.08	0.10	0.03	-0.06	0.05	0.17	0.01
5	3	0.11	-0.02	0.00	0.00	0.00	-0.13	0.00	0.00	0.39
6	3	0.10	-0.31	0.00	0.00	0.00	0.61	0.00	0.00	0.44
7	3	-0.56	0.20	0.00	0.00	0.00	0.06	0.00	0.00	0.29
8	3	-0.11	0.02	0.00	0.00	0.00	-0.13	0.00	0.00	-0.39
9	3	-0.10	0.31	0.00	0.00	0.00	0.61	0.00	0.00	-0.44
10	3	0.56	-0.20	0.00	0.00	0.00	0.06	0.00	0.00	-0.29
11	13	-0.04	-0.03	-0.02	-0.13	-0.03	-0.04	-0.01	0.06	0.01

12	13	0.01	0.04	0.08	-0.10	-0.03	-0.06	0.05	0.17	-0.01
13	13	-0.04	-0.03	0.02	0.13	0.03	-0.04	0.01	-0.06	0.01
14	13	0.01	0.04	-0.08	0.10	0.03	-0.06	-0.05	-0.17	-0.01
15	4	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.31	0.00	0.00	0.00

	22	23	24
	BU	AG	BG
Frequencies --	248.8793	269.7478	281.6443
Red. masses --	19.2062	15.6962	10.0878
Frc consts --	0.7009	0.6729	0.4715
IR Inten --	8.0620	0.0000	0.0000

Atom	AN	X	Y	Z	X	Y	Z	X	Y	Z
1	13	0.03	0.01	0.09	0.01	0.01	-0.14	-0.06	-0.01	-0.02
2	13	-0.01	0.00	0.38	-0.03	-0.01	-0.30	-0.16	-0.10	-0.01
3	13	-0.01	0.00	-0.38	-0.03	-0.01	0.30	0.16	0.10	-0.01
4	13	0.03	0.01	-0.09	0.01	0.01	0.14	0.06	0.01	-0.02
5	3	-0.13	-0.33	0.00	0.44	0.21	0.00	0.00	0.00	-0.57
6	3	-0.01	0.16	0.00	-0.06	0.04	0.00	0.00	0.00	0.26
7	3	-0.11	0.15	0.00	0.03	-0.20	0.00	0.00	0.00	0.16
8	3	-0.13	-0.33	0.00	-0.44	-0.21	0.00	0.00	0.00	0.57
9	3	-0.01	0.16	0.00	0.06	-0.04	0.00	0.00	0.00	-0.26
10	3	-0.11	0.15	0.00	-0.03	0.20	0.00	0.00	0.00	-0.16
11	13	-0.01	0.00	0.38	0.03	0.01	0.30	0.16	0.10	0.01
12	13	0.03	0.01	0.09	-0.01	-0.01	0.14	0.06	0.01	0.02
13	13	-0.01	0.00	-0.38	0.03	0.01	-0.30	-0.16	-0.10	0.01
14	13	0.03	0.01	-0.09	-0.01	-0.01	-0.14	-0.06	-0.01	0.02
15	4	0.11	-0.11	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00

	25	26	27
	BU	BU	AG
Frequencies --	289.8035	291.3834	298.2340
Red. masses --	10.1080	9.4033	9.3823
Frc consts --	0.5002	0.4704	0.4917
IR Inten --	28.7527	29.1511	0.0000

Atom	AN	X	Y	Z	X	Y	Z	X	Y	Z
1	13	-0.07	-0.01	0.08	-0.11	-0.03	0.04	-0.07	-0.03	0.09
2	13	0.15	-0.04	0.03	0.03	0.01	0.01	0.10	-0.04	0.07
3	13	0.15	-0.04	-0.03	0.03	0.01	-0.01	0.10	-0.04	-0.07
4	13	-0.07	-0.01	-0.08	-0.11	-0.03	-0.04	-0.07	-0.03	-0.09
5	3	-0.40	0.42	0.00	0.27	0.25	0.00	0.63	-0.08	0.00
6	3	-0.12	-0.08	0.00	-0.04	-0.12	0.00	-0.18	-0.01	0.00
7	3	0.09	0.06	0.00	-0.03	0.21	0.00	0.06	-0.04	0.00
8	3	-0.40	0.42	0.00	0.27	0.25	0.00	-0.63	0.08	0.00
9	3	-0.12	-0.08	0.00	-0.04	-0.12	0.00	0.18	0.01	0.00
10	3	0.09	0.06	0.00	-0.03	0.21	0.00	-0.06	0.04	0.00
11	13	0.15	-0.04	0.03	0.03	0.01	0.01	-0.10	0.04	-0.07

12	13	-0.07	-0.01	0.08	-0.11	-0.03	0.04	0.07	0.03	-0.09
13	13	0.15	-0.04	-0.03	0.03	0.01	-0.01	-0.10	0.04	0.07
14	13	-0.07	-0.01	-0.08	-0.11	-0.03	-0.04	0.07	0.03	0.09
15	4	-0.33	-0.07	0.00	0.71	-0.20	0.00	0.00	0.00	0.00

	28	29	30
	BG	BU	AU
Frequencies --	308.2932	318.6794	320.6082
Red. masses --	22.8614	8.7723	11.0611
Frc consts --	1.2802	0.5249	0.6699
IR Inten --	0.0000	29.1240	14.7339

Atom	AN	X	Y	Z	X	Y	Z	X	Y	Z
1	13	0.37	-0.06	-0.01	-0.07	0.06	-0.02	-0.06	0.11	-0.03
2	13	-0.24	-0.01	0.04	0.03	-0.04	0.08	0.09	0.09	-0.03
3	13	0.24	0.01	0.04	0.03	-0.04	-0.08	-0.09	-0.09	-0.03
4	13	-0.37	0.06	-0.01	-0.07	0.06	0.02	0.06	-0.11	-0.03
5	3	0.00	0.00	0.23	0.56	0.12	0.00	0.00	0.00	0.21
6	3	0.00	0.00	-0.14	-0.05	-0.06	0.00	0.00	0.00	-0.09
7	3	0.00	0.00	0.18	0.01	-0.22	0.00	0.00	0.00	-0.20
8	3	0.00	0.00	-0.23	0.56	0.12	0.00	0.00	0.00	0.21
9	3	0.00	0.00	0.14	-0.05	-0.06	0.00	0.00	0.00	-0.09
10	3	0.00	0.00	-0.18	0.01	-0.22	0.00	0.00	0.00	-0.20
11	13	0.24	0.01	-0.04	0.03	-0.04	0.08	0.09	0.09	-0.03
12	13	-0.37	0.06	0.01	-0.07	0.06	-0.02	-0.06	0.11	-0.03
13	13	-0.24	-0.01	-0.04	0.03	-0.04	-0.08	-0.09	-0.09	-0.03
14	13	0.37	-0.06	0.01	-0.07	0.06	0.02	0.06	-0.11	-0.03
15	4	0.00	0.00	0.00	-0.42	0.04	0.00	0.00	0.00	0.82

	31	32	33
	AG	BU	AU
Frequencies --	322.5199	331.9273	334.1659
Red. masses --	8.0286	7.4431	21.0984
Frc consts --	0.4920	0.4832	1.3881
IR Inten --	0.0000	16.7819	8.7293

Atom	AN	X	Y	Z	X	Y	Z	X	Y	Z
1	13	-0.06	0.06	-0.02	0.00	0.03	0.00	0.32	0.05	-0.02
2	13	0.02	-0.04	0.05	0.02	-0.05	-0.03	-0.25	0.04	0.01
3	13	0.02	-0.04	-0.05	0.02	-0.05	0.03	0.25	-0.04	0.01
4	13	-0.06	0.06	0.02	0.00	0.03	0.00	-0.32	-0.05	-0.02
5	3	-0.07	0.64	0.00	0.09	-0.27	0.00	0.00	0.00	-0.09
6	3	-0.21	-0.10	0.00	-0.27	-0.17	0.00	0.00	0.00	-0.18
7	3	0.02	0.08	0.00	0.17	0.52	0.00	0.00	0.00	0.03
8	3	0.07	-0.64	0.00	0.09	-0.27	0.00	0.00	0.00	-0.09
9	3	0.21	0.10	0.00	-0.27	-0.17	0.00	0.00	0.00	-0.18
10	3	-0.02	-0.08	0.00	0.17	0.52	0.00	0.00	0.00	0.03
11	13	-0.02	0.04	-0.05	0.02	-0.05	-0.03	-0.25	0.04	0.01

12	13	0.06	-0.06	0.02	0.00	0.03	0.00	0.32	0.05	-0.02
13	13	-0.02	0.04	0.05	0.02	-0.05	0.03	0.25	-0.04	0.01
14	13	0.06	-0.06	-0.02	0.00	0.03	0.00	-0.32	-0.05	-0.02
15	4	0.00	0.00	0.00	-0.18	0.02	0.00	0.00	0.00	0.48

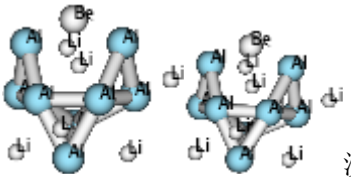
	34	35	36
	AG	BU	AG
Frequencies --	336.1270	343.7395	348.0862
Red. masses --	8.6445	8.0681	7.9715
Frc consts --	0.5754	0.5617	0.5691
IR Inten --	0.0000	156.5307	0.0000

Atom	AN	X	Y	Z	X	Y	Z	X	Y	Z
1	13	-0.04	0.03	0.02	0.01	-0.05	-0.03	-0.02	0.05	0.01
2	13	0.08	-0.02	-0.10	-0.07	-0.07	0.01	0.07	0.07	0.00
3	13	0.08	-0.02	0.10	-0.07	-0.07	-0.01	0.07	0.07	0.00
4	13	-0.04	0.03	-0.02	0.01	-0.05	0.03	-0.02	0.05	-0.01
5	3	-0.18	-0.24	0.00	0.08	0.26	0.00	-0.17	-0.09	0.00
6	3	-0.33	-0.25	0.00	0.41	0.29	0.00	-0.25	-0.24	0.00
7	3	0.17	0.41	0.00	0.07	0.36	0.00	-0.13	-0.55	0.00
8	3	0.18	0.24	0.00	0.08	0.26	0.00	0.17	0.09	0.00
9	3	0.33	0.25	0.00	0.41	0.29	0.00	0.25	0.24	0.00
10	3	-0.17	-0.41	0.00	0.07	0.36	0.00	0.13	0.55	0.00
11	13	-0.08	0.02	0.10	-0.07	-0.07	0.01	-0.07	-0.07	0.00
12	13	0.04	-0.03	-0.02	0.01	-0.05	-0.03	0.02	-0.05	-0.01
13	13	-0.08	0.02	-0.10	-0.07	-0.07	-0.01	-0.07	-0.07	0.00
14	13	0.04	-0.03	0.02	0.01	-0.05	0.03	0.02	-0.05	0.01
15	4	0.00	0.00	0.00	-0.19	-0.01	0.00	0.00	0.00	0.00

	37	38	39
	AG	BU	BU
Frequencies --	393.1717	396.2940	492.3957
Red. masses --	13.7448	11.5901	9.4870
Frc consts --	1.2519	1.0724	1.3552
IR Inten --	0.0000	48.8838	32.3486

Atom	AN	X	Y	Z	X	Y	Z	X	Y	Z
1	13	0.22	0.02	0.04	0.18	0.00	0.04	0.04	0.04	-0.03
2	13	-0.18	0.00	0.05	-0.15	-0.03	0.04	-0.02	0.04	-0.01
3	13	-0.18	0.00	-0.05	-0.15	-0.03	-0.04	-0.02	0.04	0.01
4	13	0.22	0.02	-0.04	0.18	0.00	-0.04	0.04	0.04	0.03
5	3	0.20	0.01	0.00	0.04	0.44	0.00	0.00	0.02	0.00
6	3	-0.41	-0.34	0.00	-0.29	-0.32	0.00	-0.02	0.00	0.00
7	3	0.02	0.06	0.00	0.00	0.01	0.00	-0.01	-0.01	0.00
8	3	-0.20	-0.01	0.00	0.04	0.44	0.00	0.00	0.02	0.00
9	3	0.41	0.34	0.00	-0.29	-0.32	0.00	-0.02	0.00	0.00
10	3	-0.02	-0.06	0.00	0.00	0.01	0.00	-0.01	-0.01	0.00
11	13	0.18	0.00	-0.05	-0.15	-0.03	0.04	-0.02	0.04	-0.01

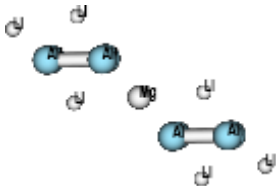
12	13	-0.22	-0.02	-0.04	0.18	0.00	0.04	0.04	0.04	-0.03
13	13	0.18	0.00	0.05	-0.15	-0.03	-0.04	-0.02	0.04	0.01
14	13	-0.22	-0.02	0.04	0.18	0.00	-0.04	0.04	0.04	0.03
15	4	0.00	0.00	0.00	0.03	0.12	0.00	-0.15	-0.97	0.00



没有算完的 -34.6733788

scf done: -1999.632983

Al	.491042	-1.412501	1.039581
Al	2.976189	-.114752	.874085
Al	.157553	-2.586615	-1.301111
Al	1.481498	-.131411	-1.327273
Al	-2.007820	2.057184	.061163
Al	.455289	1.198653	.956937
Al	.202026	2.359959	-1.415590
Al	-1.938956	-2.114090	.125182
Li	-.465726	4.179195	.283102
Li	1.826102	-.132938	3.109900
Li	2.677546	-2.546143	-.358153
Li	-1.691465	-.048232	2.220092
Li	2.690549	2.267037	-.426562
Li	-1.087414	-.061199	-1.451945
Be	-3.005093	-.077919	.249265



Charge = 0 Multiplicity = 1

Li,0,6.9745854333,-0.8638458446,0.
Li,0,4.8017458034,1.4664000016,0.
Al,0,2.5063217755,0.5327841851,-1.2751261378
Al,0,4.6539247261,-1.0640496706,-1.2718460155
Al,0,2.5063217755,0.5327841851,1.2751261378
Al,0,4.6539247261,-1.0640496706,1.2718460155
Li,0,2.402192442,-2.0765979204,0.
Mg,0,0.,0.,0.
Li,0,-2.402192442,2.0765979204,0.
Li,0,-4.8017458034,-1.4664000016,0.
Li,0,-6.9745854333,0.8638458446,0.
Al,0,-2.5063217755,-0.5327841851,-1.2751261378
Al,0,-4.6539247261,1.0640496706,-1.2718460155
Al,0,-2.5063217755,-0.5327841851,1.2751261378
Al,0,-4.6539247261,1.0640496706,1.2718460155

State=1-AG\HF=-2184.9336535

		1			2			3		
		AU			BU			AU		
Frequencies --		-11.2543			14.1584			21.3607		
Red. masses --		18.6693			13.6115			15.4873		
Frc consts --		0.0014			0.0016			0.0042		
IR Inten --		0.0079			3.4344			2.8628		
Atom	AN	X	Y	Z	X	Y	Z	X	Y	Z
1	3	0.00	0.00	0.10	0.40	-0.20	0.00	0.00	0.00	0.44
2	3	0.00	0.00	-0.31	0.00	-0.27	0.00	0.00	0.00	0.17
3	13	0.19	-0.14	-0.14	-0.16	0.00	0.00	-0.11	-0.09	-0.08
4	13	0.18	-0.13	0.13	0.17	0.00	0.00	-0.14	-0.11	0.12
5	13	-0.19	0.14	-0.14	-0.16	0.00	0.00	0.11	0.09	-0.08
6	13	-0.18	0.13	0.13	0.17	0.00	0.00	0.14	0.11	0.12
7	3	0.00	0.00	0.32	0.03	0.23	0.00	0.00	0.00	-0.24
8	12	0.00	0.00	-0.03	-0.30	0.17	0.00	0.00	0.00	-0.39
9	3	0.00	0.00	0.32	0.03	0.23	0.00	0.00	0.00	-0.24
10	3	0.00	0.00	-0.31	0.00	-0.27	0.00	0.00	0.00	0.17
11	3	0.00	0.00	0.10	0.40	-0.20	0.00	0.00	0.00	0.44
12	13	-0.19	0.14	-0.14	-0.16	0.00	0.00	0.11	0.09	-0.08
13	13	-0.18	0.13	0.13	0.17	0.00	0.00	0.14	0.11	0.12

14	13	0.19	-0.14	-0.14	-0.16	0.00	0.00	-0.11	-0.09	-0.08
15	13	0.18	-0.13	0.13	0.17	0.00	0.00	-0.14	-0.11	0.12

	4	5	6
	BG	AG	AG
Frequencies --	61.3123	62.5935	84.3918
Red. masses --	12.1427	13.9829	12.8960
Frc consts --	0.0269	0.0323	0.0541
IR Inten --	0.0000	0.0000	0.0000

Atom	AN	X	Y	Z	X	Y	Z	X	Y	Z
1	3	0.00	0.00	-0.37	0.49	-0.14	0.00	-0.25	0.39	0.00
2	3	0.00	0.00	0.07	-0.04	-0.13	0.00	0.15	0.28	0.00
3	13	-0.02	0.05	0.16	-0.15	0.17	0.00	0.17	0.10	-0.01
4	13	0.15	0.11	0.00	0.09	0.17	0.00	0.13	0.13	0.01
5	13	0.02	-0.05	0.16	-0.15	0.17	0.00	0.17	0.10	0.01
6	13	-0.15	-0.11	0.00	0.09	0.17	0.00	0.13	0.13	-0.01
7	3	0.00	0.00	0.48	-0.01	0.22	0.00	0.15	0.10	0.00
8	12	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
9	3	0.00	0.00	-0.48	0.01	-0.22	0.00	-0.15	-0.10	0.00
10	3	0.00	0.00	-0.07	0.04	0.13	0.00	-0.15	-0.28	0.00
11	3	0.00	0.00	0.37	-0.49	0.14	0.00	0.25	-0.39	0.00
12	13	-0.02	0.05	-0.16	0.15	-0.17	0.00	-0.17	-0.10	-0.01
13	13	0.15	0.11	0.00	-0.09	-0.17	0.00	-0.13	-0.13	0.01
14	13	0.02	-0.05	-0.16	0.15	-0.17	0.00	-0.17	-0.10	0.01
15	13	-0.15	-0.11	0.00	-0.09	-0.17	0.00	-0.13	-0.13	-0.01

	7	8	9
	AU	BG	BU
Frequencies --	88.1514	88.6796	91.4444
Red. masses --	10.3439	13.2304	10.2606
Frc consts --	0.0474	0.0613	0.0506
IR Inten --	0.2120	0.0000	11.9044

Atom	AN	X	Y	Z	X	Y	Z	X	Y	Z
1	3	0.00	0.00	-0.22	0.00	0.00	0.02	0.51	-0.34	0.00
2	3	0.00	0.00	0.28	0.00	0.00	-0.43	-0.06	-0.11	0.00
3	13	-0.13	-0.02	-0.05	0.15	0.02	0.23	-0.03	0.05	0.00
4	13	0.07	0.07	0.02	0.00	-0.05	-0.03	-0.08	0.07	-0.01
5	13	0.13	0.02	-0.05	-0.15	-0.02	0.23	-0.03	0.05	0.00
6	13	-0.07	-0.07	0.02	0.00	0.05	-0.03	-0.08	0.07	0.01
7	3	0.00	0.00	0.54	0.00	0.00	-0.40	-0.04	-0.12	0.00
8	12	0.00	0.00	-0.22	0.00	0.00	0.00	0.27	-0.21	0.00
9	3	0.00	0.00	0.54	0.00	0.00	0.40	-0.04	-0.12	0.00
10	3	0.00	0.00	0.28	0.00	0.00	0.43	-0.06	-0.11	0.00
11	3	0.00	0.00	-0.22	0.00	0.00	-0.02	0.51	-0.34	0.00
12	13	0.13	0.02	-0.05	0.15	0.02	-0.23	-0.03	0.05	0.00
13	13	-0.07	-0.07	0.02	0.00	-0.05	0.03	-0.08	0.07	0.01

14	13	-0.13	-0.02	-0.05	-0.15	-0.02	-0.23	-0.03	0.05	0.00
15	13	0.07	0.07	0.02	0.00	0.05	0.03	-0.08	0.07	-0.01

		10			11			12		
		AU			AU			AG		
Frequencies --		113.0025			120.4487			123.1434		
Red. masses --		15.1552			14.0776			12.3064		
Frc consts --		0.1140			0.1203			0.1100		
IR Inten --		1.6804			0.4230			0.0000		
Atom	AN	X	Y	Z	X	Y	Z	X	Y	Z
1	3	0.00	0.00	0.17	0.00	0.00	0.06	-0.47	0.29	0.00
2	3	0.00	0.00	0.48	0.00	0.00	0.56	-0.01	-0.15	0.00
3	13	0.04	0.01	-0.21	0.11	-0.17	0.11	-0.20	0.00	0.00
4	13	-0.10	0.04	0.01	0.04	-0.06	-0.17	0.14	-0.08	0.00
5	13	-0.04	-0.01	-0.21	-0.11	0.17	0.11	-0.20	0.00	0.00
6	13	0.10	-0.04	0.01	-0.04	0.06	-0.17	0.14	-0.08	0.00
7	3	0.00	0.00	0.13	0.00	0.00	-0.02	-0.05	0.18	0.00
8	12	0.00	0.00	0.45	0.00	0.00	-0.08	0.00	0.00	0.00
9	3	0.00	0.00	0.13	0.00	0.00	-0.02	0.05	-0.18	0.00
10	3	0.00	0.00	0.48	0.00	0.00	0.56	0.01	0.15	0.00
11	3	0.00	0.00	0.17	0.00	0.00	0.06	0.47	-0.29	0.00
12	13	-0.04	-0.01	-0.21	-0.11	0.17	0.11	0.20	0.00	0.00
13	13	0.10	-0.04	0.01	-0.04	0.06	-0.17	-0.14	0.08	0.00
14	13	0.04	0.01	-0.21	0.11	-0.17	0.11	0.20	0.00	0.00
15	13	-0.10	0.04	0.01	0.04	-0.06	-0.17	-0.14	0.08	0.00

		13			14			15		
		BG			BU			BG		
Frequencies --		125.1314			138.8994			140.7323		
Red. masses --		12.1119			16.9029			9.7345		
Frc consts --		0.1117			0.1921			0.1136		
IR Inten --		0.0000			6.6437			0.0000		
Atom	AN	X	Y	Z	X	Y	Z	X	Y	Z
1	3	0.00	0.00	-0.11	0.35	-0.30	0.00	0.00	0.00	-0.26
2	3	0.00	0.00	-0.60	-0.03	0.12	0.00	0.00	0.00	0.26
3	13	-0.12	0.14	-0.06	0.19	-0.07	0.01	-0.04	0.01	-0.02
4	13	-0.02	0.05	0.15	-0.16	0.01	0.00	0.16	-0.02	0.08
5	13	0.12	-0.14	-0.06	0.19	-0.07	-0.01	0.04	-0.01	-0.02
6	13	0.02	-0.05	0.15	-0.16	0.01	0.00	-0.16	0.02	0.08
7	3	0.00	0.00	-0.03	0.01	-0.02	0.00	0.00	0.00	-0.54
8	12	0.00	0.00	0.00	-0.35	0.38	0.00	0.00	0.00	0.00
9	3	0.00	0.00	0.03	0.01	-0.02	0.00	0.00	0.00	0.54
10	3	0.00	0.00	0.60	-0.03	0.12	0.00	0.00	0.00	-0.26
11	3	0.00	0.00	0.11	0.35	-0.30	0.00	0.00	0.00	0.26
12	13	-0.12	0.14	0.06	0.19	-0.07	-0.01	-0.04	0.01	0.02
13	13	-0.02	0.05	-0.15	-0.16	0.01	0.00	0.16	-0.02	-0.08

14	13	0.12	-0.14	0.06	0.19	-0.07	0.01	0.04	-0.01	0.02
15	13	0.02	-0.05	-0.15	-0.16	0.01	0.00	-0.16	0.02	-0.08

	16	17	18
	AU	BG	AU
Frequencies --	140.9736	155.6480	165.5538
Red. masses --	9.5907	19.5666	19.5200
Frc consts --	0.1123	0.2793	0.3152
IR Inten --	2.1055	0.0000	2.0841

Atom	AN	X	Y	Z	X	Y	Z	X	Y	Z
1	3	0.00	0.00	0.29	0.00	0.00	-0.34	0.00	0.00	0.41
2	3	0.00	0.00	-0.30	0.00	0.00	0.26	0.00	0.00	-0.10
3	13	0.02	-0.01	0.04	0.26	0.05	-0.06	-0.24	0.01	0.00
4	13	-0.14	-0.01	-0.10	-0.15	0.20	0.14	0.17	-0.19	-0.11
5	13	-0.02	0.01	0.04	-0.26	-0.05	-0.06	0.24	-0.01	0.00
6	13	0.14	0.01	-0.10	0.15	-0.20	0.14	-0.17	0.19	-0.11
7	3	0.00	0.00	0.51	0.00	0.00	-0.06	0.00	0.00	0.01
8	12	0.00	0.00	-0.02	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.32
9	3	0.00	0.00	0.51	0.00	0.00	0.06	0.00	0.00	0.01
10	3	0.00	0.00	-0.30	0.00	0.00	-0.26	0.00	0.00	-0.10
11	3	0.00	0.00	0.29	0.00	0.00	0.34	0.00	0.00	0.41
12	13	-0.02	0.01	0.04	0.26	0.05	0.06	0.24	-0.01	0.00
13	13	0.14	0.01	-0.10	-0.15	0.20	-0.14	-0.17	0.19	-0.11
14	13	0.02	-0.01	0.04	-0.26	-0.05	0.06	-0.24	0.01	0.00
15	13	-0.14	-0.01	-0.10	0.15	-0.20	-0.14	0.17	-0.19	-0.11

	19	20	21
	BG	AU	BU
Frequencies --	210.0346	217.0736	219.5914
Red. masses --	13.3181	14.1996	12.4101
Frc consts --	0.3462	0.3942	0.3526
IR Inten --	0.0000	8.3631	41.8380

Atom	AN	X	Y	Z	X	Y	Z	X	Y	Z
1	3	0.00	0.00	-0.56	0.00	0.00	0.52	-0.12	-0.17	0.00
2	3	0.00	0.00	-0.18	0.00	0.00	0.21	0.08	-0.29	0.00
3	13	-0.08	-0.24	0.03	0.10	0.23	-0.01	0.03	0.12	0.01
4	13	-0.10	-0.02	0.03	0.11	0.04	-0.03	-0.05	-0.16	-0.01
5	13	0.08	0.24	0.03	-0.10	-0.23	-0.01	0.03	0.12	-0.01
6	13	0.10	0.02	0.03	-0.11	-0.04	-0.03	-0.05	-0.16	0.01
7	3	0.00	0.00	-0.01	0.00	0.00	0.02	-0.23	0.41	0.00
8	12	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	-0.25	0.25	0.24	0.00
9	3	0.00	0.00	0.01	0.00	0.00	0.02	-0.23	0.41	0.00
10	3	0.00	0.00	0.18	0.00	0.00	0.21	0.08	-0.29	0.00
11	3	0.00	0.00	0.56	0.00	0.00	0.52	-0.12	-0.17	0.00
12	13	-0.08	-0.24	-0.03	-0.10	-0.23	-0.01	0.03	0.12	-0.01
13	13	-0.10	-0.02	-0.03	-0.11	-0.04	-0.03	-0.05	-0.16	0.01

14	13	0.08	0.24	-0.03	0.10	0.23	-0.01	0.03	0.12	0.01
15	13	0.10	0.02	-0.03	0.11	0.04	-0.03	-0.05	-0.16	-0.01

	22	23	24
	AG	BU	AG
Frequencies --	223.9148	227.0704	237.3454
Red. masses --	7.5997	7.8566	8.0462
Frc consts --	0.2245	0.2387	0.2671
IR Inten --	0.0000	10.6285	0.0000

Atom	AN	X	Y	Z	X	Y	Z	X	Y	Z
1	3	-0.08	0.10	0.00	0.11	-0.11	0.00	-0.09	0.08	0.00
2	3	0.04	-0.38	0.00	0.01	0.59	0.00	-0.06	-0.55	0.00
3	13	0.00	0.05	0.04	-0.04	-0.03	-0.04	0.08	-0.02	0.01
4	13	0.01	0.04	-0.04	0.02	-0.06	0.04	-0.06	0.04	-0.01
5	13	0.00	0.05	-0.04	-0.04	-0.03	0.04	0.08	-0.02	-0.01
6	13	0.01	0.04	0.04	0.02	-0.06	-0.04	-0.06	0.04	0.01
7	3	0.09	-0.57	0.00	-0.08	0.32	0.00	0.01	0.40	0.00
8	12	0.00	0.00	0.00	0.06	-0.06	0.00	0.00	0.00	0.00
9	3	-0.09	0.57	0.00	-0.08	0.32	0.00	-0.01	-0.40	0.00
10	3	-0.04	0.38	0.00	0.01	0.59	0.00	0.06	0.55	0.00
11	3	0.08	-0.10	0.00	0.11	-0.11	0.00	0.09	-0.08	0.00
12	13	0.00	-0.05	0.04	-0.04	-0.03	0.04	-0.08	0.02	0.01
13	13	-0.01	-0.04	-0.04	0.02	-0.06	-0.04	0.06	-0.04	-0.01
14	13	0.00	-0.05	-0.04	-0.04	-0.03	-0.04	-0.08	0.02	-0.01
15	13	-0.01	-0.04	0.04	0.02	-0.06	0.04	0.06	-0.04	0.01

	25	26	27
	BU	AG	BG
Frequencies --	240.3202	247.5351	257.3988
Red. masses --	9.7640	15.6694	16.2212
Frc consts --	0.3322	0.5657	0.6332
IR Inten --	5.5820	0.0000	0.0000

Atom	AN	X	Y	Z	X	Y	Z	X	Y	Z
1	3	0.00	0.15	0.00	0.15	0.32	0.00	0.00	0.00	0.45
2	3	-0.18	-0.25	0.00	-0.30	0.13	0.00	0.00	0.00	-0.19
3	13	0.05	-0.13	0.00	-0.06	-0.26	0.07	-0.03	-0.17	0.00
4	13	-0.04	0.10	0.01	0.02	0.18	-0.03	0.09	0.28	-0.01
5	13	0.05	-0.13	0.00	-0.06	-0.26	-0.07	0.03	0.17	0.00
6	13	-0.04	0.10	-0.01	0.02	0.18	0.03	-0.09	-0.28	-0.01
7	3	0.05	0.55	0.00	0.22	-0.05	0.00	0.00	0.00	-0.19
8	12	0.05	-0.12	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
9	3	0.05	0.55	0.00	-0.22	0.05	0.00	0.00	0.00	0.19
10	3	-0.18	-0.25	0.00	0.30	-0.13	0.00	0.00	0.00	0.19
11	3	0.00	0.15	0.00	-0.15	-0.32	0.00	0.00	0.00	-0.45
12	13	0.05	-0.13	0.00	0.06	0.26	0.07	-0.03	-0.17	0.00
13	13	-0.04	0.10	-0.01	-0.02	-0.18	-0.03	0.09	0.28	0.01

14	13	0.05	-0.13	0.00	0.06	0.26	-0.07	0.03	0.17	0.00
15	13	-0.04	0.10	0.01	-0.02	-0.18	0.03	-0.09	-0.28	0.01

	28	29	30
	AU	BU	AG
Frequencies --	259.6919	275.5795	291.4000
Red. masses --	16.4721	18.6984	15.8439
Frc consts --	0.6545	0.8367	0.7927
IR Inten --	8.1329	190.7054	0.0000

Atom	AN	X	Y	Z	X	Y	Z	X	Y	Z
1	3	0.00	0.00	-0.44	-0.19	-0.29	0.00	-0.18	-0.21	0.00
2	3	0.00	0.00	0.19	0.16	-0.20	0.00	-0.10	-0.10	0.00
3	13	0.04	0.17	0.01	0.07	0.11	-0.24	-0.03	-0.02	-0.15
4	13	-0.08	-0.28	0.01	-0.01	0.01	0.20	0.00	0.06	0.29
5	13	-0.04	-0.17	0.01	0.07	0.11	0.24	-0.03	-0.02	0.15
6	13	0.08	0.28	0.01	-0.01	0.01	-0.20	0.00	0.06	-0.29
7	3	0.00	0.00	0.18	0.06	0.08	0.00	0.42	-0.10	0.00
8	12	0.00	0.00	-0.05	-0.26	-0.30	0.00	0.00	0.00	0.00
9	3	0.00	0.00	0.18	0.06	0.08	0.00	-0.42	0.10	0.00
10	3	0.00	0.00	0.19	0.16	-0.20	0.00	0.10	0.10	0.00
11	3	0.00	0.00	-0.44	-0.19	-0.29	0.00	0.18	0.21	0.00
12	13	-0.04	-0.17	0.01	0.07	0.11	0.24	0.03	0.02	-0.15
13	13	0.08	0.28	0.01	-0.01	0.01	-0.20	0.00	-0.06	0.29
14	13	0.04	0.17	0.01	0.07	0.11	-0.24	0.03	0.02	0.15
15	13	-0.08	-0.28	0.01	-0.01	0.01	0.20	0.00	-0.06	-0.29

	31	32	33
	BU	AG	BU
Frequencies --	302.0631	318.6074	326.4416
Red. masses --	12.4743	14.9423	8.6101
Frc consts --	0.6706	0.8937	0.5406
IR Inten --	3.3151	0.0000	98.5333

Atom	AN	X	Y	Z	X	Y	Z	X	Y	Z
1	3	0.12	0.17	0.00	-0.10	-0.20	0.00	0.04	0.08	0.00
2	3	0.27	-0.02	0.00	-0.21	0.10	0.00	0.44	-0.01	0.00
3	13	0.05	0.02	-0.08	0.01	0.08	0.29	-0.06	-0.01	-0.06
4	13	0.00	0.00	-0.21	-0.01	-0.06	0.07	-0.08	-0.02	-0.07
5	13	0.05	0.02	0.08	0.01	0.08	-0.29	-0.06	-0.01	0.06
6	13	0.00	0.00	0.21	-0.01	-0.06	-0.07	-0.08	-0.02	0.07
7	3	-0.49	0.07	0.00	0.43	0.11	0.00	0.50	0.09	0.00
8	12	-0.18	-0.21	0.00	0.00	0.00	0.00	0.04	0.04	0.00
9	3	-0.49	0.07	0.00	-0.43	-0.11	0.00	0.50	0.09	0.00
10	3	0.27	-0.02	0.00	0.21	-0.10	0.00	0.44	-0.01	0.00
11	3	0.12	0.17	0.00	0.10	0.20	0.00	0.04	0.08	0.00
12	13	0.05	0.02	0.08	-0.01	-0.08	0.29	-0.06	-0.01	0.06
13	13	0.00	0.00	0.21	0.01	0.06	0.07	-0.08	-0.02	0.07

14	13	0.05	0.02	-0.08	-0.01	-0.08	-0.29	-0.06	-0.01	-0.06
15	13	0.00	0.00	-0.21	0.01	0.06	-0.07	-0.08	-0.02	-0.07

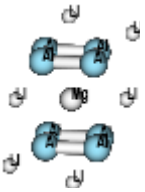
	34	35	36
	AG	BU	BU
Frequencies --	330.0239	331.9525	341.1179
Red. masses --	8.1775	18.4285	9.9931
Frc consts --	0.5248	1.1964	0.6851
IR Inten --	0.0000	13.9749	46.8906

Atom	AN	X	Y	Z	X	Y	Z	X	Y	Z
1	3	-0.03	-0.04	0.00	0.07	0.16	0.00	0.07	0.13	0.00
2	3	-0.50	-0.02	0.00	-0.33	-0.07	0.00	0.51	-0.06	0.00
3	13	0.06	0.01	0.03	-0.03	-0.08	-0.31	-0.03	-0.09	0.03
4	13	0.07	0.01	0.07	0.03	0.02	-0.03	-0.01	0.06	0.14
5	13	0.06	0.01	-0.03	-0.03	-0.08	0.31	-0.03	-0.09	-0.03
6	13	0.07	0.01	-0.07	0.03	0.02	0.03	-0.01	0.06	-0.14
7	3	-0.45	-0.09	0.00	-0.12	-0.21	0.00	-0.36	-0.08	0.00
8	12	0.00	0.00	0.00	0.26	0.34	0.00	0.09	0.11	0.00
9	3	0.45	0.09	0.00	-0.12	-0.21	0.00	-0.36	-0.08	0.00
10	3	0.50	0.02	0.00	-0.33	-0.07	0.00	0.51	-0.06	0.00
11	3	0.03	0.04	0.00	0.07	0.16	0.00	0.07	0.13	0.00
12	13	-0.06	-0.01	0.03	-0.03	-0.08	0.31	-0.03	-0.09	-0.03
13	13	-0.07	-0.01	0.07	0.03	0.02	0.03	-0.01	0.06	-0.14
14	13	-0.06	-0.01	-0.03	-0.03	-0.08	-0.31	-0.03	-0.09	0.03
15	13	-0.07	-0.01	-0.07	0.03	0.02	-0.03	-0.01	0.06	0.14

	37	38	39
	AG	BU	AG
Frequencies --	342.1367	375.6223	375.7894
Red. masses --	10.4181	9.0866	8.8170
Frc consts --	0.7185	0.7554	0.7336
IR Inten --	0.0000	117.2542	0.0000

Atom	AN	X	Y	Z	X	Y	Z	X	Y	Z
1	3	0.04	0.07	0.00	0.38	0.53	0.00	0.38	0.54	0.00
2	3	0.52	-0.04	0.00	-0.12	-0.03	0.00	-0.10	-0.03	0.00
3	13	-0.02	-0.05	0.12	0.01	0.06	0.00	0.00	0.05	-0.01
4	13	-0.01	0.05	0.15	-0.04	-0.11	0.08	-0.04	-0.11	0.08
5	13	-0.02	-0.05	-0.12	0.01	0.06	0.00	0.00	0.05	0.01
6	13	-0.01	0.05	-0.15	-0.04	-0.11	-0.08	-0.04	-0.11	-0.08
7	3	-0.38	-0.01	0.00	0.05	-0.01	0.00	0.08	-0.02	0.00
8	12	0.00	0.00	0.00	-0.06	-0.06	0.00	0.00	0.00	0.00
9	3	0.38	0.01	0.00	0.05	-0.01	0.00	-0.08	0.02	0.00
10	3	-0.52	0.04	0.00	-0.12	-0.03	0.00	0.10	0.03	0.00
11	3	-0.04	-0.07	0.00	0.38	0.53	0.00	-0.38	-0.54	0.00
12	13	0.02	0.05	0.12	0.01	0.06	0.00	0.00	-0.05	-0.01
13	13	0.01	-0.05	0.15	-0.04	-0.11	-0.08	0.04	0.11	0.08

14	13	0.02	0.05	-0.12	0.01	0.06	0.00	0.00	-0.05	0.01
15	13	0.01	-0.05	-0.15	-0.04	-0.11	0.08	0.04	0.11	-0.08



. Charge = 0 Multiplicity = 1

Al,0,-2.1948844836,-1.1162329466,1.4378227802
Al,0,-0.1006788078,-2.5804514943,1.3280325228
Al,0,-0.1006788078,-2.5804514943,-1.3280325228
Al,0,-2.1948844836,-1.1162329466,-1.4378227802
Li,0,2.3162126603,-1.4967608583,0.
Li,0,-4.4437737589,-1.1294277455,0.
Li,0,-2.2871318684,-3.5947192343,0.
Li,0,-2.3162126603,1.4967608583,0.
Li,0,4.4437737589,1.1294277455,0.
Li,0,2.2871318684,3.5947192343,0.
Al,0,0.1006788078,2.5804514943,-1.3280325228
Al,0,2.1948844836,1.1162329466,-1.4378227802
Al,0,0.1006788078,2.5804514943,1.3280325228
Al,0,2.1948844836,1.1162329466,1.4378227802
Mg,0,0.,0.,0.

State=1-AG\HF=-2184.9805223

		1			2			3		
		AU			AU			BU		
Frequencies --		-59.4897			43.0407			49.8302		
Red. masses --		17.3306			17.8831			15.7443		
Frc consts --		0.0361			0.0195			0.0230		
IR Inten --		3.6906			1.9830			6.2556		
Atom	AN	X	Y	Z	X	Y	Z	X	Y	Z
1	13	0.00	0.21	0.01	-0.18	-0.03	-0.17	0.00	-0.19	-0.08
2	13	0.01	0.21	0.04	-0.15	0.06	0.21	0.02	0.23	0.05
3	13	-0.01	-0.21	0.04	0.15	-0.06	0.21	0.02	0.23	-0.05
4	13	0.00	-0.21	0.01	0.18	0.03	-0.17	0.00	-0.19	0.08
5	3	0.00	0.00	-0.24	0.00	0.00	0.08	-0.12	0.01	0.00
6	3	0.00	0.00	0.18	0.00	0.00	-0.46	0.08	-0.36	0.00
7	3	0.00	0.00	0.37	0.00	0.00	0.08	0.36	0.01	0.00
8	3	0.00	0.00	-0.24	0.00	0.00	0.08	-0.12	0.01	0.00

9	3	0.00	0.00	0.18	0.00	0.00	-0.46	0.08	-0.36	0.00
10	3	0.00	0.00	0.37	0.00	0.00	0.08	0.36	0.01	0.00
11	13	0.01	0.21	0.04	-0.15	0.06	0.21	0.02	0.23	0.05
12	13	0.00	0.21	0.01	-0.18	-0.03	-0.17	0.00	-0.19	-0.08
13	13	-0.01	-0.21	0.04	0.15	-0.06	0.21	0.02	0.23	-0.05
14	13	0.00	-0.21	0.01	0.18	0.03	-0.17	0.00	-0.19	0.08
15	12	0.00	0.00	-0.43	0.00	0.00	0.01	-0.24	0.04	0.00

		4			5			6		
		BG			AU			AG		
Frequencies --		84.5704			110.7869			112.8293		
Red. masses --		14.4712			8.7333			20.6431		
Frc consts --		0.0610			0.0632			0.1548		
IR Inten --		0.0000			0.8063			0.0000		
Atom	AN	X	Y	Z	X	Y	Z	X	Y	Z
1	13	0.00	0.14	0.11	0.03	0.04	-0.03	-0.04	0.30	0.08
2	13	-0.05	-0.24	-0.01	-0.02	-0.04	0.01	-0.03	0.27	0.02
3	13	0.05	0.24	-0.01	0.02	0.04	0.01	-0.03	0.27	-0.02
4	13	0.00	-0.14	0.11	-0.03	-0.04	-0.03	-0.04	0.30	-0.08
5	3	0.00	0.00	0.42	0.00	0.00	0.65	0.08	0.05	0.00
6	3	0.00	0.00	0.20	0.00	0.00	0.09	0.25	-0.07	0.00
7	3	0.00	0.00	-0.31	0.00	0.00	-0.14	0.06	0.28	0.00
8	3	0.00	0.00	-0.42	0.00	0.00	0.65	-0.08	-0.05	0.00
9	3	0.00	0.00	-0.20	0.00	0.00	0.09	-0.25	0.07	0.00
10	3	0.00	0.00	0.31	0.00	0.00	-0.14	-0.06	-0.28	0.00
11	13	0.05	0.24	0.01	-0.02	-0.04	0.01	0.03	-0.27	-0.02
12	13	0.00	-0.14	-0.11	0.03	0.04	-0.03	0.04	-0.30	-0.08
13	13	-0.05	-0.24	0.01	0.02	0.04	0.01	0.03	-0.27	0.02
14	13	0.00	0.14	-0.11	-0.03	-0.04	-0.03	0.04	-0.30	0.08
15	12	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	-0.27	0.00	0.00	0.00

		7			8			9		
		AG			BU			BG		
Frequencies --		117.0310			120.6846			125.4680		
Red. masses --		14.0686			8.4510			13.9009		
Frc consts --		0.1135			0.0725			0.1289		
IR Inten --		0.0000			7.2095			0.0000		
Atom	AN	X	Y	Z	X	Y	Z	X	Y	Z
1	13	0.17	0.13	0.09	0.01	-0.10	-0.08	0.01	-0.19	0.13
2	13	0.15	-0.11	-0.04	0.03	0.02	0.00	-0.02	-0.05	0.17
3	13	0.15	-0.11	0.04	0.03	0.02	0.00	0.02	0.05	0.17
4	13	0.17	0.13	-0.09	0.01	-0.10	0.08	-0.01	0.19	0.13
5	3	-0.03	-0.08	0.00	0.04	0.15	0.00	0.00	0.00	-0.28
6	3	0.02	0.43	0.00	-0.41	0.52	0.00	0.00	0.00	-0.10
7	3	-0.35	0.05	0.00	0.00	-0.04	0.00	0.00	0.00	-0.49
8	3	0.03	0.08	0.00	0.04	0.15	0.00	0.00	0.00	0.28

9	3	-0.02	-0.43	0.00	-0.41	0.52	0.00	0.00	0.00	0.10
10	3	0.35	-0.05	0.00	0.00	-0.04	0.00	0.00	0.00	0.49
11	13	-0.15	0.11	0.04	0.03	0.02	0.00	0.02	0.05	-0.17
12	13	-0.17	-0.13	-0.09	0.01	-0.10	-0.08	-0.01	0.19	-0.13
13	13	-0.15	0.11	-0.04	0.03	0.02	0.00	-0.02	-0.05	-0.17
14	13	-0.17	-0.13	0.09	0.01	-0.10	0.08	0.01	-0.19	-0.13
15	12	0.00	0.00	0.00	0.02	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00

	10	11	12
	AU	AG	BU
Frequencies --	130.1562	134.7222	140.0198
Red. masses --	14.2121	9.2768	20.5608
Frc consts --	0.1419	0.0992	0.2375
IR Inten --	0.1386	0.0000	6.4243

Atom	AN	X	Y	Z	X	Y	Z	X	Y	Z
1	13	0.04	-0.19	-0.02	-0.01	0.07	0.02	0.10	-0.09	0.34
2	13	0.09	0.20	-0.08	0.00	-0.15	-0.01	0.01	0.06	-0.04
3	13	-0.09	-0.20	-0.08	0.00	-0.15	0.01	0.01	0.06	0.04
4	13	-0.04	0.19	-0.02	-0.01	0.07	-0.02	0.10	-0.09	-0.34
5	3	0.00	0.00	0.35	0.04	-0.04	0.00	-0.12	-0.02	0.00
6	3	0.00	0.00	-0.09	0.37	-0.54	0.00	0.05	0.32	0.00
7	3	0.00	0.00	0.43	-0.09	-0.04	0.00	-0.17	0.05	0.00
8	3	0.00	0.00	0.35	-0.04	0.04	0.00	-0.12	-0.02	0.00
9	3	0.00	0.00	-0.09	-0.37	0.54	0.00	0.05	0.32	0.00
10	3	0.00	0.00	0.43	0.09	0.04	0.00	-0.17	0.05	0.00
11	13	0.09	0.20	-0.08	0.00	0.15	0.01	0.01	0.06	-0.04
12	13	0.04	-0.19	-0.02	0.01	-0.07	-0.02	0.10	-0.09	0.34
13	13	-0.09	-0.20	-0.08	0.00	0.15	-0.01	0.01	0.06	0.04
14	13	-0.04	0.19	-0.02	0.01	-0.07	0.02	0.10	-0.09	-0.34
15	12	0.00	0.00	0.06	0.00	0.00	0.00	-0.35	-0.10	0.00

	13	14	15
	BG	AU	AU
Frequencies --	150.5873	158.3950	165.4437
Red. masses --	15.9052	17.8441	11.9232
Frc consts --	0.2125	0.2638	0.1923
IR Inten --	0.0000	0.4697	0.9652

Atom	AN	X	Y	Z	X	Y	Z	X	Y	Z
1	13	-0.07	-0.11	0.21	0.11	0.05	-0.25	-0.09	0.14	0.02
2	13	-0.08	0.12	-0.16	0.16	-0.10	0.13	-0.02	-0.11	-0.12
3	13	0.08	-0.12	-0.16	-0.16	0.10	0.13	0.02	0.11	-0.12
4	13	0.07	0.11	0.21	-0.11	-0.05	-0.25	0.09	-0.14	0.02
5	3	0.00	0.00	0.47	0.00	0.00	-0.02	0.00	0.00	0.18
6	3	0.00	0.00	-0.23	0.00	0.00	0.37	0.00	0.00	-0.21
7	3	0.00	0.00	0.04	0.00	0.00	0.30	0.00	0.00	0.55
8	3	0.00	0.00	-0.47	0.00	0.00	-0.02	0.00	0.00	0.18

9	3	0.00	0.00	0.23	0.00	0.00	0.37	0.00	0.00	-0.21
10	3	0.00	0.00	-0.04	0.00	0.00	0.30	0.00	0.00	0.55
11	13	0.08	-0.12	0.16	0.16	-0.10	0.13	-0.02	-0.11	-0.12
12	13	0.07	0.11	-0.21	0.11	0.05	-0.25	-0.09	0.14	0.02
13	13	-0.08	0.12	0.16	-0.16	0.10	0.13	0.02	0.11	-0.12
14	13	-0.07	-0.11	-0.21	-0.11	-0.05	-0.25	0.09	-0.14	0.02
15	12	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.17	0.00	0.00	0.17

	16	17	18
	BG	AG	BU
Frequencies --	170.1155	176.5020	189.7512
Red. masses --	9.6243	17.2170	10.9442
Frc consts --	0.1641	0.3160	0.2322
IR Inten --	0.0000	0.0000	16.9876

Atom	AN	X	Y	Z	X	Y	Z	X	Y	Z
1	13	0.07	-0.09	-0.08	0.04	0.13	-0.30	-0.03	0.01	0.09
2	13	0.05	0.07	0.05	0.08	-0.03	0.12	-0.11	0.02	0.12
3	13	-0.05	-0.07	0.05	0.08	-0.03	-0.12	-0.11	0.02	-0.12
4	13	-0.07	0.09	-0.08	0.04	0.13	0.30	-0.03	0.01	-0.09
5	3	0.00	0.00	0.48	0.03	-0.43	0.00	0.17	-0.24	0.00
6	3	0.00	0.00	0.42	-0.07	0.01	0.00	-0.04	0.17	0.00
7	3	0.00	0.00	-0.16	0.23	0.00	0.00	0.53	-0.07	0.00
8	3	0.00	0.00	-0.48	-0.03	0.43	0.00	0.17	-0.24	0.00
9	3	0.00	0.00	-0.42	0.07	-0.01	0.00	-0.04	0.17	0.00
10	3	0.00	0.00	0.16	-0.23	0.00	0.00	0.53	-0.07	0.00
11	13	-0.05	-0.07	-0.05	-0.08	0.03	-0.12	-0.11	0.02	0.12
12	13	-0.07	0.09	0.08	-0.04	-0.13	0.30	-0.03	0.01	0.09
13	13	0.05	0.07	-0.05	-0.08	0.03	0.12	-0.11	0.02	-0.12
14	13	0.07	-0.09	0.08	-0.04	-0.13	-0.30	-0.03	0.01	-0.09
15	12	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.24	-0.06	0.00

	19	20	21
	BG	BU	AU
Frequencies --	205.5437	210.0734	210.9415
Red. masses --	11.7857	9.0791	11.6924
Frc consts --	0.2934	0.2361	0.3065
IR Inten --	0.0000	1.5575	3.6162

Atom	AN	X	Y	Z	X	Y	Z	X	Y	Z
1	13	0.02	-0.10	0.02	-0.03	0.06	0.01	-0.08	0.02	-0.06
2	13	0.16	-0.14	0.06	0.02	-0.08	-0.09	-0.14	0.09	-0.08
3	13	-0.16	0.14	0.06	0.02	-0.08	0.09	0.14	-0.09	-0.08
4	13	-0.02	0.10	0.02	-0.03	0.06	-0.01	0.08	-0.02	-0.06
5	3	0.00	0.00	0.24	-0.21	0.34	0.00	0.00	0.00	0.10
6	3	0.00	0.00	-0.28	0.02	0.04	0.00	0.00	0.00	0.60
7	3	0.00	0.00	0.49	0.51	-0.16	0.00	0.00	0.00	-0.11
8	3	0.00	0.00	-0.24	-0.21	0.34	0.00	0.00	0.00	0.10

9	3	0.00	0.00	0.28	0.02	0.04	0.00	0.00	0.00	0.60
10	3	0.00	0.00	-0.49	0.51	-0.16	0.00	0.00	0.00	-0.11
11	13	-0.16	0.14	-0.06	0.02	-0.08	-0.09	-0.14	0.09	-0.08
12	13	-0.02	0.10	-0.02	-0.03	0.06	0.01	-0.08	0.02	-0.06
13	13	0.16	-0.14	-0.06	0.02	-0.08	0.09	0.14	-0.09	-0.08
14	13	0.02	-0.10	-0.02	-0.03	0.06	-0.01	0.08	-0.02	-0.06
15	12	0.00	0.00	0.00	-0.17	-0.02	0.00	0.00	0.00	0.26

		22			23			24		
		BU			AG			AG		
Frequencies --		220.1608			223.3569			228.5463		
Red. masses --		11.1790			8.6092			8.4430		
Frc consts --		0.3193			0.2531			0.2598		
IR Inten --		15.6064			0.0000			0.0000		
Atom	AN	X	Y	Z	X	Y	Z	X	Y	Z
1	13	-0.11	-0.04	0.07	-0.01	0.00	-0.13	0.01	-0.09	0.02
2	13	0.05	0.03	0.03	0.03	0.03	-0.02	0.03	0.09	0.01
3	13	0.05	0.03	-0.03	0.03	0.03	0.02	0.03	0.09	-0.01
4	13	-0.11	-0.04	-0.07	-0.01	0.00	0.13	0.01	-0.09	-0.02
5	3	0.16	0.55	0.00	0.00	0.44	0.00	0.05	-0.52	0.00
6	3	-0.02	-0.16	0.00	-0.08	-0.12	0.00	0.03	-0.17	0.00
7	3	-0.09	0.13	0.00	-0.48	0.14	0.00	-0.38	0.15	0.00
8	3	0.16	0.55	0.00	0.00	-0.44	0.00	-0.05	0.52	0.00
9	3	-0.02	-0.16	0.00	0.08	0.12	0.00	-0.03	0.17	0.00
10	3	-0.09	0.13	0.00	0.48	-0.14	0.00	0.38	-0.15	0.00
11	13	0.05	0.03	0.03	-0.03	-0.03	0.02	-0.03	-0.09	-0.01
12	13	-0.11	-0.04	0.07	0.01	0.00	0.13	-0.01	0.09	-0.02
13	13	0.05	0.03	-0.03	-0.03	-0.03	-0.02	-0.03	-0.09	0.01
14	13	-0.11	-0.04	-0.07	0.01	0.00	-0.13	-0.01	0.09	0.02
15	12	0.23	-0.27	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00

		25			26			27		
		BU			AU			BG		
Frequencies --		236.2892			243.9041			255.5368		
Red. masses --		20.4028			13.9571			11.2209		
Frc consts --		0.6712			0.4892			0.4317		
IR Inten --		9.8339			1.0338			0.0000		
Atom	AN	X	Y	Z	X	Y	Z	X	Y	Z
1	13	0.03	0.08	-0.04	0.03	0.17	-0.01	0.06	0.13	0.01
2	13	0.08	-0.09	0.35	0.12	0.13	0.00	0.15	0.09	0.03
3	13	0.08	-0.09	-0.35	-0.12	-0.13	0.00	-0.15	-0.09	0.03
4	13	0.03	0.08	0.04	-0.03	-0.17	-0.01	-0.06	-0.13	0.01
5	3	-0.35	0.10	0.00	0.00	0.00	0.21	0.00	0.00	0.16
6	3	-0.01	0.07	0.00	0.00	0.00	-0.33	0.00	0.00	-0.48
7	3	-0.04	0.14	0.00	0.00	0.00	-0.41	0.00	0.00	-0.37
8	3	-0.35	0.10	0.00	0.00	0.00	0.21	0.00	0.00	-0.16

9	3	-0.01	0.07	0.00	0.00	0.00	-0.33	0.00	0.00	0.48
10	3	-0.04	0.14	0.00	0.00	0.00	-0.41	0.00	0.00	0.37
11	13	0.08	-0.09	0.35	0.12	0.13	0.00	-0.15	-0.09	-0.03
12	13	0.03	0.08	-0.04	0.03	0.17	-0.01	-0.06	-0.13	-0.01
13	13	0.08	-0.09	-0.35	-0.12	-0.13	0.00	0.15	0.09	-0.03
14	13	0.03	0.08	0.04	-0.03	-0.17	-0.01	0.06	0.13	-0.01
15	12	-0.28	-0.17	0.00	0.00	0.00	0.34	0.00	0.00	0.00

	28	29	30
	AG	BU	AU
Frequencies --	267.4541	283.8918	298.1195
Red. masses --	21.7675	11.4364	23.3186
Frc consts --	0.9174	0.5431	1.2210
IR Inten --	0.0000	17.5094	17.2863

Atom	AN	X	Y	Z	X	Y	Z	X	Y	Z
1	13	-0.08	-0.02	0.13	0.12	-0.05	-0.02	0.35	0.04	-0.02
2	13	0.11	-0.06	0.38	-0.16	-0.02	0.06	-0.27	0.03	0.00
3	13	0.11	-0.06	-0.38	-0.16	-0.02	-0.06	0.27	-0.03	0.00
4	13	-0.08	-0.02	-0.13	0.12	-0.05	0.02	-0.35	-0.04	-0.02
5	3	-0.02	0.20	0.00	0.03	0.44	0.00	0.00	0.00	-0.02
6	3	-0.17	-0.06	0.00	0.32	0.06	0.00	0.00	0.00	-0.25
7	3	-0.07	0.23	0.00	-0.13	-0.25	0.00	0.00	0.00	0.17
8	3	0.02	-0.20	0.00	0.03	0.44	0.00	0.00	0.00	-0.02
9	3	0.17	0.06	0.00	0.32	0.06	0.00	0.00	0.00	-0.25
10	3	0.07	-0.23	0.00	-0.13	-0.25	0.00	0.00	0.00	0.17
11	13	-0.11	0.06	-0.38	-0.16	-0.02	0.06	-0.27	0.03	0.00
12	13	0.08	0.02	-0.13	0.12	-0.05	-0.02	0.35	0.04	-0.02
13	13	-0.11	0.06	0.38	-0.16	-0.02	-0.06	0.27	-0.03	0.00
14	13	0.08	0.02	0.13	0.12	-0.05	0.02	-0.35	-0.04	-0.02
15	12	0.00	0.00	0.00	0.06	0.18	0.00	0.00	0.00	0.14

	31	32	33
	AG	BG	AG
Frequencies --	300.6342	304.7118	312.0609
Red. masses --	12.3940	21.4593	7.4754
Frc consts --	0.6600	1.1739	0.4289
IR Inten --	0.0000	0.0000	0.0000

Atom	AN	X	Y	Z	X	Y	Z	X	Y	Z
1	13	-0.14	0.02	0.03	0.36	0.01	-0.02	0.03	-0.02	-0.01
2	13	0.18	-0.03	-0.12	-0.23	0.00	0.03	-0.05	0.00	0.04
3	13	0.18	-0.03	0.12	0.23	0.00	0.03	-0.05	0.00	-0.04
4	13	-0.14	0.02	-0.03	-0.36	-0.01	-0.02	0.03	-0.02	0.01
5	3	0.41	-0.04	0.00	0.00	0.00	0.09	0.64	0.05	0.00
6	3	-0.38	-0.13	0.00	0.00	0.00	-0.31	0.19	0.15	0.00
7	3	0.15	0.11	0.00	0.00	0.00	0.19	-0.06	-0.12	0.00
8	3	-0.41	0.04	0.00	0.00	0.00	-0.09	-0.64	-0.05	0.00

9	3	0.38	0.13	0.00	0.00	0.00	0.31	-0.19	-0.15	0.00
10	3	-0.15	-0.11	0.00	0.00	0.00	-0.19	0.06	0.12	0.00
11	13	-0.18	0.03	0.12	0.23	0.00	-0.03	0.05	0.00	-0.04
12	13	0.14	-0.02	-0.03	-0.36	-0.01	0.02	-0.03	0.02	0.01
13	13	-0.18	0.03	-0.12	-0.23	0.00	-0.03	0.05	0.00	0.04
14	13	0.14	-0.02	0.03	0.36	0.01	0.02	-0.03	0.02	-0.01
15	12	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00

	34	35	36
	BU	BU	BU
Frequencies --	329.1646	338.4755	343.0980
Red. masses --	12.6735	9.1338	8.3770
Frc consts --	0.8090	0.6165	0.5810
IR Inten --	76.5978	51.7058	70.9733

Atom	AN	X	Y	Z	X	Y	Z	X	Y	Z
1	13	0.04	0.01	-0.10	-0.04	0.04	-0.04	0.02	-0.04	-0.01
2	13	-0.08	0.04	-0.07	0.01	0.01	0.01	-0.04	-0.08	0.00
3	13	-0.08	0.04	0.07	0.01	0.01	-0.01	-0.04	-0.08	0.00
4	13	0.04	0.01	0.10	-0.04	0.04	0.04	0.02	-0.04	0.01
5	3	-0.19	-0.08	0.00	0.59	-0.02	0.00	0.27	0.08	0.00
6	3	0.40	0.27	0.00	0.13	0.08	0.00	0.00	-0.01	0.00
7	3	0.02	0.26	0.00	-0.03	-0.26	0.00	0.14	0.60	0.00
8	3	-0.19	-0.08	0.00	0.59	-0.02	0.00	0.27	0.08	0.00
9	3	0.40	0.27	0.00	0.13	0.08	0.00	0.00	-0.01	0.00
10	3	0.02	0.26	0.00	-0.03	-0.26	0.00	0.14	0.60	0.00
11	13	-0.08	0.04	-0.07	0.01	0.01	0.01	-0.04	-0.08	0.00
12	13	0.04	0.01	-0.10	-0.04	0.04	-0.04	0.02	-0.04	-0.01
13	13	-0.08	0.04	0.07	0.01	0.01	-0.01	-0.04	-0.08	0.00
14	13	0.04	0.01	0.10	-0.04	0.04	0.04	0.02	-0.04	0.01
15	12	0.03	-0.47	0.00	-0.29	-0.13	0.00	-0.12	0.13	0.00

	37	38	39
	AG	BU	AG
Frequencies --	346.6606	365.9495	373.3548
Red. masses --	7.6686	11.2519	10.4592
Frc consts --	0.5430	0.8878	0.8590
IR Inten --	0.0000	131.9122	0.0000

Atom	AN	X	Y	Z	X	Y	Z	X	Y	Z
1	13	-0.01	0.04	0.02	-0.16	-0.06	0.01	0.17	0.04	0.04
2	13	0.04	0.06	0.03	0.09	-0.02	0.02	-0.11	-0.01	0.01
3	13	0.04	0.06	-0.03	0.09	-0.02	-0.02	-0.11	-0.01	-0.01
4	13	-0.01	0.04	-0.02	-0.16	-0.06	-0.01	0.17	0.04	-0.04
5	3	-0.04	-0.01	0.00	-0.08	-0.08	0.00	0.15	0.01	0.00
6	3	-0.14	-0.11	0.00	0.52	0.33	0.00	-0.53	-0.32	0.00
7	3	-0.14	-0.66	0.00	-0.01	0.01	0.00	0.05	0.10	0.00
8	3	0.04	0.01	0.00	-0.08	-0.08	0.00	-0.15	-0.01	0.00

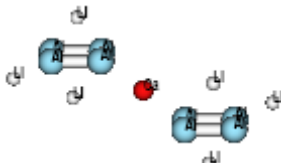
9	3	0.14	0.11	0.00	0.52	0.33	0.00	0.53	0.32	0.00
10	3	0.14	0.66	0.00	-0.01	0.01	0.00	-0.05	-0.10	0.00
11	13	-0.04	-0.06	-0.03	0.09	-0.02	0.02	0.11	0.01	-0.01
12	13	0.01	-0.04	-0.02	-0.16	-0.06	0.01	-0.17	-0.04	-0.04
13	13	-0.04	-0.06	0.03	0.09	-0.02	-0.02	0.11	0.01	0.01
14	13	0.01	-0.04	0.02	-0.16	-0.06	-0.01	-0.17	-0.04	0.04
15	12	0.00	0.00	0.00	0.06	0.24	0.00	0.00	0.00	0.00

Al4Li3MgAl4Li3-fusion60000-b36311+gx.frq -57.89093505

State=1-A|HF=-2185.0259085

Al4Li3MgAl4Li3-fusion200-b36311+gx.frq

|State=1-A|HF=-2185.0258723



Charge = 0 Multiplicity = 1

Li,0,6.3274760207,-2.3494510431,0.
Li,0,4.770505841,2.0013345759,0.
Al,0,2.7624250582,0.6912653558,-1.346962233
Al,0,5.0471274376,-0.4339812872,-1.3549018059
Al,0,2.7624250582,0.6912653558,1.346962233
Al,0,5.0471274376,-0.4339812872,1.3549018059
Li,0,3.1255138087,-1.9331083246,0.
Ca,0,0.,0.,0.
Li,0,-3.1255138087,1.9331083246,0.
Li,0,-4.770505841,-2.0013345759,0.
Li,0,-6.3274760207,2.3494510431,0.
Al,0,-2.7624250582,-0.6912653558,-1.346962233
Al,0,-5.0471274376,0.4339812872,-1.3549018059
Al,0,-2.7624250582,-0.6912653558,1.346962233
Al,0,-5.0471274376,0.4339812872,1.3549018059

State=1-AG\HF=-2662.4019979

		1			2			3		
		AU			BU			AU		
Frequencies --		-8.3687			14.3940			29.0567		
Red. masses --		14.9699			15.8787			22.4267		
Frc consts --		0.0006			0.0019			0.0112		
IR Inten --		1.5761			0.4746			0.1806		
Atom	AN	X	Y	Z	X	Y	Z	X	Y	Z
1	3	0.00	0.00	0.37	0.42	0.11	0.00	0.00	0.00	0.27
2	3	0.00	0.00	-0.29	0.02	-0.30	0.00	0.00	0.00	0.26
3	13	0.17	-0.10	-0.10	-0.13	-0.03	0.01	-0.14	-0.13	-0.09
4	13	0.18	-0.10	0.07	0.19	-0.03	0.00	-0.15	-0.14	0.19
5	13	-0.17	0.10	-0.10	-0.13	-0.03	-0.01	0.14	0.13	-0.09
6	13	-0.18	0.10	0.07	0.19	-0.03	0.00	0.15	0.14	0.19
7	3	0.00	0.00	0.29	0.06	0.20	0.00	0.00	0.00	-0.17
8	20	0.00	0.00	-0.03	-0.33	0.15	0.00	0.00	0.00	-0.41
9	3	0.00	0.00	0.29	0.06	0.20	0.00	0.00	0.00	-0.17
10	3	0.00	0.00	-0.29	0.02	-0.30	0.00	0.00	0.00	0.26
11	3	0.00	0.00	0.37	0.42	0.11	0.00	0.00	0.00	0.27
12	13	-0.17	0.10	-0.10	-0.13	-0.03	-0.01	0.14	0.13	-0.09
13	13	-0.18	0.10	0.07	0.19	-0.03	0.00	0.15	0.14	0.19
14	13	0.17	-0.10	-0.10	-0.13	-0.03	0.01	-0.14	-0.13	-0.09

15	13	0.18	-0.10	0.07	0.19	-0.03	0.00	-0.15	-0.14	0.19

			4			5			6	
			AG			BG			AG	
Frequencies --			50.0632			71.4501			88.0044	
Red. masses --			14.7336			17.0718			15.8970	
Frc consts --			0.0218			0.0513			0.0725	
IR Inten --			0.0000			0.0000			0.0000	
Atom	AN	X	Y	Z	X	Y	Z	X	Y	Z
1	3	0.36	0.29	0.00	0.00	0.00	-0.11	-0.10	0.07	0.00
2	3	-0.02	-0.09	0.00	0.00	0.00	-0.01	0.16	0.47	0.00
3	13	-0.15	0.17	0.00	-0.01	0.10	0.24	0.27	0.12	-0.03
4	13	0.13	0.17	0.00	0.20	0.12	-0.08	0.02	0.15	0.02
5	13	-0.15	0.17	0.00	0.01	-0.10	0.24	0.27	0.12	0.03
6	13	0.13	0.17	0.00	-0.20	-0.12	-0.08	0.02	0.15	-0.02
7	3	0.01	0.29	0.00	0.00	0.00	0.49	0.14	-0.02	0.00
8	20	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
9	3	-0.01	-0.29	0.00	0.00	0.00	-0.49	-0.14	0.02	0.00
10	3	0.02	0.09	0.00	0.00	0.00	0.01	-0.16	-0.47	0.00
11	3	-0.36	-0.29	0.00	0.00	0.00	0.11	0.10	-0.07	0.00
12	13	0.15	-0.17	0.00	-0.01	0.10	-0.24	-0.27	-0.12	-0.03
13	13	-0.13	-0.17	0.00	0.20	0.12	0.08	-0.02	-0.15	0.02
14	13	0.15	-0.17	0.00	0.01	-0.10	-0.24	-0.27	-0.12	0.03
15	13	-0.13	-0.17	0.00	-0.20	-0.12	0.08	-0.02	-0.15	-0.02

			7			8			9	
			BU			AU			BU	
Frequencies --			94.6219			103.9137			109.9885	
Red. masses --			17.0537			13.3970			9.6381	
Frc consts --			0.0900			0.0852			0.0687	
IR Inten --			27.1195			0.0010			68.2212	
Atom	AN	X	Y	Z	X	Y	Z	X	Y	Z
1	3	-0.42	-0.27	0.00	0.00	0.00	0.07	0.52	0.25	0.00
2	3	0.08	0.18	0.00	0.00	0.00	-0.05	0.01	0.29	0.00
3	13	0.16	-0.05	0.00	0.10	-0.07	-0.05	0.09	-0.04	-0.04
4	13	-0.02	-0.05	0.00	-0.11	-0.10	0.02	-0.12	-0.05	0.02
5	13	0.16	-0.05	0.00	-0.10	0.07	-0.05	0.09	-0.04	0.04
6	13	-0.02	-0.05	0.00	0.11	0.10	0.02	-0.12	-0.05	-0.02
7	3	0.11	-0.16	0.00	0.00	0.00	-0.60	-0.07	0.08	0.00
8	20	-0.32	0.35	0.00	0.00	0.00	0.30	-0.09	0.01	0.00
9	3	0.11	-0.16	0.00	0.00	0.00	-0.60	-0.07	0.08	0.00
10	3	0.08	0.18	0.00	0.00	0.00	-0.05	0.01	0.29	0.00
11	3	-0.42	-0.27	0.00	0.00	0.00	0.07	0.52	0.25	0.00
12	13	0.16	-0.05	0.00	-0.10	0.07	-0.05	0.09	-0.04	0.04
13	13	-0.02	-0.05	0.00	0.11	0.10	0.02	-0.12	-0.05	-0.02
14	13	0.16	-0.05	0.00	0.10	-0.07	-0.05	0.09	-0.04	-0.04

15	13	-0.02	-0.05	0.00	-0.11	-0.10	0.02	-0.12	-0.05	0.02

			10			11			12	
			AG			BG			BG	
Frequencies --			110.1594			123.4374			131.3661	
Red. masses --			8.8853			16.8939			14.7399	
Frc consts --			0.0635			0.1517			0.1499	
IR Inten --			0.0000			0.0000			0.0000	
Atom	AN	X	Y	Z	X	Y	Z	X	Y	Z
1	3	-0.56	-0.25	0.00	0.00	0.00	0.02	0.00	0.00	-0.43
2	3	0.04	-0.20	0.00	0.00	0.00	-0.19	0.00	0.00	-0.05
3	13	-0.04	0.04	0.02	0.23	-0.06	0.22	0.19	0.08	-0.05
4	13	0.12	0.06	-0.03	-0.08	-0.06	-0.08	-0.13	0.13	0.13
5	13	-0.04	0.04	-0.02	-0.23	0.06	0.22	-0.19	-0.08	-0.05
6	13	0.12	0.06	0.03	0.08	0.06	-0.08	0.13	-0.13	0.13
7	3	0.10	-0.14	0.00	0.00	0.00	-0.46	0.00	0.00	0.34
8	20	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
9	3	-0.10	0.14	0.00	0.00	0.00	0.46	0.00	0.00	-0.34
10	3	-0.04	0.20	0.00	0.00	0.00	0.19	0.00	0.00	0.05
11	3	0.56	0.25	0.00	0.00	0.00	-0.02	0.00	0.00	0.43
12	13	0.04	-0.04	0.02	0.23	-0.06	-0.22	0.19	0.08	0.05
13	13	-0.12	-0.06	-0.03	-0.08	-0.06	0.08	-0.13	0.13	-0.13
14	13	0.04	-0.04	-0.02	-0.23	0.06	-0.22	-0.19	-0.08	0.05
15	13	-0.12	-0.06	0.03	0.08	0.06	0.08	0.13	-0.13	-0.13

			13			14			15	
			AU			BG			AU	
Frequencies --			133.2671			154.6462			157.2774	
Red. masses --			23.4718			11.9398			10.8347	
Frc consts --			0.2456			0.1682			0.1579	
IR Inten --			0.3999			0.0000			0.2251	
Atom	AN	X	Y	Z	X	Y	Z	X	Y	Z
1	3	0.00	0.00	0.20	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	-0.30
2	3	0.00	0.00	-0.16	0.00	0.00	-0.27	0.00	0.00	0.27
3	13	0.10	-0.11	0.32	-0.02	0.12	-0.01	0.11	-0.10	-0.02
4	13	-0.02	-0.10	-0.19	0.12	0.09	0.15	-0.14	-0.04	-0.05
5	13	-0.10	0.11	0.32	0.02	-0.12	-0.01	-0.11	0.10	-0.02
6	13	0.02	0.10	-0.19	-0.12	-0.09	0.15	0.14	0.04	-0.05
7	3	0.00	0.00	-0.22	0.00	0.00	-0.55	0.00	0.00	0.49
8	20	0.00	0.00	-0.28	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.03
9	3	0.00	0.00	-0.22	0.00	0.00	0.55	0.00	0.00	0.49
10	3	0.00	0.00	-0.16	0.00	0.00	0.27	0.00	0.00	0.27
11	3	0.00	0.00	0.20	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	-0.30
12	13	-0.10	0.11	0.32	-0.02	0.12	0.01	-0.11	0.10	-0.02
13	13	0.02	0.10	-0.19	0.12	0.09	-0.15	0.14	0.04	-0.05
14	13	0.10	-0.11	0.32	0.02	-0.12	0.01	0.11	-0.10	-0.02

15	13	-0.02	-0.10	-0.19	-0.12	-0.09	-0.15	-0.14	-0.04	-0.05

	16	17	18
	AU	AG	BU
Frequencies --	164.3101	167.3518	169.7534
Red. masses --	13.0459	7.6273	8.2223
Frc consts --	0.2075	0.1259	0.1396
IR Inten --	6.8163	0.0000	7.1970

Atom	AN	X	Y	Z	X	Y	Z	X	Y	Z
1	3	0.00	0.00	0.52	0.20	0.15	0.00	-0.19	-0.15	0.00
2	3	0.00	0.00	0.20	0.00	-0.14	0.00	0.01	0.21	0.00
3	13	-0.16	-0.03	-0.03	0.00	0.04	0.05	0.00	-0.03	-0.07
4	13	0.00	-0.08	-0.16	-0.02	0.03	-0.05	0.03	-0.02	0.07
5	13	0.16	0.03	-0.03	0.00	0.04	-0.05	0.00	-0.03	0.07
6	13	0.00	0.08	-0.16	-0.02	0.03	0.05	0.03	-0.02	-0.07
7	3	0.00	0.00	0.23	0.04	-0.64	0.00	-0.02	0.61	0.00
8	20	0.00	0.00	0.19	0.00	0.00	0.00	-0.01	-0.08	0.00
9	3	0.00	0.00	0.23	-0.04	0.64	0.00	-0.02	0.61	0.00
10	3	0.00	0.00	0.20	0.00	0.14	0.00	0.01	0.21	0.00
11	3	0.00	0.00	0.52	-0.20	-0.15	0.00	-0.19	-0.15	0.00
12	13	0.16	0.03	-0.03	0.00	-0.04	0.05	0.00	-0.03	0.07
13	13	0.00	0.08	-0.16	0.02	-0.03	-0.05	0.03	-0.02	-0.07
14	13	-0.16	-0.03	-0.03	0.00	-0.04	-0.05	0.00	-0.03	-0.07
15	13	0.00	-0.08	-0.16	0.02	-0.03	0.05	0.03	-0.02	0.07

	19	20	21
	BU	BG	AU
Frequencies --	179.9509	189.3414	193.2672
Red. masses --	16.0799	8.6969	8.7958
Frc consts --	0.3068	0.1837	0.1936
IR Inten --	3.6906	0.0000	0.5939

Atom	AN	X	Y	Z	X	Y	Z	X	Y	Z
1	3	0.02	0.05	0.00	0.00	0.00	0.04	0.00	0.00	0.10
2	3	-0.05	-0.33	0.00	0.00	0.00	-0.65	0.00	0.00	0.63
3	13	0.01	-0.06	0.07	-0.09	0.03	0.04	0.08	0.00	-0.02
4	13	-0.08	-0.08	-0.13	-0.09	-0.05	0.01	0.09	0.06	-0.03
5	13	0.01	-0.06	-0.07	0.09	-0.03	0.04	-0.08	0.00	-0.02
6	13	-0.08	-0.08	0.13	0.09	0.05	0.01	-0.09	-0.06	-0.03
7	3	-0.18	0.43	0.00	0.00	0.00	0.19	0.00	0.00	-0.21
8	20	0.26	0.34	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	-0.05
9	3	-0.18	0.43	0.00	0.00	0.00	-0.19	0.00	0.00	-0.21
10	3	-0.05	-0.33	0.00	0.00	0.00	0.65	0.00	0.00	0.63
11	3	0.02	0.05	0.00	0.00	0.00	-0.04	0.00	0.00	0.10
12	13	0.01	-0.06	-0.07	-0.09	0.03	-0.04	-0.08	0.00	-0.02
13	13	-0.08	-0.08	0.13	-0.09	-0.05	-0.01	-0.09	-0.06	-0.03
14	13	0.01	-0.06	0.07	0.09	-0.03	-0.04	0.08	0.00	-0.02

15	13	-0.08	-0.08	-0.13	0.09	0.05	-0.01	0.09	0.06	-0.03

	22	23	24
	AG	BU	BG
Frequencies --	200.9057	217.1643	221.6761
Red. masses --	11.8813	13.3756	10.3133
Frc consts --	0.2826	0.3717	0.2986
IR Inten --	0.0000	17.8422	0.0000

Atom	AN	X	Y	Z	X	Y	Z	X	Y	Z
1	3	-0.07	0.20	0.00	0.13	-0.17	0.00	0.00	0.00	-0.64
2	3	0.01	-0.46	0.00	-0.06	0.50	0.00	0.00	0.00	-0.08
3	13	0.12	0.00	0.12	-0.15	-0.03	-0.08	-0.05	-0.16	0.02
4	13	-0.07	0.03	-0.16	0.06	-0.06	0.06	0.08	-0.07	0.06
5	13	0.12	0.00	-0.12	-0.15	-0.03	0.08	0.05	0.16	0.02
6	13	-0.07	0.03	0.16	0.06	-0.06	-0.06	-0.08	0.07	0.06
7	3	-0.10	0.33	0.00	-0.01	-0.27	0.00	0.00	0.00	-0.06
8	20	0.00	0.00	0.00	0.21	0.23	0.00	0.00	0.00	0.00
9	3	0.10	-0.33	0.00	-0.01	-0.27	0.00	0.00	0.00	0.06
10	3	-0.01	0.46	0.00	-0.06	0.50	0.00	0.00	0.00	0.08
11	3	0.07	-0.20	0.00	0.13	-0.17	0.00	0.00	0.00	0.64
12	13	-0.12	0.00	0.12	-0.15	-0.03	0.08	-0.05	-0.16	-0.02
13	13	0.07	-0.03	-0.16	0.06	-0.06	-0.06	0.08	-0.07	-0.06
14	13	-0.12	0.00	-0.12	-0.15	-0.03	-0.08	0.05	0.16	-0.02
15	13	0.07	-0.03	0.16	0.06	-0.06	0.06	-0.08	0.07	-0.06

	25	26	27
	AG	BU	AG
Frequencies --	233.1382	237.0282	251.6689
Red. masses --	12.4776	14.6275	20.3854
Frc consts --	0.3996	0.4842	0.7607
IR Inten --	0.0000	7.9536	0.0000

Atom	AN	X	Y	Z	X	Y	Z	X	Y	Z
1	3	0.04	-0.08	0.00	0.06	-0.11	0.00	0.02	-0.02	0.00
2	3	-0.01	-0.59	0.00	0.06	-0.54	0.00	-0.30	0.12	0.00
3	13	0.07	0.06	-0.10	0.03	0.05	-0.23	0.00	-0.06	0.35
4	13	-0.07	0.04	0.21	-0.07	0.00	0.16	0.01	0.05	0.21
5	13	0.07	0.06	0.10	0.03	0.05	0.23	0.00	-0.06	-0.35
6	13	-0.07	0.04	-0.21	-0.07	0.00	-0.16	0.01	0.05	-0.21
7	3	0.07	0.00	0.00	-0.01	-0.08	0.00	0.25	0.04	0.00
8	20	0.00	0.00	0.00	0.05	0.10	0.00	0.00	0.00	0.00
9	3	-0.07	0.00	0.00	-0.01	-0.08	0.00	-0.25	-0.04	0.00
10	3	0.01	0.59	0.00	0.06	-0.54	0.00	0.30	-0.12	0.00
11	3	-0.04	0.08	0.00	0.06	-0.11	0.00	-0.02	0.02	0.00
12	13	-0.07	-0.06	-0.10	0.03	0.05	0.23	0.00	0.06	0.35
13	13	0.07	-0.04	0.21	-0.07	0.00	-0.16	-0.01	-0.05	0.21
14	13	-0.07	-0.06	0.10	0.03	0.05	-0.23	0.00	0.06	-0.35

15	13	0.07	-0.04	-0.21	-0.07	0.00	0.16	-0.01	-0.05	-0.21

	28	29	30
	BU	AU	AG
Frequencies --	272.4641	276.3177	295.8911
Red. masses --	15.4577	16.8851	13.1447
Frc consts --	0.6761	0.7596	0.6781
IR Inten --	30.3788	16.7083	0.0000

Atom	AN	X	Y	Z	X	Y	Z	X	Y	Z
1	3	0.01	-0.17	0.00	0.00	0.00	-0.49	-0.16	0.43	0.00
2	3	0.42	0.08	0.00	0.00	0.00	0.02	-0.27	-0.02	0.00
3	13	-0.01	0.19	-0.11	-0.14	-0.27	0.03	-0.01	-0.21	-0.10
4	13	0.01	-0.15	-0.19	0.16	0.00	0.01	0.01	0.14	0.00
5	13	-0.01	0.19	0.11	0.14	0.27	0.03	-0.01	-0.21	0.10
6	13	0.01	-0.15	0.19	-0.16	0.00	0.01	0.01	0.14	0.00
7	3	-0.29	-0.01	0.00	0.00	0.00	-0.13	0.24	-0.03	0.00
8	20	-0.06	-0.07	0.00	0.00	0.00	0.10	0.00	0.00	0.00
9	3	-0.29	-0.01	0.00	0.00	0.00	-0.13	-0.24	0.03	0.00
10	3	0.42	0.08	0.00	0.00	0.00	0.02	0.27	0.02	0.00
11	3	0.01	-0.17	0.00	0.00	0.00	-0.49	0.16	-0.43	0.00
12	13	-0.01	0.19	0.11	0.14	0.27	0.03	0.01	0.21	-0.10
13	13	0.01	-0.15	0.19	-0.16	0.00	0.01	-0.01	-0.14	0.00
14	13	-0.01	0.19	-0.11	-0.14	-0.27	0.03	0.01	0.21	0.10
15	13	0.01	-0.15	-0.19	0.16	0.00	0.01	-0.01	-0.14	0.00

	31	32	33
	BG	AG	BU
Frequencies --	314.0590	322.7757	324.1903
Red. masses --	22.5786	7.9032	7.8074
Frc consts --	1.3121	0.4851	0.4835
IR Inten --	0.0000	0.0000	90.0757

Atom	AN	X	Y	Z	X	Y	Z	X	Y	Z
1	3	0.00	0.00	0.26	0.01	-0.05	0.00	-0.07	0.17	0.00
2	3	0.00	0.00	-0.20	-0.24	0.00	0.00	0.20	0.01	0.00
3	13	-0.04	-0.29	0.00	0.04	-0.03	0.00	-0.05	0.01	-0.03
4	13	-0.03	0.33	-0.01	0.07	0.05	0.03	-0.06	-0.04	-0.04
5	13	0.04	0.29	0.00	0.04	-0.03	0.00	-0.05	0.01	0.03
6	13	0.03	-0.33	-0.01	0.07	0.05	-0.03	-0.06	-0.04	0.04
7	3	0.00	0.00	-0.05	-0.64	-0.08	0.00	0.63	0.06	0.00
8	20	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.02	0.01	0.00
9	3	0.00	0.00	0.05	0.64	0.08	0.00	0.63	0.06	0.00
10	3	0.00	0.00	0.20	0.24	0.00	0.00	0.20	0.01	0.00
11	3	0.00	0.00	-0.26	-0.01	0.05	0.00	-0.07	0.17	0.00
12	13	-0.04	-0.29	0.00	-0.04	0.03	0.00	-0.05	0.01	0.03
13	13	-0.03	0.33	0.01	-0.07	-0.05	0.03	-0.06	-0.04	0.04
14	13	0.04	0.29	0.00	-0.04	0.03	0.00	-0.05	0.01	-0.03

15	13	0.03	-0.33	0.01	-0.07	-0.05	-0.03	-0.06	-0.04	-0.04

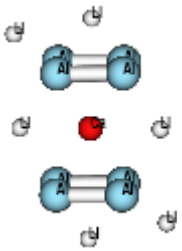
	34	35	36
	AU	BU	AG
Frequencies --	327.0343	341.9737	345.5077
Red. masses --	18.4708	7.9039	7.7523
Frc consts --	1.1639	0.5446	0.5452
IR Inten --	5.0624	281.6553	0.0000

Atom	AN	X	Y	Z	X	Y	Z	X	Y	Z
1	3	0.00	0.00	-0.41	-0.18	0.35	0.00	0.15	-0.32	0.00
2	3	0.00	0.00	0.22	0.51	0.01	0.00	-0.56	-0.01	0.00
3	13	-0.02	0.18	0.02	-0.03	-0.06	0.03	0.03	0.04	-0.04
4	13	0.11	-0.32	0.01	0.01	0.00	0.08	0.00	0.00	-0.07
5	13	0.02	-0.18	0.02	-0.03	-0.06	-0.03	0.03	0.04	0.04
6	13	-0.11	0.32	0.01	0.01	0.00	-0.08	0.00	0.00	0.07
7	3	0.00	0.00	-0.01	-0.24	-0.05	0.00	0.20	0.03	0.00
8	20	0.00	0.00	0.00	0.02	0.03	0.00	0.00	0.00	0.00
9	3	0.00	0.00	-0.01	-0.24	-0.05	0.00	-0.20	-0.03	0.00
10	3	0.00	0.00	0.22	0.51	0.01	0.00	0.56	0.01	0.00
11	3	0.00	0.00	-0.41	-0.18	0.35	0.00	-0.15	0.32	0.00
12	13	0.02	-0.18	0.02	-0.03	-0.06	-0.03	-0.03	-0.04	-0.04
13	13	-0.11	0.32	0.01	0.01	0.00	-0.08	0.00	0.00	-0.07
14	13	-0.02	0.18	0.02	-0.03	-0.06	0.03	-0.03	-0.04	0.04
15	13	0.11	-0.32	0.01	0.01	0.00	0.08	0.00	0.00	0.07

	37	38	39
	BU	AG	BU
Frequencies --	352.6292	376.2049	491.4807
Red. masses --	8.7601	10.5366	24.3026
Frc consts --	0.6418	0.8786	3.4587
IR Inten --	135.8267	0.0000	201.9396

Atom	AN	X	Y	Z	X	Y	Z	X	Y	Z
1	3	-0.25	0.50	0.00	-0.26	0.50	0.00	-0.05	0.13	0.00
2	3	-0.37	0.03	0.00	-0.31	0.02	0.00	-0.21	-0.04	0.00
3	13	0.03	0.00	-0.11	0.03	0.11	-0.01	0.02	0.23	0.21
4	13	0.07	-0.05	-0.05	0.05	-0.17	0.04	0.00	-0.26	0.22
5	13	0.03	0.00	0.11	0.03	0.11	0.01	0.02	0.23	-0.21
6	13	0.07	-0.05	0.05	0.05	-0.17	-0.04	0.00	-0.26	-0.22
7	3	-0.06	-0.06	0.00	0.01	-0.02	0.00	0.04	0.05	0.00
8	20	-0.01	-0.01	0.00	0.00	0.00	0.00	0.02	0.02	0.00
9	3	-0.06	-0.06	0.00	-0.01	0.02	0.00	0.04	0.05	0.00
10	3	-0.37	0.03	0.00	0.31	-0.02	0.00	-0.21	-0.04	0.00
11	3	-0.25	0.50	0.00	0.26	-0.50	0.00	-0.05	0.13	0.00
12	13	0.03	0.00	0.11	-0.03	-0.11	-0.01	0.02	0.23	-0.21
13	13	0.07	-0.05	0.05	-0.05	0.17	0.04	0.00	-0.26	-0.22
14	13	0.03	0.00	-0.11	-0.03	-0.11	0.01	0.02	0.23	0.21

15	13	0.07	-0.05	-0.05	-0.05	0.17	-0.04	0.00	-0.26	0.22



Charge = 0 Multiplicity = 1

Al,0,-2.5579035426,-1.3548902798,1.2809475592
Al,0,-0.3107569082,-2.9212573115,1.2477701705
Al,0,-0.3107569082,-2.9212573115,-1.2477701705
Al,0,-2.5579035426,-1.3548902798,-1.2809475592
Li,0,2.4093849877,-1.6325504876,0.
Li,0,-4.8800757434,-1.5085592536,0.
Li,0,-2.5853230467,-3.8893061303,0.
Li,0,-2.4093849877,1.6325504876,0.
Li,0,4.8800757434,1.5085592536,0.
Li,0,2.5853230467,3.8893061303,0.
Al,0,0.3107569082,2.9212573115,-1.2477701705
Al,0,2.5579035426,1.3548902798,-1.2809475592
Al,0,0.3107569082,2.9212573115,1.2477701705
Al,0,2.5579035426,1.3548902798,1.2809475592
Ca,0,0.,0.,0.

State=1-AG\HF=-2662.4551161

		1			2			3		
		AU			AU			BG		
Frequencies --		-68.9949			10.5473			34.7629		
Red. masses --		17.2177			19.9370			12.2460		
Frc consts --		0.0483			0.0013			0.0087		
IR Inten --		1.3068			1.6861			0.0000		
Atom	AN	X	Y	Z	X	Y	Z	X	Y	Z
1	13	0.01	0.10	0.02	-0.19	0.04	-0.20	0.07	-0.16	0.14
2	13	-0.01	0.11	0.04	-0.17	0.00	0.24	-0.02	-0.11	0.04
3	13	0.01	-0.11	0.04	0.17	0.00	0.24	0.02	0.11	0.04
4	13	-0.01	-0.10	0.02	0.19	-0.04	-0.20	-0.07	0.16	0.14
5	3	0.00	0.00	0.45	0.00	0.00	0.05	0.00	0.00	0.57
6	3	0.00	0.00	0.18	0.00	0.00	-0.41	0.00	0.00	0.02
7	3	0.00	0.00	0.30	0.00	0.00	0.05	0.00	0.00	-0.21
8	3	0.00	0.00	0.45	0.00	0.00	0.05	0.00	0.00	-0.57
9	3	0.00	0.00	0.18	0.00	0.00	-0.41	0.00	0.00	-0.02
10	3	0.00	0.00	0.30	0.00	0.00	0.05	0.00	0.00	0.21

11	13	-0.01	0.11	0.04	-0.17	0.00	0.24	0.02	0.11	-0.04
12	13	0.01	0.10	0.02	-0.19	0.04	-0.20	-0.07	0.16	-0.14
13	13	0.01	-0.11	0.04	0.17	0.00	0.24	-0.02	-0.11	-0.04
14	13	-0.01	-0.10	0.02	0.19	-0.04	-0.20	0.07	-0.16	-0.14
15	20	0.00	0.00	-0.50	0.00	0.00	0.02	0.00	0.00	0.00

	4	5	6
	BG	BU	AU
Frequencies --	53.7757	67.0611	71.9785
Red. masses --	10.7318	10.8408	9.8458
Frc consts --	0.0183	0.0287	0.0301
IR Inten --	0.0000	6.1763	0.6562

Atom	AN	X	Y	Z	X	Y	Z	X	Y	Z
1	13	0.00	-0.06	0.03	0.01	-0.10	0.00	-0.03	-0.04	-0.08
2	13	-0.06	-0.14	0.13	0.02	0.15	0.00	0.06	0.01	-0.09
3	13	0.06	0.14	0.13	0.02	0.15	0.00	-0.06	-0.01	-0.09
4	13	0.00	0.06	0.03	0.01	-0.10	0.00	0.03	0.04	-0.08
5	3	0.00	0.00	-0.59	-0.18	0.00	0.00	0.00	0.00	0.60
6	3	0.00	0.00	-0.05	0.26	-0.49	0.00	0.00	0.00	-0.10
7	3	0.00	0.00	-0.24	0.28	0.02	0.00	0.00	0.00	0.27
8	3	0.00	0.00	0.59	-0.18	0.00	0.00	0.00	0.00	0.60
9	3	0.00	0.00	0.05	0.26	-0.49	0.00	0.00	0.00	-0.10
10	3	0.00	0.00	0.24	0.28	0.02	0.00	0.00	0.00	0.27
11	13	0.06	0.14	-0.13	0.02	0.15	0.00	0.06	0.01	-0.09
12	13	0.00	0.06	-0.03	0.01	-0.10	0.00	-0.03	-0.04	-0.08
13	13	-0.06	-0.14	-0.13	0.02	0.15	0.00	-0.06	-0.01	-0.09
14	13	0.00	-0.06	-0.03	0.01	-0.10	0.00	0.03	0.04	-0.08
15	20	0.00	0.00	0.00	-0.19	0.02	0.00	0.00	0.00	0.19

	7	8	9
	AU	AG	AG
Frequencies --	80.4658	91.6225	106.3376
Red. masses --	13.1369	8.9454	7.7371
Frc consts --	0.0501	0.0442	0.0515
IR Inten --	0.7157	0.0000	0.0000

Atom	AN	X	Y	Z	X	Y	Z	X	Y	Z
1	13	-0.05	0.17	-0.03	-0.12	-0.02	-0.01	-0.04	-0.06	0.00
2	13	0.05	0.18	-0.04	-0.09	0.03	0.00	-0.04	0.05	0.00
3	13	-0.05	-0.18	-0.04	-0.09	0.03	0.00	-0.04	0.05	0.00
4	13	0.05	-0.17	-0.03	-0.12	-0.02	0.01	-0.04	-0.06	0.00
5	3	0.00	0.00	-0.40	0.02	0.11	0.00	0.01	0.64	0.00
6	3	0.00	0.00	0.10	0.23	-0.62	0.00	-0.18	0.19	0.00
7	3	0.00	0.00	0.43	0.07	0.01	0.00	-0.01	0.00	0.00
8	3	0.00	0.00	-0.40	-0.02	-0.11	0.00	-0.01	-0.64	0.00
9	3	0.00	0.00	0.10	-0.23	0.62	0.00	0.18	-0.19	0.00
10	3	0.00	0.00	0.43	-0.07	-0.01	0.00	0.01	0.00	0.00

11	13	0.05	0.18	-0.04	0.09	-0.03	0.00	0.04	-0.05	0.00
12	13	-0.05	0.17	-0.03	0.12	0.02	0.01	0.04	0.06	0.00
13	13	-0.05	-0.18	-0.04	0.09	-0.03	0.00	0.04	-0.05	0.00
14	13	0.05	-0.17	-0.03	0.12	0.02	-0.01	0.04	0.06	0.00
15	20	0.00	0.00	0.15	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00

	10	11	12
	BU	AG	BG
Frequencies --	107.2567	113.1380	115.3952
Red. masses --	10.7240	21.7549	10.2724
Frc consts --	0.0727	0.1641	0.0806
IR Inten --	12.1539	0.0000	0.0000

Atom	AN	X	Y	Z	X	Y	Z	X	Y	Z
1	13	0.07	-0.15	0.01	-0.03	0.31	0.00	0.03	0.17	0.01
2	13	0.04	0.08	0.00	0.02	0.30	0.01	-0.09	0.01	-0.01
3	13	0.04	0.08	0.00	0.02	0.30	-0.01	0.09	-0.01	-0.01
4	13	0.07	-0.15	-0.01	-0.03	0.31	0.00	-0.03	-0.17	0.01
5	3	-0.13	0.12	0.00	-0.04	0.05	0.00	0.00	0.00	0.11
6	3	-0.30	0.54	0.00	0.09	0.12	0.00	0.00	0.00	0.23
7	3	0.07	-0.05	0.00	0.04	0.32	0.00	0.00	0.00	-0.59
8	3	-0.13	0.12	0.00	0.04	-0.05	0.00	0.00	0.00	-0.11
9	3	-0.30	0.54	0.00	-0.09	-0.12	0.00	0.00	0.00	-0.23
10	3	0.07	-0.05	0.00	-0.04	-0.32	0.00	0.00	0.00	0.59
11	13	0.04	0.08	0.00	-0.02	-0.30	-0.01	0.09	-0.01	0.01
12	13	0.07	-0.15	0.01	0.03	-0.31	0.00	-0.03	-0.17	-0.01
13	13	0.04	0.08	0.00	-0.02	-0.30	0.01	-0.09	0.01	0.01
14	13	0.07	-0.15	-0.01	0.03	-0.31	0.00	0.03	0.17	-0.01
15	20	-0.17	-0.02	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00

	13	14	15
	AU	BU	BG
Frequencies --	126.4045	130.1648	135.1533
Red. masses --	13.2920	8.5295	15.5876
Frc consts --	0.1251	0.0851	0.1678
IR Inten --	5.2413	32.5866	0.0000

Atom	AN	X	Y	Z	X	Y	Z	X	Y	Z
1	13	0.08	0.20	-0.12	-0.05	0.00	0.00	-0.13	-0.05	0.21
2	13	0.00	-0.11	0.03	0.04	-0.02	0.01	-0.10	0.15	-0.11
3	13	0.00	0.11	0.03	0.04	-0.02	-0.01	0.10	-0.15	-0.11
4	13	-0.08	-0.20	-0.12	-0.05	0.00	0.00	0.13	0.05	0.21
5	3	0.00	0.00	0.18	0.03	0.68	0.00	0.00	0.00	-0.16
6	3	0.00	0.00	0.48	-0.01	-0.09	0.00	0.00	0.00	-0.47
7	3	0.00	0.00	-0.29	0.00	0.03	0.00	0.00	0.00	-0.19
8	3	0.00	0.00	0.18	0.03	0.68	0.00	0.00	0.00	0.16
9	3	0.00	0.00	0.48	-0.01	-0.09	0.00	0.00	0.00	0.47
10	3	0.00	0.00	-0.29	0.00	0.03	0.00	0.00	0.00	0.19

11	13	0.00	-0.11	0.03	0.04	-0.02	0.01	0.10	-0.15	0.11
12	13	0.08	0.20	-0.12	-0.05	0.00	0.00	0.13	0.05	-0.21
13	13	0.00	0.11	0.03	0.04	-0.02	-0.01	-0.10	0.15	0.11
14	13	-0.08	-0.20	-0.12	-0.05	0.00	0.00	-0.13	-0.05	-0.21
15	20	0.00	0.00	0.11	0.02	-0.18	0.00	0.00	0.00	0.00
			16			17			18	
			AU			AG			BG	
Frequencies --			138.9039			145.0849			152.1607	
Red. masses --			15.3772			14.0554			21.1999	
Frc consts --			0.1748			0.1743			0.2892	
IR Inten --			0.1136			0.0000			0.0000	
Atom	AN	X	Y	Z	X	Y	Z	X	Y	Z
1	13	0.11	-0.11	-0.15	-0.05	-0.19	-0.01	-0.17	0.18	0.11
2	13	0.17	-0.11	0.13	-0.08	0.21	0.01	-0.02	-0.30	-0.12
3	13	-0.17	0.11	0.13	-0.08	0.21	-0.01	0.02	0.30	-0.12
4	13	-0.11	0.11	-0.15	-0.05	-0.19	0.01	0.17	-0.18	0.11
5	3	0.00	0.00	-0.24	-0.01	-0.43	0.00	0.00	0.00	0.11
6	3	0.00	0.00	0.14	-0.23	0.17	0.00	0.00	0.00	-0.08
7	3	0.00	0.00	0.47	0.24	-0.01	0.00	0.00	0.00	0.35
8	3	0.00	0.00	-0.24	0.01	0.43	0.00	0.00	0.00	-0.11
9	3	0.00	0.00	0.14	0.23	-0.17	0.00	0.00	0.00	0.08
10	3	0.00	0.00	0.47	-0.24	0.01	0.00	0.00	0.00	-0.35
11	13	0.17	-0.11	0.13	0.08	-0.21	-0.01	0.02	0.30	0.12
12	13	0.11	-0.11	-0.15	0.05	0.19	0.01	0.17	-0.18	-0.11
13	13	-0.17	0.11	0.13	0.08	-0.21	0.01	-0.02	-0.30	0.12
14	13	-0.11	0.11	-0.15	0.05	0.19	-0.01	-0.17	0.18	-0.11
15	20	0.00	0.00	-0.08	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
			19			20			21	
			AU			BU			BG	
Frequencies --			153.5870			180.0729			192.5779	
Red. masses --			19.2695			16.8034			15.8741	
Frc consts --			0.2678			0.3210			0.3469	
IR Inten --			1.5347			8.3373			0.0000	
Atom	AN	X	Y	Z	X	Y	Z	X	Y	Z
1	13	0.16	-0.13	-0.11	-0.12	-0.13	-0.03	0.07	-0.08	-0.03
2	13	-0.01	0.30	0.10	-0.09	0.14	0.02	-0.30	0.00	-0.10
3	13	0.01	-0.30	0.10	-0.09	0.14	-0.02	0.30	0.00	-0.10
4	13	-0.16	0.13	-0.11	-0.12	-0.13	0.03	-0.07	0.08	-0.03
5	3	0.00	0.00	0.10	0.36	-0.04	0.00	0.00	0.00	-0.08
6	3	0.00	0.00	0.16	-0.21	0.02	0.00	0.00	0.00	0.38
7	3	0.00	0.00	-0.40	0.36	-0.01	0.00	0.00	0.00	0.36
8	3	0.00	0.00	0.10	0.36	-0.04	0.00	0.00	0.00	0.08
9	3	0.00	0.00	0.16	-0.21	0.02	0.00	0.00	0.00	-0.38
10	3	0.00	0.00	-0.40	0.36	-0.01	0.00	0.00	0.00	-0.36

11	13	-0.01	0.30	0.10	-0.09	0.14	0.02	0.30	0.00	0.10
12	13	0.16	-0.13	-0.11	-0.12	-0.13	-0.03	-0.07	0.08	0.03
13	13	0.01	-0.30	0.10	-0.09	0.14	-0.02	-0.30	0.00	0.10
14	13	-0.16	0.13	-0.11	-0.12	-0.13	0.03	0.07	-0.08	0.03
15	20	0.00	0.00	0.08	0.39	-0.01	0.00	0.00	0.00	0.00

	22	23	24
	AU	BU	AG
Frequencies --	196.4518	211.1453	221.5594
Red. masses --	14.4644	16.0135	17.9847
Frc consts --	0.3289	0.4206	0.5202
IR Inten --	13.1225	48.1895	0.0000

Atom	AN	X	Y	Z	X	Y	Z	X	Y	Z
1	13	-0.06	0.09	0.03	-0.17	0.06	-0.03	0.24	0.01	0.05
2	13	0.27	0.03	0.08	0.23	0.04	0.03	-0.27	0.04	-0.04
3	13	-0.27	-0.03	0.08	0.23	0.04	-0.03	-0.27	0.04	0.04
4	13	0.06	-0.09	0.03	-0.17	0.06	0.03	0.24	0.01	-0.05
5	3	0.00	0.00	0.06	-0.05	-0.40	0.00	-0.05	0.04	0.00
6	3	0.00	0.00	-0.40	-0.28	0.01	0.00	0.38	0.09	0.00
7	3	0.00	0.00	-0.39	0.07	0.23	0.00	-0.19	-0.18	0.00
8	3	0.00	0.00	0.06	-0.05	-0.40	0.00	0.05	-0.04	0.00
9	3	0.00	0.00	-0.40	-0.28	0.01	0.00	-0.38	-0.09	0.00
10	3	0.00	0.00	-0.39	0.07	0.23	0.00	0.19	0.18	0.00
11	13	0.27	0.03	0.08	0.23	0.04	0.03	0.27	-0.04	0.04
12	13	-0.06	0.09	0.03	-0.17	0.06	-0.03	-0.24	-0.01	-0.05
13	13	-0.27	-0.03	0.08	0.23	0.04	-0.03	0.27	-0.04	-0.04
14	13	0.06	-0.09	0.03	-0.17	0.06	0.03	-0.24	-0.01	0.05
15	20	0.00	0.00	-0.04	-0.06	-0.23	0.00	0.00	0.00	0.00

	25	26	27
	AG	BU	AU
Frequencies --	230.0565	234.9505	238.0501
Red. masses --	8.2172	8.6633	12.9165
Frc consts --	0.2562	0.2818	0.4313
IR Inten --	0.0000	9.8985	6.1142

Atom	AN	X	Y	Z	X	Y	Z	X	Y	Z
1	13	0.00	-0.07	0.03	0.00	0.09	-0.03	-0.24	-0.11	-0.02
2	13	0.06	0.07	-0.02	-0.04	-0.08	0.02	0.06	0.01	-0.01
3	13	0.06	0.07	0.02	-0.04	-0.08	-0.02	-0.06	-0.01	-0.01
4	13	0.00	-0.07	-0.03	0.00	0.09	0.03	0.24	0.11	-0.02
5	3	0.07	-0.03	0.00	-0.04	0.02	0.00	0.00	0.00	-0.04
6	3	0.03	-0.09	0.00	-0.04	0.10	0.00	0.00	0.00	0.57
7	3	-0.65	0.16	0.00	0.65	-0.17	0.00	0.00	0.00	-0.16
8	3	-0.07	0.03	0.00	-0.04	0.02	0.00	0.00	0.00	-0.04
9	3	-0.03	0.09	0.00	-0.04	0.10	0.00	0.00	0.00	0.57
10	3	0.65	-0.16	0.00	0.65	-0.17	0.00	0.00	0.00	-0.16

11	13	-0.06	-0.07	0.02	-0.04	-0.08	0.02	0.06	0.01	-0.01
12	13	0.00	0.07	-0.03	0.00	0.09	-0.03	-0.24	-0.11	-0.02
13	13	-0.06	-0.07	-0.02	-0.04	-0.08	-0.02	-0.06	-0.01	-0.01
14	13	0.00	0.07	0.03	0.00	0.09	0.03	0.24	0.11	-0.02
15	20	0.00	0.00	0.00	-0.08	0.00	0.00	0.00	0.00	-0.04

	28	29	30
	BG	BU	AG
Frequencies --	239.1020	252.8221	290.1676
Red. masses --	12.5216	24.5075	7.8384
Frc consts --	0.4218	0.9230	0.3888
IR Inten --	0.0000	36.5140	0.0000

Atom	AN	X	Y	Z	X	Y	Z	X	Y	Z
1	13	0.23	0.11	0.02	0.12	0.10	0.09	-0.02	0.01	0.10
2	13	-0.04	-0.02	0.02	-0.17	0.13	-0.03	0.00	0.00	-0.01
3	13	0.04	0.02	0.02	-0.17	0.13	0.03	0.00	0.00	0.01
4	13	-0.23	-0.11	0.02	0.12	0.10	-0.09	-0.02	0.01	-0.10
5	3	0.00	0.00	0.01	0.05	-0.24	0.00	0.67	-0.01	0.00
6	3	0.00	0.00	-0.58	0.28	0.19	0.00	0.11	0.09	0.00
7	3	0.00	0.00	0.16	-0.02	-0.03	0.00	0.09	-0.02	0.00
8	3	0.00	0.00	-0.01	0.05	-0.24	0.00	-0.67	0.01	0.00
9	3	0.00	0.00	0.58	0.28	0.19	0.00	-0.11	-0.09	0.00
10	3	0.00	0.00	-0.16	-0.02	-0.03	0.00	-0.09	0.02	0.00
11	13	0.04	0.02	-0.02	-0.17	0.13	-0.03	0.00	0.00	0.01
12	13	-0.23	-0.11	-0.02	0.12	0.10	0.09	0.02	-0.01	-0.10
13	13	-0.04	-0.02	-0.02	-0.17	0.13	0.03	0.00	0.00	-0.01
14	13	0.23	0.11	-0.02	0.12	0.10	-0.09	0.02	-0.01	0.10
15	20	0.00	0.00	0.00	0.00	-0.59	0.00	0.00	0.00	0.00

	31	32	33
	BU	AG	BU
Frequencies --	300.1768	302.4154	323.0403
Red. masses --	20.5101	16.1223	8.6651
Frc consts --	1.0889	0.8687	0.5328
IR Inten --	51.3369	0.0000	17.7528

Atom	AN	X	Y	Z	X	Y	Z	X	Y	Z
1	13	-0.10	-0.03	0.38	0.07	0.03	-0.31	0.01	0.01	0.00
2	13	0.03	-0.05	-0.07	-0.02	0.03	0.09	0.00	0.00	-0.04
3	13	0.03	-0.05	0.07	-0.02	0.03	-0.09	0.00	0.00	0.04
4	13	-0.10	-0.03	-0.38	0.07	0.03	0.31	0.01	0.01	0.00
5	3	0.07	-0.01	0.00	0.43	0.00	0.00	0.68	0.00	0.00
6	3	0.23	0.16	0.00	-0.16	-0.10	0.00	-0.09	-0.07	0.00
7	3	0.21	0.19	0.00	-0.14	-0.17	0.00	-0.03	-0.03	0.00
8	3	0.07	-0.01	0.00	-0.43	0.00	0.00	0.68	0.00	0.00
9	3	0.23	0.16	0.00	0.16	0.10	0.00	-0.09	-0.07	0.00
10	3	0.21	0.19	0.00	0.14	0.17	0.00	-0.03	-0.03	0.00

11	13	0.03	-0.05	-0.07	0.02	-0.03	-0.09	0.00	0.00	-0.04
12	13	-0.10	-0.03	0.38	-0.07	-0.03	0.31	0.01	0.01	0.00
13	13	0.03	-0.05	0.07	0.02	-0.03	0.09	0.00	0.00	0.04
14	13	-0.10	-0.03	-0.38	-0.07	-0.03	-0.31	0.01	0.01	0.00
15	20	0.01	0.09	0.00	0.00	0.00	0.00	-0.21	0.01	0.00

	34	35	36
	BU	AG	AG
Frequencies --	333.6408	335.5407	350.1299
Red. masses --	10.3085	9.9431	15.3951
Frc consts --	0.6761	0.6596	1.1120
IR Inten --	22.4690	0.0000	0.0000

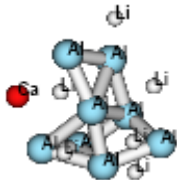
Atom	AN	X	Y	Z	X	Y	Z	X	Y	Z
1	13	0.04	-0.03	-0.02	-0.03	0.04	0.01	0.00	-0.03	-0.12
2	13	-0.05	-0.05	0.18	0.05	0.05	-0.17	-0.02	-0.04	-0.30
3	13	-0.05	-0.05	-0.18	0.05	0.05	0.17	-0.02	-0.04	0.30
4	13	0.04	-0.03	0.02	-0.03	0.04	-0.01	0.00	-0.03	0.12
5	3	0.09	0.00	0.00	-0.01	0.00	0.00	0.10	0.00	0.00
6	3	0.07	0.04	0.00	-0.10	-0.07	0.00	0.07	0.06	0.00
7	3	0.07	0.63	0.00	-0.08	-0.64	0.00	0.11	0.51	0.00
8	3	0.09	0.00	0.00	0.01	0.00	0.00	-0.10	0.00	0.00
9	3	0.07	0.04	0.00	0.10	0.07	0.00	-0.07	-0.06	0.00
10	3	0.07	0.63	0.00	0.08	0.64	0.00	-0.11	-0.51	0.00
11	13	-0.05	-0.05	0.18	-0.05	-0.05	0.17	0.02	0.04	0.30
12	13	0.04	-0.03	-0.02	0.03	-0.04	-0.01	0.00	0.03	0.12
13	13	-0.05	-0.05	-0.18	-0.05	-0.05	-0.17	0.02	0.04	-0.30
14	13	0.04	-0.03	0.02	0.03	-0.04	0.01	0.00	0.03	-0.12
15	20	-0.04	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00

	37	38	39
	BU	AG	BU
Frequencies --	350.4516	373.0075	373.1916
Red. masses --	14.6773	8.4633	8.5706
Frc consts --	1.0621	0.6938	0.7033
IR Inten --	18.5524	0.0000	145.8535

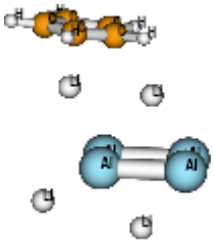
Atom	AN	X	Y	Z	X	Y	Z	X	Y	Z
1	13	0.00	0.03	0.11	0.10	0.03	0.08	-0.10	-0.03	-0.08
2	13	0.03	0.05	0.28	-0.03	0.00	-0.02	0.03	0.00	0.03
3	13	0.03	0.05	-0.28	-0.03	0.00	0.02	0.03	0.00	-0.03
4	13	0.00	0.03	-0.11	0.10	0.03	-0.08	-0.10	-0.03	0.08
5	3	0.07	-0.01	0.00	0.08	0.00	0.00	0.10	-0.01	0.00
6	3	-0.09	-0.08	0.00	-0.57	-0.34	0.00	0.57	0.33	0.00
7	3	-0.12	-0.52	0.00	0.04	0.13	0.00	-0.04	-0.13	0.00
8	3	0.07	-0.01	0.00	-0.08	0.00	0.00	0.10	-0.01	0.00
9	3	-0.09	-0.08	0.00	0.57	0.34	0.00	0.57	0.33	0.00
10	3	-0.12	-0.52	0.00	-0.04	-0.13	0.00	-0.04	-0.13	0.00

11	13	0.03	0.05	0.28	0.03	0.00	0.02	0.03	0.00	0.03
12	13	0.00	0.03	0.11	-0.10	-0.03	-0.08	-0.10	-0.03	-0.08
13	13	0.03	0.05	-0.28	0.03	0.00	-0.02	0.03	0.00	-0.03
14	13	0.00	0.03	-0.11	-0.10	-0.03	0.08	-0.10	-0.03	0.08
15	20	-0.02	0.02	0.00	0.00	0.00	0.00	-0.03	0.01	0.00

Al4Li3CaAl4Li3-fusion87650-b36311+gx.frq -76.6554293



State=1-A\HF=-2662.524156



Charge = -1 Multiplicity = 1

Al,0,1.1328924925,1.171295455,-1.2935375787
Al,0,2.5124699714,-1.1606799182,-1.2438606745
Al,0,2.4906135517,-1.1735427121,1.2437268575
Al,0,1.1161464539,1.1533181283,1.2964214966
Li,0,-0.0165678568,-1.2768503069,-0.0291526713
Li,0,1.3250843412,3.4371128611,0.0159718397
Li,0,3.5980980288,1.1023287946,0.0147377738
C,0,-3.6862855267,0.6060295807,-0.184788836
C,0,-3.1017402913,-0.1981932505,-1.1900121122
C,0,-3.2873712639,0.0949136886,1.0768075185
H,0,-4.3259833538,1.4650439118,-0.3502609012
C,0,-2.3530738384,-1.2200046582,-0.5514348535
H,0,-3.2077421978,-0.0679919312,-2.2593302902
C,0,-2.4706567905,-1.0384519118,0.8528901098
H,0,-3.5600732475,0.4946653254,2.0454844488
H,0,-1.8767924804,-2.054482717,-1.0617773891
H,0,-2.0483914116,-1.6726467516,1.6250521696
Li,0,-1.527895563,0.9022650118,-0.0201203784

State=1-A\HF=-1193.6040371

		1			2			3		
		A			A			A		
Frequencies --		-6.3442			54.3746			70.0259		
Red. masses --		3.9992			8.3910			7.3713		
Frc consts --		0.0001			0.0146			0.0213		
IR Inten --		0.2594			0.0085			0.2683		
Atom	AN	X	Y	Z	X	Y	Z	X	Y	Z
1	13	0.01	-0.04	-0.03	0.13	0.01	-0.08	-0.05	-0.18	-0.02
2	13	-0.02	-0.05	0.07	0.24	0.08	0.00	0.21	0.00	0.01
3	13	-0.04	0.04	0.07	-0.20	-0.07	0.00	0.12	0.03	0.00
4	13	-0.01	0.06	-0.03	-0.13	-0.03	-0.08	0.01	-0.04	-0.01
5	3	-0.03	0.02	0.05	0.02	-0.01	-0.46	0.09	-0.06	-0.14
6	3	0.03	0.01	-0.11	-0.04	-0.01	-0.02	-0.45	-0.11	-0.13
7	3	0.00	-0.02	-0.01	0.00	0.02	0.28	-0.05	0.16	0.00
8	6	-0.02	0.00	0.18	-0.03	0.01	0.12	0.00	0.15	0.04
9	6	-0.10	0.14	0.01	-0.16	-0.08	0.11	0.04	0.22	0.01

10	6	0.13	-0.15	0.07	0.13	0.09	0.11	-0.16	-0.01	0.03
11	1	-0.05	0.01	0.36	-0.03	0.00	0.13	0.07	0.21	0.07
12	6	-0.02	0.07	-0.20	-0.09	-0.04	0.09	-0.07	0.11	-0.02
13	1	-0.22	0.28	0.04	-0.31	-0.17	0.11	0.16	0.34	0.02
14	6	0.13	-0.11	-0.16	0.08	0.07	0.09	-0.20	-0.03	-0.01
15	1	0.22	-0.29	0.15	0.26	0.18	0.11	-0.23	-0.09	0.04
16	1	-0.01	0.18	-0.36	-0.20	-0.11	0.10	-0.09	0.12	-0.06
17	1	0.20	-0.22	-0.29	0.20	0.14	0.09	-0.30	-0.13	-0.04
18	3	0.00	0.03	-0.04	0.00	-0.02	-0.15	0.00	-0.05	0.24

	4	5	6
	A	A	A
Frequencies --	79.9658	94.5611	98.9631
Red. masses --	6.3864	10.2098	8.4382
Frc consts --	0.0241	0.0538	0.0487
IR Inten --	0.4315	0.8987	0.3342

Atom	AN	X	Y	Z	X	Y	Z	X	Y	Z
1	13	0.01	0.01	0.02	-0.18	-0.09	0.22	0.06	0.03	-0.03
2	13	-0.04	-0.02	0.03	0.13	-0.01	0.00	0.10	0.01	0.03
3	13	0.16	0.01	0.02	-0.07	0.02	0.00	0.24	0.06	0.04
4	13	-0.05	-0.15	0.03	0.19	0.09	0.22	-0.04	-0.09	-0.05
5	3	0.00	-0.02	0.20	0.02	0.00	-0.43	0.06	0.03	0.07
6	3	-0.43	-0.08	0.16	0.15	0.01	-0.11	0.58	0.03	0.10
7	3	-0.06	0.10	-0.10	0.02	0.00	-0.51	0.09	0.02	-0.01
8	6	0.00	0.06	-0.01	-0.06	-0.02	-0.05	-0.25	-0.03	0.03
9	6	-0.16	-0.04	-0.03	-0.16	-0.08	-0.05	-0.26	-0.01	0.00
10	6	0.19	0.17	-0.03	0.06	0.06	-0.05	-0.19	-0.02	0.01
11	1	-0.01	0.05	0.01	-0.08	-0.03	-0.05	-0.28	-0.05	0.05
12	6	-0.08	0.00	-0.05	-0.10	-0.04	-0.06	-0.20	0.01	-0.03
13	1	-0.32	-0.14	-0.02	-0.27	-0.15	-0.05	-0.32	-0.02	0.01
14	6	0.13	0.13	-0.05	0.04	0.05	-0.06	-0.16	0.01	-0.02
15	1	0.34	0.26	-0.02	0.15	0.13	-0.05	-0.16	-0.03	0.02
16	1	-0.13	-0.02	-0.05	-0.16	-0.09	-0.05	-0.18	0.04	-0.05
17	1	0.22	0.18	-0.05	0.12	0.11	-0.06	-0.12	0.01	-0.04
18	3	0.03	0.01	-0.34	-0.03	-0.02	-0.18	-0.18	-0.05	-0.08

	7	8	9
	A	A	A
Frequencies --	118.7497	121.8060	141.6218
Red. masses --	8.8517	9.5379	4.8449
Frc consts --	0.0735	0.0834	0.0573
IR Inten --	4.6321	0.3896	1.6356

Atom	AN	X	Y	Z	X	Y	Z	X	Y	Z
1	13	0.24	0.09	0.01	0.08	0.20	-0.08	0.09	0.04	0.04
2	13	-0.02	-0.06	0.00	-0.09	-0.13	0.13	-0.07	0.02	-0.02
3	13	-0.03	-0.08	-0.01	0.00	0.12	0.13	0.02	0.05	-0.02

4	13	0.25	0.10	0.00	-0.03	-0.12	-0.08	0.05	0.10	0.02
5	3	-0.02	0.24	0.02	0.01	-0.03	-0.55	-0.03	-0.23	0.00
6	3	-0.48	0.04	-0.01	-0.08	0.02	0.31	-0.05	0.06	-0.06
7	3	0.18	-0.14	0.02	0.02	-0.03	-0.54	0.07	-0.04	0.14
8	6	-0.25	-0.13	0.00	0.08	0.02	0.02	0.14	0.10	0.01
9	6	-0.15	-0.07	0.00	0.09	0.03	0.02	-0.05	-0.02	-0.01
10	6	-0.19	-0.08	0.00	-0.02	-0.05	0.02	0.07	0.03	0.00
11	1	-0.37	-0.22	-0.01	0.13	0.06	0.01	0.33	0.24	0.02
12	6	-0.02	0.03	0.00	0.01	-0.03	0.03	-0.25	-0.18	-0.02
13	1	-0.18	-0.09	0.00	0.16	0.08	0.02	-0.06	-0.01	0.00
14	6	-0.04	0.02	0.00	-0.07	-0.08	0.03	-0.17	-0.15	-0.02
15	1	-0.24	-0.12	0.00	-0.06	-0.07	0.02	0.18	0.09	0.00
16	1	0.08	0.09	0.00	-0.06	-0.07	0.03	-0.43	-0.28	-0.02
17	1	0.03	0.07	0.00	-0.11	-0.11	0.02	-0.30	-0.25	-0.03
18	3	-0.17	0.08	0.00	0.05	-0.04	0.14	0.12	-0.20	-0.05

	10	11	12
	A	A	A
Frequencies --	149.4045	160.8551	207.6164
Red. masses --	16.0202	10.8725	13.8134
Frc consts --	0.2107	0.1657	0.3508
IR Inten --	0.1114	0.8141	8.3833

Atom	AN	X	Y	Z	X	Y	Z	X	Y	Z
1	13	-0.22	0.12	-0.20	0.20	0.03	0.07	0.22	-0.05	0.06
2	13	0.15	0.29	0.18	0.22	-0.07	-0.10	-0.16	0.32	0.08
3	13	-0.15	-0.25	0.17	-0.21	0.08	-0.11	0.14	-0.30	0.08
4	13	0.29	-0.07	-0.20	-0.17	-0.02	0.07	-0.20	0.02	0.06
5	3	-0.03	-0.11	0.46	-0.02	-0.06	0.60	0.00	0.00	-0.13
6	3	0.00	0.02	0.17	0.00	0.01	0.04	0.01	-0.02	-0.64
7	3	0.03	0.01	-0.29	0.02	0.01	-0.59	0.00	0.04	-0.45
8	6	0.06	0.05	0.00	0.02	0.02	0.03	0.00	0.00	0.01
9	6	-0.03	0.00	-0.01	0.03	0.03	0.03	0.04	0.02	0.02
10	6	0.02	0.01	-0.01	-0.04	-0.03	0.03	-0.04	-0.03	0.02
11	1	0.14	0.12	0.01	0.06	0.05	0.04	0.00	0.00	0.01
12	6	-0.12	-0.08	-0.02	-0.03	-0.01	0.02	0.03	0.02	0.02
13	1	-0.02	0.02	-0.01	0.08	0.07	0.03	0.07	0.04	0.01
14	6	-0.09	-0.07	-0.02	-0.07	-0.05	0.02	-0.02	-0.01	0.02
15	1	0.06	0.03	0.00	-0.06	-0.05	0.03	-0.07	-0.05	0.02
16	1	-0.16	-0.10	-0.03	0.00	0.01	0.01	0.03	0.02	0.02
17	1	-0.18	-0.14	-0.03	-0.15	-0.11	0.02	-0.03	-0.02	0.02
18	3	0.05	-0.09	-0.03	0.02	-0.04	-0.03	0.00	0.01	-0.01

	13	14	15
	A	A	A
Frequencies --	217.6584	227.8300	238.9148
Red. masses --	10.3051	6.0708	11.9128

Frc consts --		0.2876			0.1857			0.4006		
IR Inten --		10.3654			4.3521			5.4577		
Atom	AN	X	Y	Z	X	Y	Z	X	Y	Z
1	13	-0.17	0.13	0.08	-0.01	-0.04	-0.03	0.03	-0.20	-0.03
2	13	0.13	-0.07	-0.05	0.03	-0.02	0.02	-0.08	0.28	0.01
3	13	0.13	-0.11	0.06	0.02	-0.02	-0.02	-0.08	0.29	-0.01
4	13	-0.19	0.13	-0.08	-0.01	-0.04	0.03	0.02	-0.17	0.02
5	3	0.17	0.17	0.02	-0.18	0.72	0.01	-0.07	0.07	-0.01
6	3	-0.17	0.27	-0.04	0.03	-0.01	-0.01	-0.07	-0.29	0.04
7	3	0.23	-0.77	-0.02	-0.03	0.08	0.00	0.53	-0.60	-0.01
8	6	0.04	0.03	0.00	0.15	0.04	0.00	-0.01	-0.01	0.00
9	6	0.02	0.02	0.00	0.04	-0.05	0.00	0.00	0.00	0.00
10	6	0.03	0.02	0.00	0.08	-0.02	0.00	0.00	0.00	0.00
11	1	0.07	0.06	0.01	0.25	0.11	-0.01	-0.03	-0.02	0.00
12	6	0.00	0.00	0.00	-0.12	-0.16	0.00	0.01	0.01	0.00
13	1	0.03	0.03	0.00	0.05	-0.04	0.00	0.00	-0.01	0.00
14	6	0.00	0.00	0.00	-0.08	-0.14	0.00	0.01	0.01	0.00
15	1	0.05	0.03	0.00	0.12	0.01	0.00	-0.01	-0.01	0.00
16	1	0.01	0.00	0.00	-0.20	-0.22	0.03	0.02	0.01	0.00
17	1	0.00	-0.01	-0.01	-0.18	-0.21	-0.01	0.02	0.01	0.00
18	3	-0.01	-0.11	-0.02	-0.05	0.27	0.02	0.00	0.06	0.01

			16			17			18	
			A			A			A	
Frequencies --		252.3760			285.5431			295.2623		
Red. masses --		11.7414			19.1524			6.3254		
Frc consts --		0.4406			0.9201			0.3249		
IR Inten --		4.3380			4.1408			1.0997		
Atom	AN	X	Y	Z	X	Y	Z	X	Y	Z
1	13	0.08	-0.30	-0.06	0.03	-0.12	0.53	-0.02	-0.04	0.04
2	13	-0.04	0.08	-0.01	-0.04	0.02	-0.07	-0.04	0.01	-0.01
3	13	0.05	-0.10	-0.01	-0.04	0.03	0.07	-0.03	0.00	0.01
4	13	-0.08	0.32	-0.06	0.03	-0.12	-0.53	0.03	-0.01	-0.04
5	3	0.00	0.01	-0.05	-0.22	-0.05	-0.01	0.16	0.19	-0.05
6	3	0.00	0.01	0.84	-0.02	0.37	-0.01	0.01	0.01	0.06
7	3	-0.02	0.02	-0.20	0.21	0.29	0.00	0.02	0.08	0.03
8	6	0.00	0.00	-0.01	0.01	-0.01	-0.01	0.02	0.02	0.07
9	6	-0.02	-0.02	-0.01	0.00	-0.03	-0.01	0.13	0.11	0.06
10	6	0.02	0.01	-0.01	0.03	0.01	-0.01	-0.12	-0.08	0.07
11	1	0.00	0.00	-0.01	-0.01	-0.03	-0.02	0.05	0.05	0.09
12	6	-0.01	-0.01	-0.01	-0.01	-0.02	-0.01	0.10	0.07	0.07
13	1	-0.04	-0.03	-0.01	-0.02	-0.04	-0.01	0.24	0.19	0.06
14	6	0.02	0.01	-0.01	0.03	0.00	-0.01	-0.11	-0.07	0.07
15	1	0.04	0.03	-0.01	0.04	0.01	-0.01	-0.19	-0.13	0.07
16	1	-0.02	-0.02	-0.01	-0.02	-0.03	-0.01	0.13	0.10	0.07

17	1	0.03	0.02	-0.01	0.04	0.01	0.00	-0.15	-0.10	0.07
18	3	0.00	0.01	0.05	-0.03	0.20	0.13	0.01	-0.26	-0.71

	19	20	21
	A	A	A
Frequencies --	302.6834	343.9304	345.3005
Red. masses --	6.8696	15.2723	9.7064
Frc consts --	0.3708	1.0644	0.6819
IR Inten --	2.5271	4.6240	5.6561

Atom	AN	X	Y	Z	X	Y	Z	X	Y	Z
1	13	0.02	-0.02	0.02	-0.08	0.02	0.00	-0.06	-0.04	-0.13
2	13	-0.06	0.01	-0.01	0.01	-0.07	0.44	-0.04	-0.06	-0.20
3	13	-0.07	0.01	0.00	0.01	-0.06	-0.44	-0.04	-0.06	0.20
4	13	0.00	-0.04	-0.02	-0.08	0.02	0.00	-0.06	-0.04	0.13
5	3	0.33	0.39	0.05	-0.20	-0.05	-0.01	0.06	-0.06	0.00
6	3	0.03	-0.01	-0.02	-0.03	0.19	0.00	-0.04	0.37	0.00
7	3	0.01	0.12	-0.01	0.65	0.24	0.01	0.75	0.40	0.01
8	6	-0.02	0.02	-0.03	-0.01	-0.01	0.00	0.00	0.00	0.00
9	6	-0.09	-0.02	-0.03	0.01	0.01	0.00	0.00	0.00	0.00
10	6	0.04	0.07	-0.03	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
11	1	0.03	0.06	-0.03	-0.01	-0.01	0.00	0.00	0.00	0.00
12	6	-0.02	0.02	-0.04	0.03	0.03	0.00	-0.01	-0.01	0.00
13	1	-0.11	-0.03	-0.03	0.02	0.02	0.00	-0.01	-0.01	0.00
14	6	0.07	0.08	-0.04	0.02	0.02	0.01	-0.01	-0.01	0.00
15	1	0.12	0.13	-0.04	0.00	0.01	0.00	0.00	0.00	0.00
16	1	0.04	0.05	-0.03	0.03	0.03	-0.01	-0.02	-0.01	0.00
17	1	0.14	0.12	-0.05	0.03	0.04	0.01	-0.02	-0.01	0.00
18	3	0.05	-0.68	0.34	0.02	-0.13	0.00	-0.01	0.07	0.00

	22	23	24
	A	A	A
Frequencies --	365.5621	381.5388	477.6682
Red. masses --	7.5577	7.9424	5.9138
Frc consts --	0.5951	0.6812	0.7950
IR Inten --	64.4587	19.3531	77.4660

Atom	AN	X	Y	Z	X	Y	Z	X	Y	Z
1	13	-0.04	0.08	0.07	0.04	-0.10	-0.04	0.02	0.00	-0.01
2	13	-0.04	-0.03	0.02	-0.06	0.02	0.08	0.00	0.00	0.00
3	13	-0.04	-0.03	-0.02	-0.06	0.03	-0.08	0.00	0.00	0.00
4	13	-0.04	0.08	-0.07	0.04	-0.10	0.04	0.02	0.00	0.01
5	3	0.62	-0.04	0.03	0.62	-0.05	0.03	-0.03	-0.10	0.00
6	3	0.02	-0.60	-0.01	-0.02	0.62	0.00	0.00	0.02	0.00
7	3	0.23	0.15	0.00	-0.23	-0.12	0.00	0.00	-0.01	0.00
8	6	0.03	0.02	0.00	0.01	0.01	0.00	0.10	0.05	0.00
9	6	-0.02	-0.02	0.00	-0.02	-0.02	0.00	0.10	0.03	-0.01
10	6	0.02	0.00	0.00	0.01	0.00	0.00	0.09	0.04	0.01

11	1	0.02	0.02	0.00	-0.01	0.00	0.00	0.23	0.15	-0.01
12	6	-0.06	-0.06	0.00	-0.05	-0.04	0.00	0.00	-0.03	0.00
13	1	-0.05	-0.03	0.00	-0.06	-0.03	0.00	0.21	0.10	-0.01
14	6	-0.04	-0.04	-0.01	-0.04	-0.03	-0.01	0.03	-0.01	0.00
15	1	0.02	-0.01	0.01	0.00	-0.02	0.01	0.22	0.11	0.01
16	1	-0.06	-0.05	0.01	-0.04	-0.03	0.00	0.09	0.03	-0.01
17	1	-0.07	-0.07	-0.02	-0.05	-0.05	-0.02	0.11	0.04	0.00
18	3	-0.10	0.33	0.01	-0.04	0.30	0.01	-0.85	-0.13	0.00

	25	26	27
	A	A	A
Frequencies --	624.4713	635.4247	726.4276
Red. masses --	5.0146	4.1511	1.2663
Frc consts --	1.1522	0.9875	0.3937
IR Inten --	3.3629	0.0550	6.6662

Atom	AN	X	Y	Z	X	Y	Z	X	Y	Z
1	13	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
2	13	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
3	13	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
4	13	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
5	3	-0.02	0.00	0.00	-0.01	-0.01	0.00	0.00	0.00	0.01
6	3	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
7	3	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
8	6	0.03	0.01	-0.02	0.27	0.22	-0.01	0.00	0.00	0.00
9	6	-0.18	-0.13	0.01	-0.20	-0.15	0.01	0.08	0.07	0.00
10	6	0.16	0.10	0.01	-0.22	-0.18	-0.01	-0.07	-0.06	0.00
11	1	0.04	0.02	-0.03	0.41	0.32	-0.01	-0.04	-0.03	-0.01
12	6	0.33	0.21	-0.01	0.06	0.04	-0.01	0.03	0.01	-0.01
13	1	-0.40	-0.28	0.01	-0.32	-0.25	0.01	-0.44	-0.30	0.01
14	6	-0.29	-0.19	0.00	0.10	0.07	0.01	-0.04	-0.02	0.00
15	1	0.33	0.22	0.01	-0.35	-0.28	0.00	0.43	0.30	0.00
16	1	0.23	0.16	-0.03	0.13	0.08	0.00	-0.37	-0.23	0.02
17	1	-0.33	-0.23	-0.01	0.19	0.13	0.01	0.38	0.27	0.01
18	3	-0.03	0.01	0.03	-0.03	0.01	-0.01	0.00	0.00	0.01

	28	29	30
	A	A	A
Frequencies --	741.3500	755.3678	845.5922
Red. masses --	1.2761	1.1251	1.2464
Frc consts --	0.4132	0.3782	0.5251
IR Inten --	4.7388	417.0066	0.0465

Atom	AN	X	Y	Z	X	Y	Z	X	Y	Z
1	13	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
2	13	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
3	13	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
4	13	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00

5	3	0.01	0.00	0.01	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	-0.01
6	3	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
7	3	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
8	6	-0.07	-0.06	0.00	0.04	0.02	0.00	-0.02	-0.01	-0.01
9	6	-0.03	-0.02	-0.01	0.04	0.03	0.00	0.04	0.04	-0.03
10	6	-0.03	-0.03	0.01	0.03	0.02	0.00	-0.02	-0.03	-0.03
11	1	0.51	0.37	0.00	-0.32	-0.25	0.01	0.11	0.10	0.06
12	6	0.06	0.04	-0.01	0.03	0.02	0.00	-0.07	0.02	0.04
13	1	0.18	0.16	-0.01	-0.35	-0.24	0.01	-0.34	-0.37	-0.03
14	6	0.06	0.05	-0.01	0.04	0.04	-0.01	0.07	-0.01	0.05
15	1	0.18	0.13	0.00	-0.36	-0.27	0.01	0.23	0.25	-0.07
16	1	-0.45	-0.31	0.10	-0.40	-0.26	0.07	0.39	0.35	-0.07
17	1	-0.33	-0.25	-0.04	-0.37	-0.27	-0.04	-0.40	-0.38	-0.01
18	3	0.00	0.01	0.00	-0.04	-0.02	0.00	0.00	0.00	0.00

	31	32	33
	A	A	A
Frequencies --	861.1367	862.4476	863.7751
Red. masses --	1.3161	3.3446	3.5184
Frc consts --	0.5750	1.4657	1.5467
IR Inten --	0.6047	1.4175	1.5687

Atom	AN	X	Y	Z	X	Y	Z	X	Y	Z
1	13	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
2	13	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
3	13	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
4	13	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
5	3	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	-0.01	-0.01	0.00	-0.01
6	3	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
7	3	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
8	6	-0.08	-0.03	0.02	-0.12	0.20	0.02	0.12	-0.11	0.10
9	6	0.06	0.02	0.05	0.03	-0.04	0.27	0.07	-0.08	-0.03
10	6	0.04	0.06	0.00	-0.06	0.00	-0.13	-0.13	0.09	0.23
11	1	0.50	0.39	-0.08	-0.34	0.00	-0.21	0.01	-0.26	-0.23
12	6	0.02	-0.06	-0.02	0.12	-0.18	-0.05	0.02	-0.09	-0.14
13	1	-0.39	-0.24	0.07	0.14	0.01	0.27	-0.24	0.18	0.04
14	6	-0.03	0.00	-0.05	0.05	0.01	-0.11	-0.09	0.19	-0.16
15	1	-0.38	-0.34	0.05	0.47	-0.01	0.03	0.23	0.25	0.27
16	1	0.15	0.04	-0.06	0.09	-0.03	-0.30	0.42	-0.02	0.12
17	1	0.14	0.18	0.01	-0.44	0.00	0.14	-0.29	-0.10	-0.29
18	3	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00

	34	35	36
	A	A	A
Frequencies --	1023.9570	1029.1782	1073.1454
Red. masses --	1.4678	1.4347	1.2422
Frc consts --	0.9067	0.8953	0.8429

IR Inten --		26.7247			13.4991			0.7706		
Atom	AN	X	Y	Z	X	Y	Z	X	Y	Z
1	13	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
2	13	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
3	13	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
4	13	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
5	3	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
6	3	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
7	3	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
8	6	0.06	-0.08	0.03	-0.02	0.03	0.06	0.00	0.00	0.08
9	6	-0.04	0.05	0.01	-0.01	0.02	-0.10	0.04	-0.07	0.00
10	6	-0.02	0.02	-0.07	0.04	-0.05	-0.07	-0.03	0.05	-0.01
11	1	0.05	-0.07	0.18	-0.07	0.10	0.59	-0.04	0.07	0.60
12	6	0.04	-0.06	-0.08	0.04	-0.06	0.04	0.01	0.01	-0.04
13	1	-0.34	0.46	0.10	-0.07	0.04	-0.10	0.35	-0.45	-0.07
14	6	0.01	0.00	0.09	-0.05	0.07	-0.04	-0.01	0.01	-0.03
15	1	-0.26	0.35	-0.28	0.20	-0.22	0.04	-0.24	0.29	-0.17
16	1	-0.03	0.01	-0.28	0.27	-0.21	0.49	-0.14	0.06	-0.26
17	1	-0.20	0.21	0.39	-0.21	0.23	0.18	0.06	-0.01	-0.09
18	3	-0.01	0.00	0.00	0.00	0.00	0.01	0.00	0.00	0.00

	37	38	39
	A	A	A
Frequencies --	1075.6031	1143.0204	1288.4376
Red. masses --	1.2486	5.7773	1.2787
Frc consts --	0.8511	4.4472	1.2507
IR Inten --	7.5929	4.5729	0.1112

Atom	AN	X	Y	Z	X	Y	Z	X	Y	Z
1	13	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
2	13	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
3	13	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
4	13	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
5	3	-0.01	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
6	3	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
7	3	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
8	6	-0.01	0.02	0.01	0.18	-0.24	0.05	-0.01	0.01	0.07
9	6	-0.02	0.03	0.04	0.03	-0.04	0.28	-0.04	0.06	0.01
10	6	-0.03	0.04	-0.05	0.07	-0.11	-0.27	0.04	-0.05	0.03
11	1	-0.03	0.02	0.07	0.22	-0.26	-0.01	0.04	-0.06	-0.44
12	6	0.03	-0.03	0.06	-0.16	0.21	0.14	-0.02	0.03	-0.06
13	1	-0.15	0.23	0.08	0.02	0.03	0.33	0.25	-0.36	-0.07
14	6	0.03	-0.06	-0.06	-0.12	0.16	-0.21	0.03	-0.04	-0.05
15	1	-0.25	0.35	-0.24	0.13	-0.14	-0.28	-0.23	0.32	-0.20
16	1	0.18	-0.18	0.44	-0.16	0.27	0.13	0.14	-0.15	0.38
17	1	0.29	-0.34	-0.42	-0.13	0.25	-0.18	-0.19	0.25	0.31

18	3	0.00	0.00	0.00	-0.01	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00

	40	41	42
	A	A	A
Frequencies --	1377.6214	1386.0494	1467.3301
Red. masses --	4.6844	4.8059	2.4899
Frc consts --	5.2380	5.4398	3.1585
IR Inten --	0.1404	2.4879	2.0815

Atom	AN	X	Y	Z	X	Y	Z	X	Y	Z
1	13	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
2	13	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
3	13	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
4	13	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
5	3	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
6	3	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
7	3	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
8	6	-0.02	0.03	0.32	0.10	-0.11	0.00	0.07	-0.09	0.08
9	6	0.13	-0.19	-0.14	-0.15	0.19	-0.08	-0.11	0.16	0.03
10	6	-0.14	0.19	-0.19	-0.13	0.15	0.04	-0.06	0.08	-0.14
11	1	0.04	-0.07	-0.44	0.08	-0.12	0.03	0.10	-0.15	-0.17
12	6	-0.07	0.14	-0.01	0.09	-0.10	0.32	0.05	-0.07	-0.10
13	1	-0.21	0.31	-0.05	0.17	-0.22	-0.17	0.32	-0.45	-0.09
14	6	0.10	-0.17	0.00	0.11	-0.14	-0.26	-0.04	0.05	0.16
15	1	0.25	-0.35	0.14	0.08	-0.08	0.20	0.26	-0.36	0.11
16	1	-0.11	0.01	0.18	-0.19	0.20	-0.43	0.13	-0.16	0.05
17	1	0.01	0.07	0.26	-0.23	0.29	0.27	0.24	-0.33	-0.28
18	3	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00

	43	44	45
	A	A	A
Frequencies --	1470.4804	3138.0884	3176.5464
Red. masses --	2.5765	1.0900	1.0897
Frc consts --	3.2824	6.3242	6.4785
IR Inten --	0.0809	2.4982	0.7263

Atom	AN	X	Y	Z	X	Y	Z	X	Y	Z
1	13	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
2	13	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
3	13	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
4	13	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
5	3	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
6	3	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
7	3	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
8	6	-0.05	0.07	0.18	0.00	0.00	0.00	-0.02	0.02	0.00
9	6	0.00	0.00	-0.14	0.00	0.00	0.01	0.00	0.00	0.01
10	6	0.09	-0.13	-0.04	0.00	0.00	0.00	0.01	-0.01	-0.03
11	1	0.01	-0.02	-0.54	0.00	-0.01	0.00	0.21	-0.28	0.05

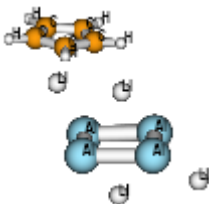
12	6	0.07	-0.09	0.14	0.04	-0.06	-0.04	0.01	-0.01	-0.01
13	1	-0.04	0.06	-0.16	-0.01	0.01	-0.12	-0.02	0.02	-0.16
14	6	-0.09	0.13	0.00	-0.01	0.01	-0.01	0.03	-0.04	0.05
15	1	-0.16	0.20	-0.27	0.00	-0.01	-0.02	-0.10	0.15	0.37
16	1	-0.14	0.16	-0.48	-0.42	0.74	0.46	-0.06	0.11	0.07
17	1	0.08	-0.11	-0.32	0.08	-0.12	0.14	-0.31	0.47	-0.58
18	3	0.00	0.00	0.01	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00

	46	47	48
	A	A	A
Frequencies --	3184.0824	3204.1101	3213.5546
Red. masses --	1.0915	1.0950	1.1020
Frc consts --	6.5200	6.6233	6.7052
IR Inten --	14.1681	15.3116	10.2625

Atom	AN	X	Y	Z	X	Y	Z	X	Y	Z
1	13	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
2	13	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
3	13	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
4	13	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
5	3	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
6	3	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
7	3	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
8	6	0.04	-0.06	0.01	0.00	-0.01	0.01	-0.03	0.03	-0.01
9	6	0.00	0.00	-0.02	-0.01	0.01	-0.05	-0.01	0.01	-0.06
10	6	-0.01	0.01	0.01	0.02	-0.02	-0.06	-0.01	0.02	0.04
11	1	-0.48	0.64	-0.12	-0.05	0.06	-0.02	0.27	-0.36	0.07
12	6	0.01	-0.01	-0.01	0.00	0.00	0.00	0.01	-0.01	0.00
13	1	0.03	-0.04	0.26	0.06	-0.08	0.62	0.07	-0.08	0.69
14	6	0.02	-0.02	0.03	-0.01	0.01	-0.01	0.01	-0.01	0.01
15	1	0.05	-0.07	-0.15	-0.19	0.27	0.66	0.12	-0.18	-0.44
16	1	-0.06	0.10	0.06	-0.02	0.04	0.02	-0.05	0.09	0.05
17	1	-0.18	0.27	-0.33	0.09	-0.14	0.16	-0.07	0.10	-0.12
18	3	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00

$CpLiAl_4Li_3^- \rightarrow CpLi + Al_4Li_3^-$ **26.22035896**

$CpLiAl_4Li_3^- \rightarrow Cp^- + Al_4Li_4$ **65.4570847**



Charge = -1 Multiplicity = 1

Al,0,-2.402027964,0.9211592383,-1.2266684437

Al,0,-0.9675404739,1.6225483459,0.969892585
Al,0,-0.9670249147,-0.7258643014,1.7773647862
Al,0,-2.4390535494,-1.5185337017,-0.3808492501
Li,0,-4.63551245,-0.4763424908,-1.4028911319
Li,0,-3.4418829722,0.4598820944,1.3870874899
Li,0,0.0641701482,-0.4495499107,-0.9372719343
Li,0,1.7069737606,0.3079728437,0.8548917939
C,0,3.091438031,-1.2605038685,-0.0322036192
C,0,2.4092407531,-0.696748398,-1.1441989936
C,0,3.8152382141,-0.2276200139,0.6019239726
H,0,3.0630352322,-2.2997659784,0.2685632735
C,0,2.7180189857,0.6894742198,-1.191760406
H,0,1.8874431306,-1.2645176875,-1.9132337738
C,0,3.5791715147,0.9793490544,-0.1107031606
H,0,4.4415463616,-0.3380926922,1.4794606592
H,0,2.363037187,1.3992928371,-1.9285824282
H,0,3.9904314693,1.9526650666,0.1275364941

State=1-A\HF=-1193.6029458

		1			2			3		
		A			A			A		
Frequencies --		7.2150			51.5531			63.4295		
Red. masses --		4.0194			8.5000			7.8023		
Frc consts --		0.0001			0.0133			0.0185		
IR Inten --		0.0264			0.1974			0.6898		
Atom	AN	X	Y	Z	X	Y	Z	X	Y	Z
1	13	-0.04	0.03	0.07	-0.21	-0.06	-0.08	0.12	0.02	0.00
2	13	-0.01	0.08	-0.02	-0.11	-0.01	-0.09	-0.04	-0.08	-0.07
3	13	0.01	-0.02	-0.06	0.12	0.08	-0.05	-0.05	-0.14	-0.09
4	13	-0.01	-0.07	0.03	0.19	0.10	-0.01	0.19	-0.05	0.00
5	3	-0.03	-0.06	0.09	-0.03	-0.13	0.26	0.31	0.35	0.23
6	3	0.00	0.00	-0.03	0.00	-0.09	0.21	-0.07	0.13	0.03
7	3	-0.02	0.00	0.04	0.01	0.18	-0.47	0.05	0.02	-0.25
8	3	0.00	0.03	-0.03	0.00	0.03	-0.11	-0.02	-0.15	0.17
9	6	-0.11	0.14	0.03	-0.12	-0.14	0.07	-0.05	0.17	0.08
10	6	0.00	0.11	-0.18	-0.02	-0.06	0.09	-0.15	0.07	0.01
11	6	-0.04	-0.03	0.18	-0.04	-0.08	0.09	-0.04	0.13	0.11
12	1	-0.23	0.27	0.07	-0.25	-0.22	0.03	0.02	0.26	0.11
13	6	0.14	-0.08	-0.16	0.11	0.04	0.13	-0.22	-0.03	-0.01
14	1	0.00	0.23	-0.33	-0.07	-0.11	0.11	-0.20	0.07	-0.03
15	6	0.12	-0.16	0.06	0.10	0.02	0.13	-0.15	0.01	0.05
16	1	-0.10	-0.05	0.35	-0.09	-0.11	0.07	0.04	0.20	0.16
17	1	0.24	-0.16	-0.29	0.23	0.12	0.16	-0.30	-0.12	-0.06
18	1	0.21	-0.31	0.13	0.19	0.09	0.15	-0.17	-0.04	0.05

		4			5			6		
		A			A			A		
Frequencies --		72.5733			91.1807			103.8520		
Red. masses --		5.8138			8.8056			7.6096		
Frc consts --		0.0180			0.0431			0.0484		
IR Inten --		1.1810			0.1766			0.3963		
Atom	AN	X	Y	Z	X	Y	Z	X	Y	Z
1	13	0.10	-0.07	-0.01	-0.07	0.02	0.03	0.15	0.04	0.04
2	13	-0.08	-0.13	-0.03	0.15	-0.03	0.18	0.13	0.02	0.03
3	13	0.01	-0.02	0.01	-0.20	-0.11	0.14	0.12	0.05	0.04
4	13	0.00	0.02	0.03	0.04	-0.04	0.01	0.12	0.03	0.03
5	3	0.16	0.26	-0.01	0.01	0.02	0.11	-0.04	-0.32	-0.15
6	3	-0.06	0.04	0.08	-0.02	0.22	-0.54	0.18	-0.02	-0.09
7	3	-0.02	-0.13	0.31	0.00	0.11	-0.44	0.05	0.12	0.01
8	3	-0.02	0.16	-0.34	0.05	0.05	-0.17	-0.22	0.01	-0.09
9	6	-0.20	-0.06	-0.05	-0.09	-0.06	-0.07	-0.27	-0.06	-0.03
10	6	-0.07	0.03	-0.03	-0.03	-0.01	-0.06	-0.13	0.03	-0.01
11	6	-0.09	0.00	0.00	0.01	0.01	-0.04	-0.32	-0.11	-0.04
12	1	-0.37	-0.16	-0.09	-0.19	-0.13	-0.10	-0.31	-0.08	-0.04
13	6	0.14	0.15	0.02	0.11	0.08	-0.02	-0.13	0.02	-0.01
14	1	-0.08	0.02	-0.04	-0.08	-0.05	-0.05	-0.06	0.07	0.00
15	6	0.13	0.14	0.04	0.13	0.10	-0.01	-0.23	-0.06	-0.03
16	1	-0.15	-0.04	0.00	-0.01	0.00	-0.05	-0.41	-0.18	-0.05
17	1	0.27	0.23	0.05	0.19	0.14	0.00	-0.05	0.07	0.00
18	1	0.27	0.22	0.08	0.22	0.16	0.01	-0.25	-0.09	-0.03

		7			8			9		
		A			A			A		
Frequencies --		120.9881			126.4441			140.1232		
Red. masses --		8.3402			13.3563			10.5504		
Frc consts --		0.0719			0.1258			0.1221		
IR Inten --		4.4705			0.4724			1.2721		
Atom	AN	X	Y	Z	X	Y	Z	X	Y	Z
1	13	0.10	0.13	0.05	0.21	0.06	0.23	0.10	0.13	-0.06
2	13	-0.12	-0.04	-0.02	-0.17	-0.17	-0.12	0.02	0.20	0.20
3	13	-0.13	-0.11	-0.03	0.11	0.21	0.03	0.05	-0.23	0.04
4	13	0.12	0.17	0.04	-0.23	-0.16	0.13	-0.13	-0.07	-0.14
5	3	-0.25	-0.54	-0.20	-0.04	0.05	-0.36	0.04	0.15	-0.10
6	3	-0.06	0.05	0.10	-0.02	0.03	-0.07	0.02	-0.28	0.64
7	3	0.09	-0.29	-0.02	0.00	0.22	-0.65	-0.02	0.07	-0.34
8	3	0.13	-0.14	-0.10	0.06	-0.04	0.00	0.02	-0.01	-0.08
9	6	-0.01	0.03	0.01	0.01	-0.02	0.00	-0.10	-0.06	-0.05
10	6	-0.10	-0.05	-0.04	-0.01	-0.04	-0.01	-0.07	-0.04	-0.05
11	6	0.13	0.12	0.05	0.07	0.02	0.01	-0.02	0.00	-0.03
12	1	-0.03	0.03	0.00	-0.02	-0.04	-0.01	-0.18	-0.11	-0.07

13	6	-0.03	-0.01	-0.02	0.03	-0.01	0.00	0.03	0.03	-0.02
14	1	-0.21	-0.10	-0.07	-0.09	-0.09	-0.01	-0.13	-0.08	-0.05
15	6	0.12	0.09	0.04	0.07	0.02	0.02	0.06	0.05	-0.01
16	1	0.24	0.20	0.09	0.10	0.05	0.02	-0.01	0.00	-0.02
17	1	-0.07	-0.05	-0.04	0.04	0.00	0.01	0.08	0.06	-0.01
18	1	0.22	0.15	0.07	0.12	0.06	0.03	0.14	0.10	0.01

	10	11	12
	A	A	A
Frequencies --	153.1545	156.8147	205.4662
Red. masses --	6.7067	10.8853	13.2418
Frc consts --	0.0927	0.1577	0.3294
IR Inten --	0.9556	1.1589	6.7288

Atom	AN	X	Y	Z	X	Y	Z	X	Y	Z
1	13	-0.05	-0.13	0.04	-0.06	0.25	-0.07	0.09	0.15	-0.01
2	13	0.18	0.11	-0.04	-0.14	-0.06	0.10	0.25	-0.17	-0.13
3	13	0.02	0.10	-0.03	0.26	0.09	0.16	-0.28	0.26	0.02
4	13	-0.05	0.10	0.13	0.01	-0.12	-0.21	-0.05	-0.13	-0.11
5	3	0.06	0.21	-0.04	0.03	0.01	0.28	0.01	-0.24	0.59
6	3	0.11	-0.07	0.02	0.07	0.07	-0.31	-0.01	-0.20	0.43
7	3	-0.04	-0.22	-0.05	-0.02	-0.25	0.18	-0.01	0.02	0.06
8	3	0.11	-0.15	-0.08	0.09	-0.10	-0.09	0.00	-0.01	0.03
9	6	-0.10	-0.06	-0.03	-0.05	-0.04	0.00	-0.05	-0.03	-0.03
10	6	-0.25	-0.18	-0.09	-0.18	-0.14	-0.05	-0.04	-0.03	-0.04
11	6	0.10	0.07	0.03	0.09	0.06	0.05	0.01	0.01	-0.02
12	1	-0.14	-0.08	-0.04	-0.07	-0.04	0.00	-0.08	-0.06	-0.04
13	6	-0.15	-0.12	-0.06	-0.13	-0.11	-0.03	0.02	0.02	-0.02
14	1	-0.42	-0.27	-0.12	-0.30	-0.20	-0.07	-0.06	-0.04	-0.04
15	6	0.07	0.04	0.01	0.05	0.02	0.03	0.05	0.04	-0.01
16	1	0.25	0.19	0.08	0.21	0.15	0.09	0.01	0.01	-0.02
17	1	-0.25	-0.19	-0.09	-0.22	-0.17	-0.06	0.04	0.03	-0.01
18	1	0.19	0.12	0.05	0.13	0.07	0.05	0.09	0.07	0.00

	13	14	15
	A	A	A
Frequencies --	224.7118	229.3598	239.2811
Red. masses --	14.0913	6.7413	8.2125
Frc consts --	0.4192	0.2089	0.2770
IR Inten --	16.7610	6.6833	2.1452

Atom	AN	X	Y	Z	X	Y	Z	X	Y	Z
1	13	0.14	-0.22	-0.17	0.02	0.04	-0.03	-0.07	-0.01	-0.03
2	13	-0.15	0.25	0.15	0.04	-0.08	-0.01	0.15	-0.06	-0.01
3	13	-0.12	0.24	0.04	0.05	-0.10	-0.05	0.14	-0.02	-0.03
4	13	0.16	-0.26	0.00	0.01	0.03	0.04	-0.10	-0.03	0.01
5	3	0.26	-0.29	-0.18	-0.07	-0.07	0.01	-0.11	-0.10	0.01
6	3	-0.44	0.25	0.07	-0.02	0.22	0.06	-0.35	0.76	0.30

7	3	0.05	0.17	0.09	-0.36	0.49	0.16	0.08	-0.23	-0.09
8	3	-0.02	-0.02	-0.02	-0.09	0.39	0.19	0.05	-0.11	-0.05
9	6	-0.01	-0.02	-0.01	0.01	-0.08	-0.03	-0.02	0.02	0.01
10	6	-0.08	-0.08	-0.03	-0.13	-0.17	-0.07	0.04	0.05	0.02
11	6	0.08	0.04	0.02	0.13	0.02	0.00	-0.06	-0.02	-0.01
12	1	-0.01	-0.03	-0.01	-0.01	-0.10	-0.04	-0.01	0.02	0.01
13	6	-0.04	-0.05	-0.02	-0.05	-0.11	-0.05	0.00	0.03	0.01
14	1	-0.12	-0.10	-0.04	-0.20	-0.22	-0.07	0.05	0.06	0.02
15	6	0.06	0.02	0.01	0.10	0.00	0.00	-0.05	-0.01	0.00
16	1	0.16	0.10	0.04	0.20	0.08	0.02	-0.09	-0.04	-0.01
17	1	-0.08	-0.09	-0.04	-0.13	-0.17	-0.07	0.03	0.05	0.02
18	1	0.12	0.06	0.03	0.14	0.03	0.01	-0.07	-0.02	-0.01

	16	17	18
	A	A	A
Frequencies --	249.4789	283.2368	296.5944
Red. masses --	12.1595	16.7324	5.9459
Frc consts --	0.4459	0.7909	0.3082
IR Inten --	7.6849	4.4376	0.2131

Atom	AN	X	Y	Z	X	Y	Z	X	Y	Z
1	13	0.28	-0.18	-0.11	0.04	-0.24	0.43	0.01	-0.02	0.01
2	13	-0.10	0.10	0.02	0.02	0.05	-0.05	-0.03	0.02	-0.01
3	13	0.07	-0.06	-0.03	0.01	-0.01	0.07	0.03	0.00	0.00
4	13	-0.26	0.19	0.02	0.05	0.11	-0.48	0.01	0.01	-0.01
5	3	-0.01	-0.28	0.75	-0.36	0.13	0.05	0.00	0.00	0.01
6	3	0.01	0.04	-0.26	-0.29	0.07	0.03	-0.01	0.02	-0.05
7	3	0.01	0.00	-0.14	0.25	0.34	0.13	-0.03	-0.06	0.05
8	3	0.01	-0.01	-0.04	-0.03	-0.10	-0.09	0.00	-0.30	0.69
9	6	0.02	0.02	0.01	-0.01	-0.01	0.00	-0.15	-0.08	-0.11
10	6	0.02	0.02	0.01	-0.05	-0.05	-0.02	-0.04	0.01	-0.09
11	6	0.00	0.00	0.01	0.05	0.03	0.02	-0.06	-0.01	-0.09
12	1	0.05	0.04	0.02	-0.01	-0.01	0.00	-0.26	-0.15	-0.13
13	6	-0.01	-0.01	0.01	-0.04	-0.03	-0.01	0.15	0.13	-0.03
14	1	0.03	0.02	0.01	-0.03	-0.04	-0.01	-0.04	0.00	-0.08
15	6	-0.02	-0.02	0.00	0.03	0.02	0.01	0.10	0.11	-0.04
16	1	0.00	0.00	0.01	0.11	0.08	0.04	-0.09	-0.04	-0.11
17	1	-0.02	-0.01	0.00	-0.06	-0.06	-0.03	0.24	0.20	-0.01
18	1	-0.04	-0.03	0.00	0.07	0.04	0.02	0.17	0.17	-0.02

	19	20	21
	A	A	A
Frequencies --	309.5989	340.3059	348.0786
Red. masses --	7.3039	8.4562	19.7501
Frc consts --	0.4125	0.5770	1.4099
IR Inten --	6.8148	5.8733	2.7124

Atom	AN	X	Y	Z	X	Y	Z	X	Y	Z

1	13	-0.06	0.04	-0.08	-0.03	-0.08	0.04	-0.07	-0.03	0.16
2	13	-0.01	-0.04	0.00	-0.09	0.06	-0.12	-0.04	-0.21	0.49
3	13	-0.01	-0.04	-0.03	-0.09	-0.03	0.13	-0.02	0.17	-0.51
4	13	-0.07	-0.02	0.09	-0.04	-0.03	-0.09	-0.07	0.09	-0.14
5	3	-0.02	0.01	0.01	0.25	-0.13	-0.04	0.44	-0.18	-0.04
6	3	0.15	0.05	0.01	0.78	0.45	0.18	0.32	0.10	0.04
7	3	0.35	0.56	0.25	-0.03	-0.06	-0.02	0.09	-0.04	-0.02
8	3	0.02	-0.58	-0.21	-0.02	0.05	0.02	0.01	0.08	0.04
9	6	-0.03	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	-0.01	-0.01	0.00
10	6	-0.02	0.00	-0.01	0.00	0.00	0.00	-0.01	-0.01	0.00
11	6	0.03	0.04	0.02	0.00	0.00	0.00	-0.01	0.00	0.00
12	1	-0.02	0.02	0.00	0.00	0.00	0.00	-0.02	-0.01	0.00
13	6	-0.01	0.01	0.00	0.00	0.00	0.00	-0.01	0.00	0.00
14	1	0.07	0.05	0.02	-0.01	-0.01	0.00	-0.01	-0.01	0.00
15	6	0.03	0.04	0.01	0.00	0.00	0.00	-0.01	0.00	0.00
16	1	0.11	0.10	0.04	0.00	0.00	0.00	-0.02	-0.01	0.00
17	1	0.01	0.02	-0.01	0.00	0.00	0.00	-0.01	-0.01	-0.01
18	1	0.10	0.09	0.03	0.00	0.00	0.00	-0.01	-0.01	0.00

	22	23	24
	A	A	A
Frequencies --	371.1482	384.9991	478.4840
Red. masses --	8.3325	7.1920	5.9711
Frc consts --	0.6763	0.6281	0.8055
IR Inten --	6.0829	141.3362	71.9573

Atom	AN	X	Y	Z	X	Y	Z	X	Y	Z
1	13	-0.09	0.06	0.09	-0.05	0.02	-0.03	0.00	0.00	0.00
2	13	0.04	0.01	-0.11	-0.01	-0.01	-0.04	-0.02	0.00	-0.01
3	13	0.04	-0.06	0.09	-0.01	-0.03	0.02	-0.02	0.00	0.01
4	13	-0.09	0.11	-0.04	-0.06	0.00	0.03	0.00	0.00	0.00
5	3	0.81	-0.33	-0.10	0.07	-0.02	0.00	0.00	-0.01	0.00
6	3	-0.34	-0.13	-0.05	-0.05	-0.04	-0.02	-0.01	0.00	0.00
7	3	-0.11	0.09	0.03	0.81	-0.03	-0.01	-0.03	0.13	0.06
8	3	-0.01	-0.09	-0.05	-0.05	0.47	0.22	0.85	0.11	0.04
9	6	0.01	0.00	0.00	-0.04	-0.04	-0.01	-0.09	-0.03	-0.01
10	6	0.01	0.01	0.00	-0.08	-0.07	-0.03	0.02	0.04	0.01
11	6	0.00	0.00	0.00	0.01	0.01	0.00	-0.09	-0.05	-0.01
12	1	0.02	0.01	0.00	-0.09	-0.07	-0.03	-0.20	-0.09	-0.03
13	6	0.01	0.00	0.00	-0.05	-0.04	-0.04	-0.06	-0.01	0.00
14	1	0.02	0.01	0.01	-0.03	-0.04	-0.02	-0.08	-0.02	0.00
15	6	0.00	0.00	0.00	0.02	0.01	0.00	-0.09	-0.04	-0.02
16	1	0.01	0.01	0.00	-0.03	-0.01	-0.01	-0.22	-0.14	-0.04
17	1	0.01	0.01	0.00	-0.07	-0.07	-0.05	-0.14	-0.06	-0.02
18	1	0.00	0.01	0.00	-0.01	-0.02	0.00	-0.21	-0.11	-0.06

	25	26	27

		A			A			A		
Frequencies --		625.1785			636.0676			730.4484		
Red. masses --		5.0352			4.1974			1.2682		
Frc consts --		1.1595			1.0006			0.3987		
IR Inten --		16.3884			0.2984			8.0028		
Atom	AN	X	Y	Z	X	Y	Z	X	Y	Z
1	13	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
2	13	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
3	13	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
4	13	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
5	3	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
6	3	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
7	3	-0.03	-0.01	-0.01	0.01	0.01	0.00	-0.01	0.00	-0.01
8	3	-0.07	0.01	0.03	0.02	-0.02	0.01	0.00	0.00	-0.01
9	6	-0.19	-0.14	-0.04	0.18	0.14	0.04	-0.08	-0.06	-0.03
10	6	0.34	0.22	0.08	-0.05	-0.04	0.00	-0.02	0.00	0.00
11	6	0.04	0.03	-0.01	-0.26	-0.21	-0.08	-0.01	-0.02	0.00
12	1	-0.37	-0.26	-0.09	0.31	0.24	0.08	0.41	0.30	0.10
13	6	-0.26	-0.17	-0.08	-0.11	-0.08	-0.04	0.06	0.04	0.01
14	1	0.16	0.12	0.03	-0.07	-0.02	-0.04	0.20	0.09	0.08
15	6	0.15	0.09	0.05	0.23	0.18	0.08	0.07	0.05	0.02
16	1	0.09	0.06	-0.01	-0.40	-0.31	-0.12	0.12	0.08	0.04
17	1	-0.40	-0.27	-0.12	-0.20	-0.14	-0.07	-0.43	-0.32	-0.15
18	1	0.28	0.18	0.08	0.34	0.28	0.10	-0.45	-0.32	-0.12

		28			29			30		
		A			A			A		
Frequencies --		741.2600			759.3498			849.4068		
Red. masses --		1.2572			1.1358			1.3699		
Frc consts --		0.4070			0.3859			0.5823		
IR Inten --		5.6721			435.9753			0.5867		
Atom	AN	X	Y	Z	X	Y	Z	X	Y	Z
1	13	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
2	13	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
3	13	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
4	13	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
5	3	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
6	3	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
7	3	0.02	0.01	0.01	0.01	0.01	0.01	0.00	0.00	-0.01
8	3	0.00	0.02	0.01	-0.04	-0.02	-0.01	0.00	0.00	0.00
9	6	-0.02	0.00	-0.01	0.05	0.03	0.02	0.04	0.05	-0.04
10	6	0.06	0.02	0.00	0.04	0.01	0.00	-0.09	0.04	0.05
11	6	-0.08	-0.06	-0.02	0.02	0.01	0.00	-0.01	-0.03	-0.02
12	1	0.17	0.16	0.05	-0.36	-0.24	-0.08	-0.31	-0.35	-0.18
13	6	0.04	0.04	0.01	0.04	0.05	0.00	0.07	-0.02	0.07

14	1	-0.44	-0.28	-0.04	-0.54	-0.33	-0.07	0.36	0.33	0.09	
15	6	-0.05	-0.04	-0.01	0.01	0.01	0.01	-0.01	-0.04	-0.03	
16	1	0.53	0.39	0.14	-0.24	-0.18	-0.07	0.12	0.08	0.14	
17	1	-0.15	-0.10	-0.05	-0.35	-0.24	-0.12	-0.36	-0.41	-0.14	
18	1	0.31	0.22	0.09	-0.25	-0.20	-0.07	0.20	0.26	-0.01	

	31	32	33
	A	A	A
Frequencies --	861.2978	862.3043	865.2718
Red. masses --	1.7766	2.0070	2.7181
Frc consts --	0.7765	0.8793	1.1990
IR Inten --	0.6558	0.8614	1.7379

Atom	AN	X	Y	Z	X	Y	Z	X	Y	Z
1	13	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
2	13	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
3	13	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
4	13	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
5	3	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
6	3	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
7	3	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.02	0.01	0.01
8	3	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	-0.01	0.00	0.00
9	6	-0.06	-0.04	0.10	-0.01	-0.03	-0.13	-0.07	0.07	-0.15
10	6	0.03	-0.04	0.02	-0.02	0.04	-0.04	-0.09	0.15	0.13
11	6	-0.03	0.16	0.00	0.15	-0.08	0.04	0.06	-0.01	-0.07
12	1	0.37	0.10	0.16	0.20	0.34	0.00	0.38	0.15	-0.12
13	6	0.08	-0.03	0.02	-0.03	0.10	-0.01	0.01	-0.15	0.15
14	1	-0.05	0.05	-0.17	0.01	-0.11	0.18	-0.54	-0.09	0.03
15	6	-0.01	-0.04	-0.13	-0.10	-0.03	0.13	0.10	-0.07	-0.06
16	1	-0.50	-0.19	-0.11	-0.33	-0.45	-0.14	-0.19	-0.15	0.22
17	1	-0.34	-0.17	0.07	-0.14	-0.16	-0.23	0.37	0.01	0.15
18	1	0.48	0.19	0.03	0.30	0.37	0.22	-0.19	0.05	-0.22

	34	35	36
	A	A	A
Frequencies --	1022.0039	1023.2874	1070.3461
Red. masses --	1.4614	1.4201	1.2445
Frc consts --	0.8993	0.8761	0.8400
IR Inten --	30.7661	11.0157	4.2483

Atom	AN	X	Y	Z	X	Y	Z	X	Y	Z
1	13	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
2	13	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
3	13	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
4	13	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
5	3	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
6	3	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
7	3	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00

8	3	0.01	0.00	0.00	0.00	0.00	0.01	0.00	0.00	0.00
9	6	0.03	-0.04	-0.02	-0.01	0.05	-0.08	0.05	-0.05	-0.05
10	6	-0.05	0.05	0.08	0.04	-0.07	0.04	-0.01	0.04	-0.06
11	6	-0.06	0.09	-0.03	-0.03	0.02	0.06	0.00	-0.02	0.04
12	1	0.34	-0.40	-0.12	-0.12	0.13	-0.07	0.34	-0.40	-0.15
13	6	0.00	0.02	-0.09	-0.04	0.06	-0.03	-0.05	0.06	0.03
14	1	-0.03	-0.12	0.32	0.20	-0.35	0.54	-0.11	0.25	-0.42
15	6	0.01	-0.04	0.07	0.05	-0.03	-0.08	0.01	-0.02	0.03
16	1	-0.04	0.10	-0.17	-0.15	-0.01	0.53	-0.05	-0.02	0.33
17	1	0.26	-0.13	-0.38	-0.19	0.18	0.17	-0.28	0.24	0.33
18	1	0.23	-0.41	0.24	0.17	-0.19	0.00	0.10	-0.22	0.11

	37	38	39
	A	A	A
Frequencies --	1073.1979	1142.3678	1284.8899
Red. masses --	1.2555	5.6008	1.2823
Frc consts --	0.8520	4.3063	1.2473
IR Inten --	0.6094	5.4345	0.0527

Atom	AN	X	Y	Z	X	Y	Z	X	Y	Z
1	13	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
2	13	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
3	13	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
4	13	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
5	3	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
6	3	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
7	3	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
8	3	0.00	0.00	0.00	-0.01	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
9	6	0.02	-0.05	0.02	-0.01	-0.09	0.26	0.04	-0.05	-0.02
10	6	0.02	0.00	0.00	-0.18	0.19	0.15	0.01	-0.04	0.07
11	6	-0.02	0.00	0.08	0.17	-0.24	0.03	0.02	0.01	-0.07
12	1	0.24	-0.27	-0.03	-0.05	0.02	0.33	-0.28	0.35	0.10
13	6	0.01	-0.01	-0.07	-0.09	0.19	-0.18	-0.03	0.03	0.05
14	1	-0.04	-0.05	0.01	-0.19	0.22	0.17	-0.08	0.22	-0.35
15	6	-0.04	0.07	-0.03	0.11	-0.06	-0.27	-0.03	0.05	-0.03
16	1	-0.13	-0.03	0.54	0.24	-0.25	-0.09	-0.10	-0.02	0.43
17	1	0.24	-0.13	-0.32	-0.12	0.29	-0.11	0.24	-0.19	-0.34
18	1	-0.29	0.47	-0.23	0.20	-0.14	-0.25	0.20	-0.35	0.16

	40	41	42
	A	A	A
Frequencies --	1378.8782	1384.7054	1464.8758
Red. masses --	4.6918	4.9480	2.4676
Frc consts --	5.2558	5.5898	3.1197
IR Inten --	0.6673	0.9907	4.7499

Atom	AN	X	Y	Z	X	Y	Z	X	Y	Z
1	13	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00

2	13	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
3	13	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
4	13	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
5	3	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
6	3	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
7	3	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
8	3	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	-0.01	0.00	0.00
9	6	0.14	-0.14	-0.16	-0.16	0.22	-0.06	-0.11	0.15	0.00
10	6	-0.06	0.12	0.03	0.05	-0.18	0.31	0.07	-0.08	-0.06
11	6	-0.06	-0.03	0.32	0.10	-0.10	-0.02	0.04	-0.09	0.12
12	1	-0.18	0.30	-0.04	0.22	-0.22	-0.19	0.32	-0.39	-0.16
13	6	0.12	-0.18	-0.03	0.13	-0.07	-0.27	-0.08	0.06	0.16
14	1	-0.17	-0.02	0.11	-0.12	0.28	-0.44	0.10	-0.09	-0.09
15	6	-0.13	0.24	-0.16	-0.12	0.12	0.06	-0.01	0.06	-0.14
16	1	0.11	0.01	-0.44	0.08	-0.12	0.00	0.15	-0.09	-0.32
17	1	-0.05	0.01	0.28	-0.24	0.24	0.24	0.30	-0.27	-0.38
18	1	0.24	-0.38	0.13	0.01	-0.06	0.17	0.20	-0.28	0.00

	43	44	45
	A	A	A
Frequencies --	1469.7469	3126.6550	3180.2925
Red. masses --	2.6566	1.0903	1.0870
Frc consts --	3.3812	6.2800	6.4777
IR Inten --	0.0813	4.8794	4.5725

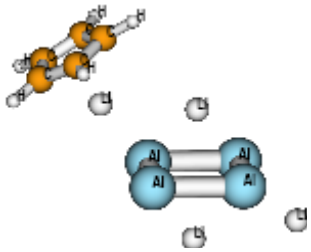
Atom	AN	X	Y	Z	X	Y	Z	X	Y	Z
1	13	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
2	13	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
3	13	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
4	13	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
5	3	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
6	3	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
7	3	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
8	3	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
9	6	0.05	-0.03	-0.14	0.00	0.00	-0.01	0.00	-0.01	0.02
10	6	0.02	-0.09	0.15	-0.04	0.06	0.05	0.00	0.00	0.00
11	6	-0.09	0.07	0.16	0.00	0.00	0.00	-0.04	0.05	-0.01
12	1	-0.12	0.21	-0.10	-0.01	-0.03	0.10	0.01	0.08	-0.24
13	6	-0.07	0.12	-0.03	0.00	-0.01	0.00	0.01	-0.01	0.01
14	1	-0.09	0.27	-0.42	0.47	-0.68	-0.53	0.00	0.00	0.00
15	6	0.12	-0.15	-0.01	0.00	0.00	0.00	0.02	-0.01	-0.04
16	1	0.05	0.12	-0.46	0.00	0.00	0.00	0.44	-0.62	0.06
17	1	0.04	0.03	-0.23	-0.04	0.09	-0.07	-0.07	0.16	-0.15
18	1	-0.19	0.35	-0.28	0.00	0.00	0.00	-0.22	0.11	0.49

	46	47	48
	A	A	A

Frequencies --		3193.6344			3206.3923			3214.7740		
Red. masses --		1.0922			1.0962			1.1023		
Frc consts --		6.5630			6.6400			6.7121		
IR Inten --		21.8886			15.0280			7.4966		
Atom	AN	X	Y	Z	X	Y	Z	X	Y	Z
1	13	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
2	13	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
3	13	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
4	13	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
5	3	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
6	3	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
7	3	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
8	3	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
9	6	0.00	0.01	-0.02	0.00	0.02	-0.05	0.00	0.02	-0.06
10	6	0.01	-0.01	-0.01	0.00	0.00	0.00	0.01	-0.01	-0.01
11	6	0.03	-0.04	0.01	0.00	0.00	0.00	-0.02	0.03	0.00
12	1	-0.01	-0.08	0.24	-0.02	-0.18	0.56	-0.03	-0.21	0.68
13	6	0.02	-0.04	0.04	-0.02	0.04	-0.04	0.01	-0.02	0.02
14	1	-0.05	0.07	0.06	0.00	0.00	-0.01	-0.06	0.08	0.06
15	6	0.02	-0.01	-0.04	0.02	-0.01	-0.04	-0.01	0.01	0.03
16	1	-0.28	0.40	-0.05	0.02	-0.02	0.00	0.24	-0.34	0.03
17	1	-0.20	0.43	-0.40	0.20	-0.45	0.41	-0.12	0.26	-0.23
18	1	-0.21	0.10	0.48	-0.19	0.10	0.44	0.16	-0.08	-0.37

$CpLiAl_4Li_3^- \rightarrow CpLi + Al_4Li_3^-$ **-25.53555784**

$CpLiAl_4Li_3^- \rightarrow Cp^- + Al_4Li_4$ **-62.6947251**



Charge = -1 Multiplicity = 1

Al,0,-0.749541077,0.89866365,1.2410583601

Al,0,1.0776721931,-1.1393970069,1.2910176743

Al,0,1.0464257654,-1.2763897015,-1.195505821

Al,0,-0.7716831393,0.7631287508,-1.3302023277

Li,0,-3.0514491846,1.0563229954,-0.0321060064

Li,0,-1.3759845378,-1.6208866241,0.1070667708

Li,0,1.6766254264,1.233458531,-0.0869586022

C,0,5.5546321561,-0.334980343,-1.2666374589

C,0,5.4023461765,0.7094254636,-0.3193308134

C,0,5.7873155637,-1.5387863852,-0.5569152086
H,0,5.4953587425,-0.2309592223,-2.3431622816
C,0,5.544234106,0.1500244306,0.9762932956
H,0,5.2403602567,1.7569339392,-0.5477519492
C,0,5.7806146478,-1.2383384187,0.8291060753
H,0,5.9389074199,-2.5172513219,-0.9967186188
H,0,5.4790301487,0.6875256523,1.9144883589
H,0,5.9244976975,-1.9480865254,1.6348235036
Li,0,3.7944743184,-0.7978354537,-0.0101257708

State=1-A\HF=-1193.598357

		1			2			3		
		A			A			A		
Frequencies --		-23.2704			11.5057			36.5072		
Red. masses --		7.5567			4.2996			7.5236		
Frc consts --		0.0024			0.0003			0.0059		
IR Inten --		3.9307			0.0225			0.1080		
Atom	AN	X	Y	Z	X	Y	Z	X	Y	Z
1	13	0.15	0.00	-0.06	0.02	0.05	0.07	0.16	0.01	-0.09
2	13	-0.04	0.00	0.15	0.01	-0.07	0.07	0.11	-0.11	-0.06
3	13	-0.03	0.01	0.16	-0.02	-0.07	-0.06	-0.11	-0.11	0.07
4	13	0.16	0.00	-0.06	-0.01	0.05	-0.07	-0.16	0.01	0.08
5	3	0.14	-0.01	-0.29	0.00	0.08	-0.01	0.00	0.30	-0.01
6	3	-0.11	0.00	-0.09	0.00	-0.08	0.00	0.00	0.16	0.00
7	3	0.24	-0.01	0.16	0.01	0.05	0.01	0.01	-0.34	0.01
8	6	-0.17	0.00	-0.08	0.08	-0.02	0.18	0.18	0.10	-0.09
9	6	-0.31	0.01	-0.02	0.00	-0.19	0.03	0.03	0.12	-0.02
10	6	0.03	-0.01	-0.13	0.05	0.19	0.08	0.08	0.07	-0.04
11	1	-0.21	0.00	-0.07	0.16	-0.05	0.34	0.35	0.10	-0.17
12	6	-0.19	0.01	-0.05	-0.09	-0.08	-0.16	-0.16	0.11	0.08
13	1	-0.46	0.02	0.02	0.01	-0.37	0.06	0.05	0.15	-0.03
14	6	0.02	-0.01	-0.12	-0.06	0.15	-0.13	-0.13	0.08	0.06
15	1	0.18	-0.03	-0.19	0.09	0.35	0.15	0.16	0.05	-0.08
16	1	-0.25	0.01	-0.02	-0.16	-0.17	-0.31	-0.32	0.12	0.15
17	1	0.15	-0.02	-0.15	-0.12	0.28	-0.25	-0.25	0.06	0.12
18	3	-0.02	0.02	0.23	0.00	-0.04	0.01	0.00	-0.21	0.00

	4	5	6
	A	A	A
Frequencies --	77.5699	81.8257	99.6995
Red. masses --	4.9841	8.3405	9.4703
Frc consts --	0.0177	0.0329	0.0555
IR Inten --	0.8143	1.4495	0.0146

Atom	AN	X	Y	Z	X	Y	Z	X	Y	Z
1	13	-0.07	0.01	-0.01	0.09	0.00	-0.01	0.12	0.02	0.03
2	13	-0.04	0.10	0.02	0.16	0.02	-0.11	-0.16	0.14	0.02
3	13	0.01	0.10	0.01	0.16	0.01	-0.11	0.16	0.14	-0.03
4	13	0.06	0.01	0.01	0.11	0.01	-0.01	-0.12	0.02	-0.02
5	3	0.00	-0.13	-0.05	0.07	-0.02	0.33	0.00	0.21	-0.01
6	3	-0.03	-0.08	-0.01	0.25	-0.01	0.06	0.00	-0.70	0.00
7	3	-0.01	0.22	0.01	0.07	0.03	-0.12	0.00	-0.58	0.01
8	6	0.25	-0.06	-0.08	-0.19	-0.01	0.06	0.01	-0.02	0.00
9	6	0.06	-0.05	-0.02	-0.19	-0.01	0.06	0.00	-0.01	0.00
10	6	0.13	-0.05	-0.04	-0.25	-0.01	0.07	0.00	-0.02	0.00
11	1	0.47	-0.06	-0.15	-0.15	-0.01	0.05	0.01	-0.02	-0.01
12	6	-0.19	-0.05	0.06	-0.26	-0.01	0.08	-0.01	-0.02	0.00
13	1	0.08	-0.05	-0.03	-0.15	-0.01	0.04	0.01	-0.01	0.00
14	6	-0.14	-0.05	0.04	-0.29	-0.01	0.09	-0.01	-0.02	0.00
15	1	0.23	-0.05	-0.08	-0.27	-0.01	0.08	0.00	-0.02	0.00
16	1	-0.38	-0.05	0.12	-0.28	-0.01	0.08	-0.01	-0.01	0.01
17	1	-0.30	-0.05	0.09	-0.36	0.00	0.11	-0.01	-0.02	0.01
18	3	0.02	-0.38	0.00	-0.19	-0.07	0.01	0.00	-0.01	0.00

	7	8	9
	A	A	A
Frequencies --	101.8822	124.4786	131.7638
Red. masses --	5.8708	15.4306	6.7777
Frc consts --	0.0359	0.1409	0.0693
IR Inten --	6.1384	0.3249	0.6745

Atom	AN	X	Y	Z	X	Y	Z	X	Y	Z
1	13	0.04	0.01	0.10	-0.19	0.18	0.24	0.08	-0.01	-0.12
2	13	0.05	-0.01	0.05	0.09	-0.04	-0.28	-0.07	0.01	0.15
3	13	0.04	0.00	0.05	-0.09	-0.04	0.27	-0.07	0.00	0.14
4	13	0.04	-0.01	0.10	0.19	0.18	-0.24	0.08	0.00	-0.13
5	3	0.11	0.00	-0.56	0.00	-0.40	-0.01	-0.02	0.00	0.48
6	3	-0.05	0.00	-0.02	0.00	-0.03	0.01	-0.07	0.01	-0.05
7	3	-0.13	0.01	-0.06	0.01	-0.64	0.00	0.08	-0.02	0.11
8	6	-0.03	0.00	-0.04	0.02	0.00	-0.01	0.03	0.00	-0.06
9	6	0.14	0.00	-0.09	0.00	0.00	0.00	0.20	0.00	-0.12
10	6	-0.23	0.00	0.03	0.01	0.00	0.00	-0.18	0.00	0.01
11	1	-0.01	0.00	-0.04	0.05	0.00	-0.02	0.06	0.00	-0.07
12	6	0.04	0.00	-0.06	-0.02	0.00	0.01	0.10	0.00	-0.08
13	1	0.30	0.00	-0.14	0.01	0.01	0.00	0.40	-0.01	-0.17
14	6	-0.19	0.00	0.01	-0.01	0.00	0.01	-0.14	0.00	-0.01
15	1	-0.40	0.00	0.08	0.03	0.00	-0.01	-0.36	0.00	0.06
16	1	0.12	0.00	-0.09	-0.05	0.00	0.02	0.19	0.00	-0.11
17	1	-0.31	0.00	0.05	-0.03	0.00	0.01	-0.28	0.00	0.04
18	3	-0.11	0.01	-0.27	0.00	-0.02	0.00	-0.05	0.00	-0.23

		10			11			12		
		A			A			A		
Frequencies --		143.5130			157.5757			204.4581		
Red. masses --		11.4823			17.0885			13.3046		
Frc consts --		0.1393			0.2500			0.3277		
IR Inten --		0.2726			0.7611			6.7712		
Atom	AN	X	Y	Z	X	Y	Z	X	Y	Z
1	13	-0.03	-0.13	0.18	0.12	-0.23	0.25	0.01	0.07	-0.15
2	13	0.03	0.14	0.21	0.27	0.16	-0.15	0.31	0.08	0.19
3	13	-0.02	0.14	-0.22	-0.28	0.16	0.15	-0.30	0.07	-0.18
4	13	0.02	-0.14	-0.16	-0.11	-0.24	-0.25	-0.03	0.07	0.15
5	3	0.00	0.01	-0.03	0.00	0.33	0.00	0.00	-0.65	0.00
6	3	0.00	0.67	0.01	0.01	-0.40	0.01	0.01	-0.40	-0.01
7	3	0.00	-0.54	0.01	-0.01	0.46	-0.01	0.01	-0.22	0.02
8	6	0.04	-0.01	-0.01	-0.03	0.02	0.01	-0.05	0.02	0.02
9	6	0.00	-0.01	0.00	0.00	0.02	0.00	-0.01	0.02	0.00
10	6	0.02	-0.02	-0.01	-0.01	0.02	0.00	-0.03	0.02	0.01
11	1	0.09	-0.01	-0.03	-0.05	0.02	0.02	-0.10	0.02	0.03
12	6	-0.04	-0.01	0.02	0.03	0.01	-0.01	0.05	0.02	-0.02
13	1	0.01	-0.01	0.00	-0.01	0.01	0.00	-0.01	0.02	0.00
14	6	-0.03	-0.01	0.01	0.02	0.02	-0.01	0.03	0.02	-0.01
15	1	0.04	-0.02	-0.01	-0.02	0.02	0.01	-0.05	0.02	0.02
16	1	-0.08	-0.01	0.03	0.05	0.01	-0.02	0.09	0.02	-0.03
17	1	-0.06	-0.02	0.02	0.04	0.02	-0.01	0.07	0.02	-0.02
18	3	0.00	-0.04	0.00	0.00	0.01	0.00	0.00	-0.01	0.00

		13			14			15		
		A			A			A		
Frequencies --		218.5237			230.6546			243.7584		
Red. masses --		15.6748			7.7057			7.7750		
Frc consts --		0.4410			0.2415			0.2722		
IR Inten --		9.6332			8.2494			13.7467		
Atom	AN	X	Y	Z	X	Y	Z	X	Y	Z
1	13	-0.25	-0.08	-0.21	0.00	0.06	-0.01	-0.10	-0.04	0.07
2	13	0.26	0.05	0.19	0.12	-0.03	0.08	0.09	0.00	-0.06
3	13	0.27	-0.05	0.20	0.12	0.03	0.07	0.08	-0.01	-0.06
4	13	-0.24	0.07	-0.22	0.01	-0.06	-0.01	-0.07	0.03	0.08
5	3	-0.35	0.02	-0.26	-0.04	0.01	0.17	-0.07	0.03	0.05
6	3	0.49	0.01	0.02	-0.44	0.00	-0.56	-0.43	-0.01	-0.42
7	3	-0.08	0.01	0.33	-0.48	-0.01	-0.30	0.60	0.01	0.38
8	6	-0.02	0.00	0.01	-0.01	0.00	0.03	-0.01	0.00	-0.02
9	6	-0.03	0.00	0.01	-0.07	0.00	0.05	0.05	0.00	-0.04
10	6	-0.02	0.00	0.01	0.07	0.00	0.00	-0.08	0.00	0.00
11	1	-0.03	0.00	0.01	-0.03	0.00	0.03	0.00	0.00	-0.02
12	6	-0.03	0.00	0.01	-0.03	0.00	0.03	0.01	0.00	-0.03

13	1	-0.06	0.00	0.02	-0.16	0.00	0.07	0.13	0.00	-0.06
14	6	-0.02	0.00	0.01	0.05	0.00	0.01	-0.07	0.00	0.00
15	1	-0.02	0.00	0.01	0.13	0.00	-0.02	-0.13	0.00	0.02
16	1	-0.04	0.00	0.01	-0.07	0.00	0.05	0.04	0.00	-0.04
17	1	-0.03	0.00	0.01	0.10	0.00	-0.01	-0.11	0.00	0.01
18	3	0.04	0.00	-0.03	-0.02	0.00	-0.06	0.05	0.00	0.07

	16	17	18
	A	A	A
Frequencies --	250.1707	286.2624	325.5639
Red. masses --	12.2611	16.4026	8.3173
Frc consts --	0.4521	0.7919	0.5194
IR Inten --	5.5913	7.2768	29.0878

Atom	AN	X	Y	Z	X	Y	Z	X	Y	Z
1	13	-0.32	-0.04	-0.11	-0.07	0.47	-0.03	0.08	-0.08	-0.01
2	13	0.10	-0.01	0.05	0.00	-0.06	-0.03	0.00	0.13	-0.09
3	13	-0.11	-0.01	-0.05	0.00	0.06	-0.03	0.00	-0.13	-0.09
4	13	0.33	-0.04	0.11	-0.07	-0.48	-0.03	0.08	0.08	-0.01
5	3	0.00	0.79	-0.01	0.41	0.01	0.03	0.06	0.00	0.02
6	3	0.03	-0.25	0.03	0.25	0.00	-0.09	-0.20	0.00	0.08
7	3	-0.03	-0.19	-0.02	-0.05	0.01	0.53	-0.48	0.00	0.71
8	6	-0.02	0.01	0.01	-0.01	0.00	-0.01	0.00	0.00	0.02
9	6	0.00	0.01	0.00	0.01	0.00	-0.01	-0.06	0.00	0.04
10	6	0.00	0.01	0.00	-0.02	0.00	0.00	0.05	0.00	0.01
11	1	-0.03	0.01	0.01	-0.01	0.00	-0.01	-0.01	0.00	0.03
12	6	0.01	0.01	0.00	0.00	0.00	-0.01	-0.03	0.00	0.03
13	1	-0.01	0.01	0.00	0.00	0.00	-0.01	-0.16	0.00	0.07
14	6	0.01	0.01	0.00	-0.02	0.00	0.00	0.04	-0.01	0.01
15	1	-0.01	0.01	0.00	-0.04	0.00	0.01	0.09	0.00	0.00
16	1	0.03	0.01	-0.01	0.00	0.00	-0.01	-0.08	0.00	0.05
17	1	0.02	0.01	-0.01	-0.03	0.00	0.00	0.06	-0.01	0.01
18	3	0.00	-0.02	0.00	0.05	0.00	0.00	-0.02	0.03	-0.28

	19	20	21
	A	A	A
Frequencies --	330.4043	336.0915	345.5938
Red. masses --	5.8514	9.3181	10.6983
Frc consts --	0.3764	0.6201	0.7528
IR Inten --	0.0664	6.2227	0.6979

Atom	AN	X	Y	Z	X	Y	Z	X	Y	Z
1	13	0.00	0.00	-0.01	0.00	-0.04	0.08	0.04	0.12	-0.02
2	13	0.02	-0.01	0.01	-0.10	0.20	0.01	0.04	0.29	-0.01
3	13	-0.03	0.00	0.00	-0.10	-0.20	0.02	0.04	-0.29	0.00
4	13	0.00	0.00	0.01	0.00	0.04	0.08	0.04	-0.12	-0.01
5	3	0.00	0.00	0.00	0.16	0.00	0.04	-0.31	0.00	-0.03
6	3	0.02	-0.03	-0.01	0.60	0.00	-0.70	-0.26	0.00	0.24

7	3	0.02	0.00	-0.02	0.01	0.00	-0.06	-0.07	0.00	-0.18
8	6	0.18	-0.07	-0.05	0.00	0.00	0.00	0.02	0.00	-0.06
9	6	0.03	-0.08	-0.01	0.00	0.00	0.00	0.12	0.00	-0.09
10	6	0.08	-0.08	-0.03	0.01	0.00	0.00	-0.10	0.00	-0.02
11	1	0.31	-0.07	-0.09	0.00	0.00	0.00	0.04	0.00	-0.08
12	6	-0.17	-0.07	0.05	0.01	0.00	0.00	0.05	-0.01	-0.07
13	1	0.05	-0.09	-0.01	-0.01	0.00	0.01	0.20	0.00	-0.11
14	6	-0.12	-0.07	0.05	0.01	0.00	0.00	-0.09	0.00	-0.02
15	1	0.14	-0.09	-0.05	0.02	0.00	0.00	-0.15	-0.01	-0.01
16	1	-0.28	-0.07	0.08	0.01	0.00	0.00	0.09	-0.01	-0.09
17	1	-0.21	-0.08	0.08	0.03	0.00	-0.01	-0.12	0.01	-0.02
18	3	0.01	0.76	-0.02	-0.04	-0.02	-0.01	0.05	0.02	0.60

	22	23	24
	A	A	A
Frequencies --	353.3692	373.6087	489.6537
Red. masses --	7.7504	8.3618	5.5117
Frc consts --	0.5702	0.6877	0.7786
IR Inten --	33.3760	9.0271	145.7837

Atom	AN	X	Y	Z	X	Y	Z	X	Y	Z
1	13	0.00	0.10	0.00	-0.13	-0.06	-0.05	0.00	0.00	0.00
2	13	0.00	0.14	0.03	0.04	0.10	0.03	0.02	-0.01	0.00
3	13	0.00	-0.14	0.03	0.04	-0.10	0.03	0.02	0.01	0.00
4	13	0.00	-0.09	0.00	-0.13	0.06	-0.05	0.00	0.00	0.00
5	3	-0.20	0.00	-0.02	0.89	0.01	0.08	0.00	0.00	0.00
6	3	-0.12	0.00	0.16	-0.23	0.00	0.20	0.00	0.00	0.00
7	3	0.38	0.00	-0.22	0.05	0.00	-0.18	0.03	0.00	0.05
8	6	-0.01	0.00	0.07	0.00	0.00	0.00	0.06	0.00	-0.01
9	6	-0.14	0.00	0.10	0.00	0.00	0.00	0.04	0.00	0.00
10	6	0.12	0.01	0.02	0.00	0.00	0.00	0.08	0.00	-0.02
11	1	-0.04	0.00	0.09	0.00	0.00	0.00	0.23	0.00	-0.06
12	6	-0.05	0.01	0.08	0.00	0.00	0.00	0.06	0.00	0.00
13	1	-0.18	0.00	0.11	0.01	0.00	0.00	0.20	0.00	-0.05
14	6	0.10	0.00	0.03	0.00	0.00	0.00	0.07	-0.01	-0.02
15	1	0.16	0.01	0.01	0.00	0.00	0.00	0.24	0.00	-0.07
16	1	-0.09	0.01	0.10	0.00	0.00	0.00	0.21	0.00	-0.05
17	1	0.13	-0.01	0.02	0.00	0.00	0.00	0.24	-0.01	-0.06
18	3	-0.08	-0.02	-0.69	-0.01	0.00	0.01	-0.83	0.01	0.11

	25	26	27
	A	A	A
Frequencies --	631.7279	634.3354	726.6804
Red. masses --	4.5386	4.2726	1.2747
Frc consts --	1.0672	1.0129	0.3966
IR Inten --	0.8809	0.0022	7.9289

Atom	AN	X	Y	Z	X	Y	Z	X	Y	Z

1	13	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
2	13	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
3	13	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
4	13	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
5	3	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
6	3	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
7	3	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	-0.01	0.00	0.00
8	6	-0.27	-0.01	0.08	-0.19	-0.01	0.06	-0.09	0.00	0.03
9	6	0.36	0.00	-0.09	0.00	0.01	0.00	-0.06	0.00	0.01
10	6	0.10	0.01	-0.03	0.31	0.00	-0.12	0.01	0.00	0.00
11	1	-0.46	-0.01	0.13	-0.30	-0.01	0.11	0.53	-0.01	-0.17
12	6	-0.28	0.02	0.08	0.19	-0.01	-0.06	0.04	0.00	-0.01
13	1	0.43	0.00	-0.11	0.00	0.01	0.00	0.44	-0.01	-0.13
14	6	0.10	-0.01	-0.03	-0.31	0.01	0.11	0.09	0.00	-0.03
15	1	0.17	0.02	-0.05	0.48	-0.01	-0.17	-0.03	-0.01	0.01
16	1	-0.42	0.01	0.12	0.29	-0.02	-0.10	-0.32	0.00	0.10
17	1	0.18	-0.02	-0.04	-0.47	0.01	0.17	-0.56	0.01	0.17
18	3	-0.01	-0.01	-0.01	0.00	0.00	0.00	0.01	0.01	0.01

	28	29	30
	A	A	A
Frequencies --	728.1269	747.5806	847.0591
Red. masses --	1.2743	1.1369	1.1752
Frc consts --	0.3981	0.3743	0.4968
IR Inten --	8.9123	547.3722	0.0505

Atom	AN	X	Y	Z	X	Y	Z	X	Y	Z
1	13	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
2	13	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
3	13	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
4	13	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
5	3	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
6	3	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
7	3	0.01	0.00	0.00	0.01	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
8	6	-0.04	0.00	0.01	0.04	0.00	-0.01	-0.07	-0.01	0.02
9	6	0.07	0.00	-0.02	0.03	0.00	-0.01	0.07	0.00	0.00
10	6	-0.09	0.00	0.03	0.05	0.00	-0.01	0.03	0.00	-0.01
11	1	0.25	0.00	-0.08	-0.41	0.00	0.13	0.52	-0.02	-0.20
12	6	0.08	0.00	-0.03	0.04	0.00	-0.02	-0.06	0.01	0.01
13	1	-0.50	-0.01	0.15	-0.42	0.00	0.12	-0.55	0.01	0.18
14	6	-0.02	0.00	0.01	0.05	0.00	-0.01	0.02	-0.01	-0.01
15	1	0.57	-0.01	-0.18	-0.44	0.00	0.14	-0.26	0.03	0.09
16	1	-0.49	0.01	0.16	-0.41	0.01	0.13	0.45	-0.01	-0.18
17	1	0.10	-0.01	-0.03	-0.45	0.01	0.14	-0.14	-0.02	0.06
18	3	-0.01	0.00	-0.01	-0.06	0.00	0.02	0.00	0.00	0.00

	31	32	33

		A			A			A		
Frequencies --		854.0999			861.8340			863.4027		
Red. masses --		1.1892			4.4672			4.4365		
Frc consts --		0.5111			1.9549			1.9486		
IR Inten --		0.0720			0.0098			0.0196		
Atom	AN	X	Y	Z	X	Y	Z	X	Y	Z
1	13	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
2	13	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
3	13	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
4	13	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
5	3	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
6	3	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
7	3	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
8	6	0.04	-0.01	-0.02	0.04	0.12	0.12	0.02	-0.31	0.00
9	6	0.01	-0.01	0.01	0.01	0.12	0.05	0.07	0.03	0.32
10	6	-0.07	0.00	0.02	0.08	-0.18	0.22	-0.07	-0.01	-0.19
11	1	-0.30	0.00	0.07	-0.14	0.18	-0.31	-0.10	-0.28	-0.17
12	6	-0.05	0.01	0.02	-0.04	0.19	-0.18	0.02	0.23	-0.03
13	1	-0.05	-0.01	0.03	0.07	-0.38	0.13	0.20	0.14	0.26
14	6	0.07	0.00	-0.03	-0.09	-0.25	-0.21	-0.04	0.06	-0.10
15	1	0.54	0.01	-0.17	0.12	0.05	0.33	-0.01	0.38	0.00
16	1	0.40	0.00	-0.13	0.05	0.35	0.11	-0.21	0.06	-0.31
17	1	-0.59	0.00	0.19	-0.08	-0.22	-0.24	0.14	-0.29	0.23
18	3	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00

		34			35			36		
		A			A			A		
Frequencies --		1023.2223			1024.1584			1070.4721		
Red. masses --		1.4385			1.4506			1.2473		
Frc consts --		0.8873			0.8965			0.8421		
IR Inten --		14.5540			19.5784			0.1853		
Atom	AN	X	Y	Z	X	Y	Z	X	Y	Z
1	13	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
2	13	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
3	13	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
4	13	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
5	3	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
6	3	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
7	3	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
8	6	-0.01	-0.09	-0.04	0.01	-0.06	0.05	0.03	-0.01	0.09
9	6	0.00	0.07	0.01	-0.03	0.00	-0.11	0.01	0.07	0.00
10	6	0.03	0.00	0.09	-0.01	0.08	-0.04	-0.01	-0.07	-0.01
11	1	-0.08	-0.06	-0.27	0.17	-0.13	0.49	0.19	-0.08	0.59
12	6	0.01	-0.09	0.05	0.01	0.04	0.05	-0.02	0.01	-0.04
13	1	-0.02	0.63	-0.08	-0.05	0.11	-0.13	-0.03	0.49	-0.06

14	6	-0.02	0.01	-0.07	-0.02	-0.09	-0.04	-0.01	0.00	-0.03
15	1	0.09	0.32	0.24	0.04	0.44	0.13	-0.06	-0.47	-0.20
16	1	0.02	-0.08	0.09	0.17	0.29	0.49	-0.05	-0.07	-0.21
17	1	-0.13	0.34	-0.40	0.03	-0.26	0.12	-0.05	0.08	-0.10
18	3	0.00	0.01	0.00	0.00	0.00	0.01	0.00	0.00	0.00

	37	38	39
	A	A	A
Frequencies --	1071.4860	1142.4064	1285.1960
Red. masses --	1.2477	5.8478	1.2807
Frc consts --	0.8440	4.4966	1.2464
IR Inten --	0.1433	3.2480	0.0008

Atom	AN	X	Y	Z	X	Y	Z	X	Y	Z
1	13	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
2	13	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
3	13	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
4	13	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
5	3	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
6	3	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
7	3	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
8	6	0.01	0.04	0.00	0.02	0.29	0.04	-0.02	0.01	-0.07
9	6	-0.01	0.04	-0.03	0.09	0.05	0.28	0.00	0.07	-0.01
10	6	0.01	0.04	0.04	-0.08	0.13	-0.26	-0.01	-0.06	-0.03
11	1	-0.02	0.04	-0.02	0.00	0.32	0.08	0.13	-0.07	0.42
12	6	-0.02	-0.05	-0.07	0.04	-0.26	0.13	0.02	0.03	0.06
13	1	0.00	0.31	-0.08	0.08	0.06	0.32	0.02	-0.43	0.07
14	6	0.02	-0.07	0.05	-0.06	-0.21	-0.20	0.01	-0.05	0.05
15	1	0.07	0.32	0.17	-0.11	0.13	-0.29	0.06	0.39	0.19
16	1	-0.18	-0.28	-0.49	0.02	-0.28	0.18	-0.12	-0.21	-0.37
17	1	0.12	-0.44	0.42	-0.10	-0.22	-0.23	-0.09	0.31	-0.30
18	3	0.00	0.00	0.00	0.01	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00

	40	41	42
	A	A	A
Frequencies --	1377.0843	1380.6350	1466.7732
Red. masses --	4.7976	4.9094	2.5387
Frc consts --	5.3604	5.5137	3.2179
IR Inten --	0.1091	0.0078	2.9625

Atom	AN	X	Y	Z	X	Y	Z	X	Y	Z
1	13	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
2	13	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
3	13	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
4	13	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
5	3	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
6	3	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
7	3	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00

8	6	0.08	0.06	0.26	0.07	-0.15	0.19	0.06	0.00	0.18
9	6	-0.03	0.06	-0.15	-0.01	0.34	-0.02	-0.03	-0.11	-0.09
10	6	-0.05	-0.30	-0.14	-0.06	0.05	-0.13	-0.03	0.08	-0.10
11	1	-0.10	0.16	-0.35	-0.11	-0.08	-0.31	-0.16	0.11	-0.52
12	6	0.04	-0.07	0.17	-0.09	-0.20	-0.24	0.02	0.15	0.07
13	1	-0.08	-0.15	-0.11	0.04	-0.46	0.11	-0.06	0.24	-0.17
14	6	-0.04	0.25	-0.15	0.08	-0.04	0.20	0.02	-0.16	0.08
15	1	0.07	0.42	0.21	-0.03	0.07	-0.14	-0.05	0.01	-0.17
16	1	-0.02	-0.22	-0.10	0.14	0.15	0.41	-0.12	-0.07	-0.38
17	1	0.10	-0.23	0.34	-0.03	0.26	-0.07	-0.12	0.31	-0.40
18	3	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.01

	43	44	45
	A	A	A
Frequencies --	1467.3815	3170.9197	3178.4847
Red. masses --	2.5666	1.0870	1.0862
Frc consts --	3.2560	6.4392	6.4655
IR Inten --	0.7716	2.9978	0.2219

Atom	AN	X	Y	Z	X	Y	Z	X	Y	Z
1	13	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
2	13	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
3	13	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
4	13	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
5	3	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
6	3	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
7	3	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
8	6	0.00	-0.14	0.01	0.00	0.03	0.01	0.00	-0.03	0.00
9	6	-0.02	0.15	-0.09	-0.02	-0.01	-0.07	0.00	0.00	0.00
10	6	0.03	0.17	0.10	0.00	0.00	0.01	-0.01	0.02	-0.04
11	1	-0.04	-0.14	-0.12	-0.02	-0.35	-0.05	0.02	0.35	0.05
12	6	0.05	-0.01	0.17	0.00	-0.03	0.02	0.00	-0.03	0.01
13	1	-0.01	-0.48	0.01	0.23	0.14	0.79	-0.01	-0.01	-0.02
14	6	-0.05	-0.03	-0.14	0.00	0.01	0.01	0.01	0.04	0.03
15	1	-0.08	-0.52	-0.22	-0.02	0.04	-0.07	0.16	-0.27	0.53
16	1	-0.10	-0.29	-0.30	-0.05	0.34	-0.17	-0.04	0.31	-0.15
17	1	0.02	-0.28	0.06	-0.02	-0.08	-0.07	-0.13	-0.43	-0.40
18	3	0.00	0.01	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00

	46	47	48
	A	A	A
Frequencies --	3193.2058	3198.2418	3211.7295
Red. masses --	1.0948	1.0957	1.1042
Frc consts --	6.5772	6.6031	6.7110
IR Inten --	32.5484	28.7091	6.4698

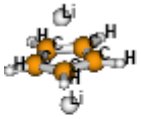
Atom	AN	X	Y	Z	X	Y	Z	X	Y	Z
1	13	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00

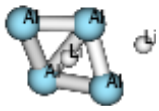
2	13	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
3	13	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
4	13	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
5	3	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
6	3	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
7	3	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
8	6	0.00	0.03	0.00	0.00	-0.06	-0.01	0.00	-0.04	-0.01
9	6	0.01	0.01	0.04	0.00	0.00	0.00	-0.01	0.00	-0.03
10	6	0.01	-0.02	0.04	0.01	-0.01	0.02	0.01	-0.02	0.04
11	1	-0.02	-0.33	-0.04	0.04	0.63	0.09	0.03	0.47	0.06
12	6	0.00	-0.04	0.01	0.01	-0.05	0.02	-0.01	0.04	-0.02
13	1	-0.12	-0.08	-0.43	0.01	0.00	0.02	0.08	0.05	0.27
14	6	0.01	0.03	0.03	-0.01	-0.02	-0.03	0.01	0.03	0.03
15	1	-0.14	0.23	-0.44	-0.08	0.13	-0.26	-0.13	0.22	-0.42
16	1	-0.06	0.39	-0.19	-0.08	0.51	-0.26	0.06	-0.39	0.20
17	1	-0.10	-0.33	-0.30	0.09	0.28	0.27	-0.11	-0.35	-0.33
18	3	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00

$CpLiAl_4Li_3^- \rightarrow CpLi + Al_4Li_3^-$ **-22.65604224**

$CpLiAl_4Li_3^- \rightarrow Cp^- + Al_4Li_4$ **-59.8152096**

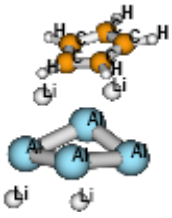
CpLiAl4Li3-fusion60001-b36311+gx.frq 17.6267559





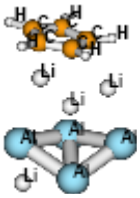
State=1-A\HF=-1193.5759471

CpLiAl4Li3-fusion60000-b36311+gx.frq 2.553651945

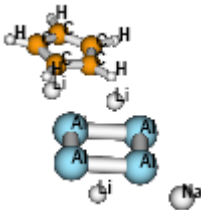


State=1-A\HF=-1193.5999676

CpLiAl4Li3-fusion100000-b36311+gx.frq 2.942582643



HF=-1193.5993478



Charge = -1 Multiplicity = 1

Al,0,-0.6415513084,-1.3756850255,-1.4337140722
Al,0,-1.9860688192,-1.202037891,0.9290214776
Al,0,-1.9446462497,1.3798606404,0.7162978136
Al,0,-0.607909263,1.1177369679,-1.6425212395
Li,0,2.0380181434,-0.1267296946,-1.0520369608
Li,0,0.4909177021,0.0572371493,0.9346851229
Li,0,-3.0557946492,-0.1019656886,-1.574158271
Na,0,-4.7038570804,0.172942636,1.3145539089
C,0,3.6300459604,-1.1926236742,0.1142057676
C,0,4.1838997425,-0.1584228985,-0.6776458674
C,0,2.825554372,-0.5935822342,1.1164390596
H,0,3.7952434612,-2.2550090559,-0.0117933542
C,0,3.7069501327,1.0803432413,-0.1814662338
H,0,4.856566579,-0.2914483778,-1.5168416626
C,0,2.8745380843,0.8140546866,0.9332246655
H,0,2.3350187396,-1.1265617728,1.9265847389
H,0,3.9417193714,2.0615563602,-0.5740243253
H,0,2.4108097146,1.5664828329,1.5638758491

State=1-A\HF=-1348.3820638

		1			2			3		
		A			A			A		
Frequencies --		11.9498			40.3581			48.5013		
Red. masses --		3.9490			10.4759			13.5800		
Frc consts --		0.0003			0.0101			0.0188		
IR Inten --		0.0391			0.4379			1.8124		
Atom	AN	X	Y	Z	X	Y	Z	X	Y	Z
1	13	0.00	-0.04	-0.05	0.05	-0.02	0.09	-0.04	0.24	-0.01
2	13	0.01	-0.05	0.04	0.19	-0.07	0.12	0.08	0.17	-0.04
3	13	0.01	0.05	0.05	-0.15	0.10	0.13	0.14	0.10	-0.02
4	13	0.00	0.06	-0.04	-0.06	0.09	0.10	0.00	0.19	-0.01
5	3	0.00	0.01	-0.03	0.00	0.01	-0.04	-0.02	0.01	-0.03
6	3	0.01	0.00	0.06	0.01	0.00	0.64	-0.03	0.07	-0.08
7	3	0.00	0.00	-0.05	-0.01	0.00	-0.05	-0.07	-0.01	0.03
8	11	0.01	-0.01	0.05	0.04	-0.05	-0.30	0.24	-0.45	0.05
9	6	0.13	0.13	0.04	-0.11	0.00	-0.14	-0.10	-0.20	0.02
10	6	0.00	-0.01	0.19	-0.01	-0.03	-0.17	-0.07	-0.21	0.01

11	6	0.06	0.08	-0.19	-0.09	0.01	-0.10	-0.19	-0.11	0.04
12	1	0.25	0.26	0.09	-0.19	0.03	-0.15	-0.06	-0.25	0.02
13	6	-0.14	-0.14	0.05	0.07	-0.05	-0.15	-0.14	-0.12	0.02
14	1	0.01	-0.01	0.37	0.00	-0.04	-0.21	0.00	-0.28	-0.01
15	6	-0.10	-0.09	-0.18	0.02	-0.02	-0.11	-0.21	-0.06	0.04
16	1	0.10	0.19	-0.34	-0.19	0.07	-0.08	-0.23	-0.09	0.06
17	1	-0.26	-0.27	0.11	0.15	-0.08	-0.16	-0.14	-0.11	0.02
18	1	-0.16	-0.19	-0.32	0.10	-0.07	-0.08	-0.29	0.01	0.05

	4	5	6
	A	A	A
Frequencies --	69.7561	84.4413	88.4901
Red. masses --	5.6372	7.1467	12.1657
Frc consts --	0.0162	0.0300	0.0561
IR Inten --	1.0953	0.8662	1.5241

Atom	AN	X	Y	Z	X	Y	Z	X	Y	Z
1	13	-0.08	0.05	-0.01	0.12	0.00	0.14	-0.13	-0.03	-0.03
2	13	0.04	0.05	-0.03	-0.03	0.01	0.07	-0.10	-0.02	0.22
3	13	-0.03	-0.08	-0.03	0.05	-0.03	0.07	0.05	0.06	0.22
4	13	0.08	-0.07	-0.02	-0.12	-0.01	0.14	0.14	0.03	-0.03
5	3	0.00	0.02	-0.38	-0.01	0.01	-0.26	0.01	-0.02	-0.08
6	3	0.02	-0.01	0.37	0.01	0.00	-0.27	-0.03	0.01	-0.60
7	3	0.01	-0.01	0.24	0.00	0.02	-0.60	0.00	0.00	0.45
8	11	-0.01	0.04	0.01	0.01	0.02	-0.02	-0.01	-0.03	-0.40
9	6	0.17	-0.14	0.01	0.12	-0.11	-0.05	0.09	-0.05	0.01
10	6	0.00	0.00	0.02	-0.01	0.00	-0.04	0.02	0.00	0.01
11	6	0.09	-0.07	-0.01	0.07	-0.07	-0.05	0.06	-0.04	0.01
12	1	0.33	-0.27	0.01	0.25	-0.22	-0.05	0.15	-0.11	0.01
13	6	-0.18	0.15	0.01	-0.14	0.12	-0.04	-0.04	0.05	0.01
14	1	0.02	-0.01	0.04	0.00	-0.01	-0.03	0.02	0.00	0.02
15	6	-0.12	0.11	-0.01	-0.10	0.08	-0.05	-0.01	0.03	0.01
16	1	0.14	-0.11	0.00	0.14	-0.13	-0.04	0.14	-0.10	0.01
17	1	-0.34	0.28	0.02	-0.26	0.22	-0.04	-0.11	0.10	0.01
18	1	-0.19	0.17	0.00	-0.18	0.15	-0.04	-0.08	0.08	0.01

	7	8	9
	A	A	A
Frequencies --	94.5695	114.5178	136.1676
Red. masses --	10.9651	7.8588	13.5878
Frc consts --	0.0578	0.0607	0.1484
IR Inten --	1.6755	2.0129	0.3878

Atom	AN	X	Y	Z	X	Y	Z	X	Y	Z
1	13	0.00	-0.02	-0.01	0.18	-0.11	0.00	-0.04	0.21	-0.18
2	13	0.21	-0.15	0.00	-0.05	0.12	0.00	-0.15	0.18	0.20
3	13	0.24	-0.13	0.02	-0.07	0.12	-0.01	0.13	-0.19	0.19
4	13	0.03	0.00	-0.01	0.17	-0.10	0.01	0.07	-0.22	-0.19

5	3	-0.20	0.12	0.06	-0.23	-0.14	-0.02	0.00	0.01	0.09
6	3	0.10	-0.06	-0.10	-0.10	-0.28	0.02	0.00	0.00	0.38
7	3	0.06	-0.11	0.06	0.18	0.16	0.01	0.02	0.04	-0.54
8	11	0.15	0.27	-0.03	0.05	-0.13	0.01	0.00	-0.01	-0.11
9	6	-0.29	0.05	0.00	-0.13	0.10	0.00	-0.09	0.08	0.04
10	6	-0.28	0.06	0.00	-0.25	0.20	0.00	0.00	0.00	0.04
11	6	-0.24	0.01	0.02	0.03	-0.06	-0.01	-0.07	0.06	0.04
12	1	-0.33	0.07	0.00	-0.17	0.14	0.00	-0.16	0.15	0.04
13	6	-0.23	0.03	0.00	-0.16	0.11	0.00	0.08	-0.07	0.04
14	1	-0.31	0.08	-0.02	-0.39	0.34	0.01	0.01	-0.01	0.04
15	6	-0.20	0.00	0.02	0.02	-0.05	-0.01	0.04	-0.03	0.04
16	1	-0.22	-0.01	0.02	0.15	-0.14	-0.01	-0.14	0.12	0.03
17	1	-0.22	0.03	0.00	-0.22	0.16	0.00	0.15	-0.14	0.04
18	1	-0.18	-0.01	0.02	0.12	-0.14	-0.01	0.08	-0.08	0.03

	10	11	12
	A	A	A
Frequencies --	139.1002	151.9335	160.1927
Red. masses --	5.3475	21.2550	20.8793
Frc consts --	0.0610	0.2891	0.3157
IR Inten --	1.6242	0.1085	2.6279

Atom	AN	X	Y	Z	X	Y	Z	X	Y	Z
1	13	-0.11	0.11	0.00	-0.05	0.38	-0.06	-0.17	-0.13	0.02
2	13	0.05	0.03	0.00	0.38	-0.22	0.08	-0.19	0.02	-0.03
3	13	0.05	0.01	0.02	-0.38	0.20	0.09	-0.20	0.01	0.04
4	13	-0.11	0.08	-0.01	0.07	-0.38	-0.08	-0.18	-0.13	-0.03
5	3	-0.13	-0.18	-0.01	0.01	0.01	0.03	0.01	-0.07	-0.01
6	3	0.00	-0.24	0.02	-0.01	0.03	-0.50	-0.16	0.04	0.00
7	3	-0.14	-0.09	-0.02	0.00	0.01	-0.14	-0.01	0.30	0.02
8	11	0.02	0.07	0.00	0.00	-0.01	0.16	0.79	0.17	0.00
9	6	0.03	-0.02	0.00	0.00	0.00	0.00	0.06	-0.01	0.00
10	6	-0.10	0.10	0.00	0.01	-0.01	0.00	0.08	-0.02	0.00
11	6	0.22	-0.20	-0.01	-0.01	0.01	0.00	0.02	0.03	0.00
12	1	-0.01	0.02	0.00	0.01	-0.02	0.00	0.07	-0.01	0.00
13	6	0.01	-0.01	0.00	-0.01	0.00	0.00	0.06	-0.01	0.00
14	1	-0.27	0.26	0.01	0.02	-0.02	0.00	0.11	-0.05	0.00
15	6	0.21	-0.19	0.00	-0.02	0.01	0.00	0.02	0.03	0.00
16	1	0.37	-0.32	0.00	0.01	-0.01	0.00	-0.01	0.05	0.00
17	1	-0.05	0.04	0.00	-0.01	0.01	0.00	0.07	-0.01	0.00
18	1	0.36	-0.32	-0.01	-0.06	0.05	0.00	-0.01	0.05	0.00

	13	14	15
	A	A	A
Frequencies --	168.0830	214.6600	219.0240
Red. masses --	20.5222	6.7460	17.8437
Frc consts --	0.3416	0.1831	0.5043

IR Inten --		1.0416			8.1136			12.0584		
Atom	AN	X	Y	Z	X	Y	Z	X	Y	Z
1	13	0.34	-0.09	-0.20	-0.01	0.04	-0.03	0.35	0.22	-0.04
2	13	0.22	0.32	0.16	-0.03	-0.10	0.04	-0.26	-0.20	-0.01
3	13	-0.21	-0.33	0.15	0.00	-0.07	-0.04	0.23	0.25	0.01
4	13	-0.34	0.10	-0.19	-0.05	0.01	0.02	-0.31	-0.24	-0.06
5	3	0.00	-0.01	0.05	0.06	0.27	0.02	0.01	0.03	0.08
6	3	0.00	0.00	-0.26	0.20	0.35	0.02	0.02	0.03	0.22
7	3	0.01	-0.01	0.47	0.26	0.62	0.05	-0.09	-0.23	0.50
8	11	-0.01	-0.01	0.10	-0.03	-0.05	0.00	0.02	0.02	-0.04
9	6	0.03	-0.03	-0.03	-0.03	-0.04	0.00	0.05	-0.05	-0.03
10	6	0.00	0.00	-0.04	-0.11	0.04	0.00	-0.01	0.00	-0.02
11	6	0.01	-0.01	-0.03	0.09	-0.15	0.00	0.04	-0.04	-0.03
12	1	0.05	-0.05	-0.03	-0.04	-0.03	0.00	0.10	-0.09	-0.03
13	6	-0.03	0.03	-0.03	-0.05	-0.02	0.00	-0.06	0.05	-0.02
14	1	0.01	-0.01	-0.04	-0.19	0.11	0.00	-0.01	0.00	-0.02
15	6	-0.03	0.03	-0.03	0.07	-0.13	-0.01	-0.04	0.03	-0.03
16	1	0.03	-0.02	-0.03	0.17	-0.22	0.01	0.06	-0.06	-0.03
17	1	-0.04	0.05	-0.03	-0.08	0.00	0.00	-0.11	0.09	-0.02
18	1	-0.05	0.05	-0.03	0.16	-0.21	-0.01	-0.05	0.04	-0.03

		16			17			18		
		A			A			A		
Frequencies --		223.5255			231.0507			282.0476		
Red. masses --		7.7037			14.6790			16.9332		
Frc consts --		0.2268			0.4617			0.7937		
IR Inten --		10.9951			45.1806			4.7968		
Atom	AN	X	Y	Z	X	Y	Z	X	Y	Z
1	13	0.08	0.02	0.01	0.15	0.29	-0.01	-0.02	0.04	-0.10
2	13	-0.11	0.00	0.00	-0.16	-0.28	-0.02	-0.05	-0.01	0.49
3	13	-0.15	-0.04	0.00	-0.14	-0.26	0.00	-0.07	0.01	-0.49
4	13	0.13	0.06	0.00	0.12	0.27	0.02	0.01	0.04	0.09
5	3	0.09	0.27	0.00	-0.10	-0.46	-0.03	-0.03	0.17	0.28
6	3	0.14	0.48	-0.01	-0.42	-0.16	0.02	0.28	-0.44	0.01
7	3	-0.13	-0.57	-0.06	0.37	0.02	0.03	0.00	-0.13	-0.03
8	11	0.08	0.03	0.00	0.06	0.01	0.00	0.07	0.02	0.00
9	6	-0.06	-0.02	0.00	0.02	0.04	0.00	0.05	-0.05	-0.03
10	6	-0.12	0.05	0.00	0.03	0.02	0.00	0.04	-0.04	-0.03
11	6	0.07	-0.13	0.00	-0.02	0.07	0.00	0.00	0.00	-0.03
12	1	-0.07	-0.01	0.00	0.01	0.06	0.00	0.10	-0.09	-0.03
13	6	-0.06	-0.01	0.00	0.02	0.03	0.00	-0.03	0.03	-0.03
14	1	-0.20	0.12	0.00	0.02	0.04	0.01	0.10	-0.10	-0.04
15	6	0.06	-0.13	0.00	-0.02	0.07	0.00	-0.07	0.07	-0.03
16	1	0.14	-0.19	0.01	-0.05	0.10	0.00	0.00	0.01	-0.04
17	1	-0.08	0.00	0.00	0.01	0.05	0.00	-0.04	0.04	-0.03

18	1	0.14	-0.19	-0.01	-0.05	0.10	0.00	-0.10	0.11	-0.01

	19	20	21
	A	A	A
Frequencies --	284.3877	305.0163	331.0467
Red. masses --	6.3726	8.0106	14.1445
Frc consts --	0.3037	0.4391	0.9133
IR Inten --	0.0415	12.9532	1.5954

Atom	AN	X	Y	Z	X	Y	Z	X	Y	Z
1	13	-0.04	-0.01	0.01	0.01	0.05	0.03	0.10	0.01	0.40
2	13	0.01	0.01	-0.07	-0.09	-0.02	-0.14	-0.01	-0.07	0.07
3	13	0.00	-0.02	0.07	-0.08	-0.03	0.14	-0.01	-0.07	-0.08
4	13	0.04	0.01	-0.02	0.01	0.06	-0.03	0.10	0.04	-0.40
5	3	0.00	-0.04	0.76	0.06	0.60	-0.01	0.02	-0.02	-0.01
6	3	-0.03	0.03	0.07	0.34	-0.63	-0.03	0.08	-0.05	0.00
7	3	0.00	0.02	-0.05	0.12	-0.01	0.00	-0.71	0.36	0.02
8	11	-0.01	0.00	0.00	0.01	-0.01	0.00	0.01	0.00	0.00
9	6	0.12	-0.12	-0.07	-0.01	-0.01	0.00	-0.01	0.00	0.00
10	6	0.00	0.00	-0.08	0.03	-0.05	0.00	-0.01	0.00	0.00
11	6	0.10	-0.09	-0.08	-0.01	0.00	0.01	-0.01	0.00	0.00
12	1	0.21	-0.20	-0.07	0.02	-0.05	0.00	-0.02	0.01	0.00
13	6	-0.12	0.12	-0.07	0.01	-0.03	0.00	-0.01	0.00	0.00
14	1	0.00	0.00	-0.09	0.11	-0.12	0.00	-0.01	0.01	0.00
15	6	-0.11	0.10	-0.08	-0.01	-0.01	0.00	-0.01	0.00	0.00
16	1	0.13	-0.12	-0.07	0.01	-0.01	-0.01	-0.01	0.01	0.00
17	1	-0.21	0.20	-0.07	0.05	-0.07	0.00	-0.01	0.01	0.00
18	1	-0.14	0.13	-0.07	0.01	-0.01	0.02	-0.01	0.01	0.00

	22	23	24
	A	A	A
Frequencies --	349.5479	380.6156	476.0810
Red. masses --	10.4232	7.0839	5.9858
Frc consts --	0.7504	0.6046	0.7993
IR Inten --	3.4339	161.6406	94.3225

Atom	AN	X	Y	Z	X	Y	Z	X	Y	Z
1	13	-0.11	-0.02	0.26	-0.01	0.02	-0.03	-0.02	0.00	-0.01
2	13	0.01	0.05	0.05	-0.05	0.00	-0.05	0.00	0.00	0.00
3	13	0.01	0.06	-0.05	-0.05	0.00	0.05	0.00	0.00	0.00
4	13	-0.11	-0.01	-0.26	0.00	0.02	0.03	-0.02	0.00	0.01
5	3	0.00	-0.08	0.00	-0.09	-0.51	-0.01	0.84	-0.17	0.00
6	3	0.07	0.09	0.00	0.81	0.06	-0.01	-0.02	-0.14	0.00
7	3	0.84	-0.33	-0.01	-0.03	0.03	0.00	-0.01	0.00	0.00
8	11	-0.03	-0.01	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
9	6	0.00	0.00	0.00	-0.02	0.02	0.00	-0.10	0.05	0.00
10	6	-0.01	0.00	0.00	0.00	-0.01	0.00	-0.09	0.06	0.00
11	6	0.00	0.00	0.00	-0.05	0.05	0.00	-0.01	-0.03	0.00

12	1	-0.01	0.01	0.00	-0.07	0.06	0.00	-0.20	0.13	0.00
13	6	0.00	0.00	0.00	-0.01	0.01	0.00	-0.10	0.05	0.01
14	1	-0.02	0.01	0.00	-0.05	0.04	0.00	-0.21	0.17	0.00
15	6	0.00	0.00	0.00	-0.05	0.05	0.01	-0.02	-0.02	0.00
16	1	-0.01	0.01	0.00	-0.07	0.07	-0.01	-0.07	0.03	0.00
17	1	-0.01	0.01	0.00	-0.05	0.05	0.00	-0.20	0.13	0.01
18	1	-0.01	0.01	0.00	-0.07	0.07	0.02	-0.08	0.04	0.00

	25	26	27
	A	A	A
Frequencies --	623.4605	636.9008	725.0232
Red. masses --	5.1170	4.2462	1.2622
Frc consts --	1.1719	1.0148	0.3909
IR Inten --	0.5760	0.1502	5.7921

Atom	AN	X	Y	Z	X	Y	Z	X	Y	Z
1	13	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
2	13	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
3	13	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
4	13	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
5	3	0.01	0.00	0.04	-0.04	-0.01	0.00	0.00	0.00	0.01
6	3	0.01	0.00	0.00	-0.01	0.01	0.00	0.00	0.00	0.01
7	3	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
8	11	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
9	6	0.16	-0.14	0.00	-0.19	0.19	-0.01	-0.07	0.07	0.00
10	6	0.00	0.00	-0.02	0.25	-0.25	0.00	0.00	0.00	0.00
11	6	-0.29	0.24	0.00	0.08	-0.07	0.01	-0.03	0.02	-0.01
12	1	0.33	-0.29	0.00	-0.29	0.30	0.00	0.39	-0.34	0.00
13	6	-0.16	0.14	0.01	-0.19	0.19	0.01	0.07	-0.07	0.00
14	1	0.00	0.00	-0.03	0.38	-0.37	-0.01	0.00	0.00	-0.01
15	6	0.28	-0.24	-0.01	0.08	-0.07	-0.01	0.03	-0.02	-0.01
16	1	-0.24	0.21	-0.02	0.15	-0.12	0.00	0.35	-0.30	0.01
17	1	-0.33	0.29	0.01	-0.29	0.30	0.01	-0.40	0.36	0.01
18	1	0.28	-0.24	-0.02	0.16	-0.13	-0.01	-0.34	0.30	0.02

	28	29	30
	A	A	A
Frequencies --	743.5309	755.1413	848.2886
Red. masses --	1.2772	1.1239	1.2985
Frc consts --	0.4160	0.3776	0.5505
IR Inten --	1.8874	482.8575	0.0462

Atom	AN	X	Y	Z	X	Y	Z	X	Y	Z
1	13	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
2	13	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
3	13	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
4	13	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
5	3	0.00	-0.02	0.00	-0.04	0.03	0.00	0.00	0.00	0.00

6	3	0.01	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.01
7	3	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
8	11	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
9	6	-0.03	0.03	0.01	0.03	-0.03	0.00	0.03	-0.05	0.04
10	6	-0.07	0.07	0.00	0.03	-0.02	0.00	0.00	0.00	0.02
11	6	0.06	-0.05	0.00	0.03	-0.03	0.00	-0.08	-0.02	-0.05
12	1	0.19	-0.18	0.00	-0.32	0.29	0.00	-0.25	0.36	0.07
13	6	-0.03	0.03	-0.01	0.03	-0.02	0.00	-0.02	0.05	0.03
14	1	0.48	-0.45	-0.01	-0.26	0.26	0.00	0.01	-0.01	-0.08
15	6	0.06	-0.05	0.00	0.03	-0.04	0.00	0.08	0.01	-0.05
16	1	-0.34	0.31	-0.05	-0.38	0.33	-0.05	0.34	-0.41	0.03
17	1	0.17	-0.16	-0.01	-0.31	0.29	0.00	0.25	-0.34	0.07
18	1	-0.33	0.30	0.05	-0.36	0.32	0.05	-0.35	0.43	0.03

	31	32	33
	A	A	A
Frequencies --	861.4376	862.2282	863.4750
Red. masses --	1.9796	2.7566	1.9380
Frc consts --	0.8655	1.2074	0.8513
IR Inten --	1.6762	1.0387	1.3469

Atom	AN	X	Y	Z	X	Y	Z	X	Y	Z
1	13	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
2	13	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
3	13	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
4	13	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
5	3	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
6	3	0.00	0.00	0.01	0.00	0.00	-0.01	0.00	0.00	0.00
7	3	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
8	11	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
9	6	0.01	0.06	-0.16	-0.11	-0.03	0.03	-0.05	0.04	0.14
10	6	-0.05	-0.14	-0.03	-0.04	-0.09	0.08	0.17	0.05	0.00
11	6	0.09	0.09	0.05	-0.04	-0.11	-0.13	-0.04	-0.07	0.01
12	1	0.27	-0.16	-0.16	0.48	-0.16	0.11	0.25	-0.40	0.10
13	6	-0.07	0.02	0.07	0.08	0.08	0.18	-0.05	0.04	-0.13
14	1	-0.46	0.26	0.13	-0.30	0.14	-0.24	-0.31	0.51	-0.01
15	6	0.03	-0.03	0.07	0.10	0.15	-0.13	-0.03	-0.06	-0.02
16	1	0.01	0.04	0.18	-0.48	0.11	0.01	-0.07	0.13	-0.18
17	1	0.50	-0.22	-0.02	0.00	-0.04	0.23	0.23	-0.40	-0.09
18	1	-0.36	0.12	-0.09	0.24	-0.02	-0.20	-0.05	0.14	0.17

	34	35	36
	A	A	A
Frequencies --	1024.9175	1028.0081	1073.2882
Red. masses --	1.4647	1.4422	1.2435
Frc consts --	0.9065	0.8980	0.8440
IR Inten --	38.5642	14.3894	0.7066

Atom	AN	X	Y	Z	X	Y	Z	X	Y	Z
1	13	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
2	13	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
3	13	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
4	13	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
5	3	-0.01	0.00	0.00	0.00	0.00	0.01	0.00	0.00	0.00
6	3	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
7	3	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
8	11	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
9	6	-0.04	-0.04	-0.03	0.02	0.03	-0.10	-0.05	-0.06	0.00
10	6	0.08	0.08	-0.02	0.01	0.01	0.06	0.00	0.00	0.09
11	6	0.04	0.04	0.09	-0.05	-0.06	0.02	-0.01	0.00	-0.04
12	1	-0.38	-0.40	-0.17	0.10	0.07	-0.08	-0.35	-0.35	-0.12
13	6	-0.03	-0.03	0.06	-0.04	-0.04	-0.08	0.05	0.05	-0.01
14	1	0.08	0.08	-0.11	0.03	0.02	0.60	0.02	0.01	0.63
15	6	0.02	0.02	-0.09	0.06	0.07	-0.01	0.01	0.00	-0.04
16	1	-0.06	-0.05	0.30	-0.30	-0.23	0.42	0.10	0.03	-0.17
17	1	-0.33	-0.36	0.22	-0.22	-0.19	0.00	0.33	0.34	-0.15
18	1	-0.18	-0.13	-0.40	0.26	0.20	0.27	-0.10	-0.04	-0.17

	37	38	39
	A	A	A
Frequencies --	1075.5819	1142.4157	1288.7634
Red. masses --	1.2462	5.8407	1.2785
Frc consts --	0.8495	4.4912	1.2511
IR Inten --	4.3647	6.8792	0.0804

Atom	AN	X	Y	Z	X	Y	Z	X	Y	Z
1	13	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
2	13	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
3	13	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
4	13	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
5	3	0.00	0.00	0.00	0.01	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
6	3	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
7	3	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
8	11	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
9	6	0.03	0.03	0.04	-0.05	-0.07	0.28	0.04	0.05	0.02
10	6	0.01	0.02	0.00	-0.20	-0.22	0.01	0.00	0.00	0.07
11	6	-0.04	-0.04	0.06	0.17	0.17	0.17	0.03	0.03	-0.06
12	1	0.24	0.27	0.13	-0.06	-0.02	0.33	-0.29	-0.32	-0.12
13	6	0.03	0.03	-0.04	-0.07	-0.07	-0.28	-0.04	-0.05	0.02
14	1	0.03	0.00	-0.01	-0.25	-0.23	-0.01	-0.01	-0.01	-0.44
15	6	-0.04	-0.05	-0.06	0.16	0.17	-0.18	-0.03	-0.03	-0.05
16	1	-0.25	-0.23	0.46	0.17	0.23	0.17	-0.18	-0.18	0.36
17	1	0.24	0.28	-0.16	-0.10	-0.06	-0.31	0.28	0.31	-0.15
18	1	-0.28	-0.25	-0.45	0.16	0.24	-0.17	0.20	0.19	0.34

		40			41			42		
		A			A			A		
Frequencies --		1377.0163			1385.9524			1467.6569		
Red. masses --		4.6749			4.7940			2.5029		
Frc consts --		5.2227			5.4256			3.1765		
IR Inten --		0.0612			3.9536			2.9740		
Atom	AN	X	Y	Z	X	Y	Z	X	Y	Z
1	13	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
2	13	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
3	13	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
4	13	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
5	3	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	-0.01	0.00	0.00
6	3	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
7	3	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
8	11	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
9	6	-0.15	-0.17	-0.16	0.17	0.17	-0.05	-0.12	-0.13	-0.07
10	6	0.00	0.00	0.33	-0.11	-0.09	-0.01	0.09	0.09	-0.04
11	6	0.09	0.14	0.00	-0.11	-0.12	0.29	0.04	0.04	0.13
12	1	0.26	0.30	0.02	-0.17	-0.17	-0.20	0.37	0.40	0.14
13	6	0.16	0.18	-0.16	0.16	0.14	0.06	-0.09	-0.10	0.12
14	1	-0.02	-0.01	-0.45	-0.09	-0.12	0.01	0.11	0.12	0.11
15	6	-0.11	-0.15	-0.01	-0.11	-0.11	-0.28	-0.01	-0.01	-0.16
16	1	0.08	-0.03	0.21	0.23	0.22	-0.38	0.17	0.18	-0.10
17	1	-0.29	-0.32	0.07	-0.13	-0.12	0.20	0.33	0.36	-0.09
18	1	-0.03	0.05	0.26	0.24	0.23	0.32	0.24	0.25	0.26

		43			44			45		
		A			A			A		
Frequencies --		1469.9182			3151.3396			3170.3555		
Red. masses --		2.5493			1.0879			1.0934		
Frc consts --		3.2453			6.3655			6.4754		
IR Inten --		0.1628			2.1094			2.7116		
Atom	AN	X	Y	Z	X	Y	Z	X	Y	Z
1	13	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
2	13	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
3	13	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
4	13	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
5	3	0.00	0.00	0.01	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
6	3	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
7	3	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
8	11	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
9	6	0.03	0.03	-0.13	0.00	0.00	0.01	0.00	0.00	0.01
10	6	0.03	0.02	0.20	0.00	0.00	0.00	0.01	0.01	0.00
11	6	-0.09	-0.11	0.11	-0.04	-0.05	-0.04	-0.02	-0.02	-0.02
12	1	0.00	0.01	-0.17	0.02	0.03	-0.13	0.03	0.03	-0.16

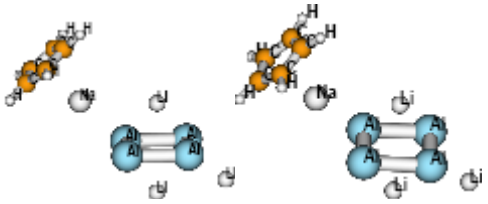
13	6	-0.09	-0.09	-0.08	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	-0.02
14	1	0.01	0.02	-0.56	-0.01	-0.01	0.00	-0.10	-0.10	0.00
15	6	0.10	0.12	0.04	0.02	0.03	-0.02	-0.04	-0.04	0.05
16	1	0.17	0.18	-0.45	0.43	0.56	0.50	0.22	0.28	0.26
17	1	0.15	0.15	-0.23	-0.01	-0.02	-0.06	0.06	0.06	0.25
18	1	-0.10	-0.10	-0.37	-0.23	-0.29	0.29	0.40	0.51	-0.52

	46	47	48
	A	A	A
Frequencies --	3183.8705	3204.5205	3213.8402
Red. masses --	1.0900	1.0945	1.1022
Frc consts --	6.5098	6.6220	6.7073
IR Inten --	15.8975	18.3919	14.2902

Atom	AN	X	Y	Z	X	Y	Z	X	Y	Z
1	13	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
2	13	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
3	13	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
4	13	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
5	3	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
6	3	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
7	3	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
8	11	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
9	6	0.01	0.01	-0.02	0.01	0.01	-0.06	0.01	0.01	-0.06
10	6	-0.05	-0.05	0.00	0.00	0.00	0.00	0.03	0.03	0.00
11	6	-0.01	-0.01	-0.01	-0.01	-0.01	0.00	-0.01	-0.01	-0.01
12	1	-0.06	-0.07	0.28	-0.12	-0.14	0.65	-0.11	-0.13	0.61
13	6	0.01	0.01	0.02	-0.02	-0.02	-0.06	0.01	0.01	0.05
14	1	0.60	0.63	-0.03	0.02	0.02	-0.01	-0.32	-0.34	0.01
15	6	-0.01	-0.01	0.01	0.01	0.01	-0.01	-0.01	-0.01	0.01
16	1	0.08	0.10	0.09	0.05	0.06	0.05	0.07	0.09	0.07
17	1	-0.07	-0.07	-0.27	0.17	0.17	0.67	-0.13	-0.14	-0.54
18	1	0.10	0.13	-0.14	-0.07	-0.09	0.08	0.07	0.09	-0.09

$CpNaAl_4Li_3^- \rightarrow CpLi + Al_4Li_2Na^-$ **-24.87064877**

$CpNaAl_4Li_3^- \rightarrow Cp^- + Al_4Li_3Na$ **-62.52510933**



Charge = -1 Multiplicity = 1

Al,0,-3.3990894369,1.0996644085,1.3422009213

Al,0,-1.395982436,-0.7557420599,1.2557185557

Al,0,-1.4316316813,-0.7253517778,-1.2468209043

Al,0,-3.436527389,1.129712502,-1.2325734962

Li,0,-5.7187608856,1.1178603431,0.0884800916
Li,0,-3.8036205493,-1.3836886221,0.030860722
Li,0,-1.0356049374,1.7412565189,0.0284557546
Na,0,1.6330527991,-0.4754408927,-0.0378365438
C,0,3.966101153,-0.1647325611,-1.2475692818
C,0,3.8816287066,0.9123586503,-0.3296602521
C,0,4.0662799144,-1.3670009454,-0.503331161
H,0,3.9761342039,-0.0819040807,-2.3290125682
C,0,3.9301163404,0.3759147654,0.9817121984
H,0,3.822265025,1.9648392096,-0.5863825402
C,0,4.043921501,-1.0326915766,0.8749078025
H,0,4.1717190929,-2.3648335229,-0.9158055167
H,0,3.9072033987,0.9446211647,1.9050862255
H,0,4.1267731775,-1.7299276123,1.7017448456

State=1-A\HF=-1348.3578909

		1			2			3		
		A			A			A		
Frequencies --		4.7480			22.4838			31.1862		
Red. masses --		4.3598			8.5768			8.5087		
Frc consts --		0.0001			0.0026			0.0049		
IR Inten --		0.0017			1.0614			0.2649		
Atom	AN	X	Y	Z	X	Y	Z	X	Y	Z
1	13	0.00	0.05	-0.08	-0.15	0.01	0.09	-0.13	0.04	0.06
2	13	0.00	-0.06	-0.08	0.02	-0.02	-0.16	-0.12	-0.11	0.08
3	13	0.00	-0.06	0.08	0.05	-0.01	-0.17	0.10	-0.11	-0.03
4	13	0.01	0.05	0.08	-0.12	0.01	0.08	0.17	0.04	-0.08
5	3	0.00	0.04	-0.01	-0.10	0.04	0.36	0.01	0.32	-0.06
6	3	0.00	-0.11	0.00	0.14	0.02	0.09	-0.02	0.15	-0.01
7	3	0.00	0.10	0.00	-0.22	-0.03	-0.15	0.03	-0.28	0.02
8	11	0.00	-0.03	0.01	0.02	-0.04	-0.23	0.00	-0.25	0.03
9	6	-0.06	0.00	-0.20	0.07	0.02	0.11	-0.20	0.13	0.03
10	6	-0.02	-0.19	-0.05	0.25	0.01	0.08	-0.08	0.13	0.00
11	6	-0.02	0.20	-0.08	-0.08	0.03	0.15	-0.06	0.12	0.00
12	1	-0.11	-0.02	-0.37	0.05	0.02	0.11	-0.38	0.13	0.07
13	6	0.04	-0.10	0.16	0.21	0.01	0.10	0.14	0.13	-0.05
14	1	-0.04	-0.36	-0.09	0.39	0.00	0.05	-0.13	0.14	0.01
15	6	0.05	0.14	0.15	0.01	0.02	0.14	0.15	0.12	-0.05
16	1	-0.03	0.36	-0.14	-0.23	0.03	0.18	-0.11	0.12	0.01
17	1	0.08	-0.19	0.31	0.32	0.01	0.08	0.28	0.13	-0.09
18	1	0.09	0.25	0.28	-0.06	0.03	0.16	0.29	0.12	-0.09
		4			5			6		
		A			A			A		
Frequencies --		60.2406			72.3403			76.5639		

Red. masses --		9.2530			9.0066			8.4869		
Frc consts --		0.0198			0.0278			0.0293		
IR Inten --		2.6110			3.0679			2.1104		
Atom	AN	X	Y	Z	X	Y	Z	X	Y	Z
1	13	0.13	0.00	-0.01	-0.02	-0.01	0.02	0.15	0.00	0.03
2	13	0.05	0.18	0.01	-0.12	0.00	0.19	0.12	0.00	0.03
3	13	-0.06	0.18	0.02	-0.12	-0.01	0.19	0.12	0.00	0.04
4	13	-0.12	0.00	0.01	-0.02	0.01	0.02	0.16	0.00	0.03
5	3	0.00	-0.26	-0.03	-0.03	0.01	-0.45	0.15	0.00	-0.07
6	3	-0.01	-0.03	0.00	-0.25	0.00	-0.05	0.12	0.00	0.01
7	3	0.00	0.32	0.01	-0.03	-0.01	0.15	0.08	0.00	-0.01
8	11	0.00	-0.38	-0.01	0.04	0.02	-0.28	-0.20	0.01	-0.23
9	6	-0.21	-0.01	0.04	0.16	0.00	-0.04	-0.18	0.00	0.03
10	6	-0.04	-0.01	0.01	0.29	0.00	-0.07	-0.03	0.00	0.00
11	6	-0.08	-0.02	0.01	-0.01	0.00	0.00	-0.36	0.00	0.07
12	1	-0.41	-0.01	0.09	0.19	0.00	-0.04	-0.18	0.00	0.03
13	6	0.19	-0.02	-0.05	0.21	0.00	-0.05	-0.11	0.00	0.02
14	1	-0.09	-0.01	0.02	0.45	-0.01	-0.10	0.12	0.00	-0.03
15	6	0.16	-0.02	-0.04	0.02	0.00	-0.01	-0.31	0.00	0.06
16	1	-0.17	-0.01	0.03	-0.14	0.00	0.03	-0.51	0.00	0.10
17	1	0.36	-0.01	-0.08	0.29	0.00	-0.06	-0.03	0.00	0.00
18	1	0.32	-0.02	-0.07	-0.08	0.00	0.02	-0.42	0.00	0.09

		7			8			9		
		A			A			A		
Frequencies --		99.9750			118.5237			125.5643		
Red. masses --		9.7383			9.3262			15.8695		
Frc consts --		0.0573			0.0772			0.1474		
IR Inten --		0.0250			2.9442			0.3130		
Atom	AN	X	Y	Z	X	Y	Z	X	Y	Z
1	13	-0.12	0.01	0.00	0.04	0.01	-0.20	-0.14	-0.16	0.28
2	13	0.17	0.15	-0.05	-0.08	-0.01	0.12	0.09	0.02	-0.30
3	13	-0.17	0.15	0.05	-0.09	0.01	0.12	-0.08	0.02	0.30
4	13	0.12	0.01	0.00	0.04	-0.02	-0.20	0.14	-0.17	-0.28
5	3	0.00	0.22	0.00	-0.01	0.00	0.84	0.00	0.38	-0.01
6	3	0.00	-0.68	0.00	0.00	0.00	-0.02	0.00	0.12	0.00
7	3	0.00	-0.58	0.00	0.21	0.00	0.17	-0.01	0.63	0.00
8	11	0.00	-0.02	0.00	-0.01	0.00	-0.06	0.00	0.01	0.00
9	6	-0.03	-0.02	0.01	0.02	0.00	-0.02	0.00	-0.01	0.00
10	6	-0.01	-0.02	0.00	0.09	0.00	-0.03	0.00	-0.01	0.00
11	6	-0.01	-0.02	0.00	-0.06	0.00	0.00	0.00	-0.01	0.00
12	1	-0.05	-0.01	0.01	0.03	0.00	-0.02	0.00	-0.01	0.00
13	6	0.02	-0.02	0.00	0.06	0.00	-0.03	0.00	-0.01	0.00
14	1	-0.01	-0.02	0.00	0.17	0.00	-0.05	0.00	-0.01	0.00
15	6	0.02	-0.02	0.00	-0.03	0.00	-0.01	0.00	-0.01	0.00

16	1	-0.02	-0.02	0.00	-0.12	0.00	0.01	0.00	-0.01	0.00
17	1	0.04	-0.02	-0.01	0.10	0.00	-0.03	0.00	-0.01	0.00
18	1	0.04	-0.02	-0.01	-0.08	0.00	0.00	0.01	-0.01	0.00

	10	11	12
	A	A	A
Frequencies --	140.6972	156.3888	163.5168
Red. masses --	11.1233	11.1138	6.1304
Frc consts --	0.1297	0.1601	0.0966
IR Inten --	0.1110	0.0693	2.4707

Atom	AN	X	Y	Z	X	Y	Z	X	Y	Z
1	13	0.00	-0.14	-0.18	0.11	0.18	0.15	-0.04	-0.06	-0.06
2	13	-0.03	0.12	-0.20	0.18	-0.13	-0.09	-0.06	0.03	0.04
3	13	0.03	0.12	0.20	-0.18	-0.13	0.09	0.05	0.03	-0.06
4	13	0.00	-0.13	0.18	-0.11	0.18	-0.15	0.04	-0.06	0.07
5	3	0.00	0.03	0.00	0.00	-0.27	0.00	0.00	0.13	-0.01
6	3	0.00	0.71	0.00	0.00	0.32	0.00	0.00	-0.08	0.00
7	3	0.00	-0.54	0.00	0.00	-0.36	0.00	0.01	0.15	0.00
8	11	0.00	-0.01	0.00	0.00	0.15	0.01	0.01	0.26	0.08
9	6	-0.02	0.00	0.00	-0.19	-0.06	0.04	-0.25	-0.08	0.03
10	6	0.00	0.00	0.00	-0.04	-0.06	0.01	0.01	-0.08	-0.03
11	6	-0.01	-0.01	0.00	-0.08	-0.06	0.02	-0.16	-0.08	0.01
12	1	-0.03	0.00	0.01	-0.34	-0.05	0.07	-0.45	-0.07	0.07
13	6	0.01	0.00	0.00	0.16	-0.06	-0.04	0.25	-0.08	-0.08
14	1	-0.01	0.00	0.00	-0.07	-0.06	0.01	0.01	-0.08	-0.03
15	6	0.01	-0.01	0.00	0.14	-0.06	-0.03	0.15	-0.08	-0.06
16	1	-0.01	-0.01	0.00	-0.14	-0.06	0.03	-0.29	-0.08	0.04
17	1	0.03	0.00	-0.01	0.29	-0.06	-0.06	0.46	-0.08	-0.12
18	1	0.02	-0.01	-0.01	0.25	-0.06	-0.06	0.26	-0.08	-0.08

	13	14	15
	A	A	A
Frequencies --	164.6003	208.3044	220.2916
Red. masses --	5.5183	13.9542	14.3172
Frc consts --	0.0881	0.3567	0.4094
IR Inten --	1.2928	6.4598	0.8553

Atom	AN	X	Y	Z	X	Y	Z	X	Y	Z
1	13	0.00	0.02	0.03	0.02	-0.06	-0.14	0.26	-0.07	0.15
2	13	0.01	-0.01	-0.04	0.33	-0.08	0.17	-0.25	0.05	-0.13
3	13	-0.01	0.00	-0.02	-0.33	-0.09	-0.17	-0.25	-0.06	-0.13
4	13	-0.02	0.01	0.01	-0.02	-0.06	0.14	0.26	0.07	0.15
5	3	-0.01	-0.03	-0.04	0.00	0.67	0.00	0.35	0.00	0.24
6	3	0.01	0.01	0.02	0.00	0.38	0.00	-0.44	0.00	0.02
7	3	0.04	-0.03	0.00	0.00	0.23	0.00	-0.13	0.00	-0.41
8	11	0.03	-0.07	0.27	0.00	-0.07	0.00	-0.16	0.00	0.02
9	6	0.08	0.02	-0.11	0.02	0.01	0.00	0.07	0.00	-0.01

10	6	0.27	0.02	-0.14	0.01	0.01	0.00	0.05	0.00	-0.01
11	6	-0.23	0.03	-0.04	0.01	0.01	0.00	0.08	0.00	-0.01
12	1	0.15	0.02	-0.12	0.03	0.01	-0.01	0.08	0.00	-0.01
13	6	0.08	0.02	-0.11	-0.02	0.01	0.00	0.06	0.00	-0.01
14	1	0.50	0.01	-0.18	0.01	0.01	0.00	0.06	0.00	-0.01
15	6	-0.23	0.02	-0.04	-0.01	0.01	0.00	0.07	0.00	-0.01
16	1	-0.40	0.03	0.00	0.01	0.01	0.00	0.10	0.00	-0.02
17	1	0.15	0.02	-0.12	-0.03	0.01	0.00	0.07	0.00	-0.01
18	1	-0.40	0.02	0.00	-0.02	0.01	0.00	0.09	0.00	-0.02

		16			17			18		
		A			A			A		
Frequencies --		232.4532			242.7316			251.9079		
Red. masses --		8.7022			8.3713			12.5681		
Frc consts --		0.2770			0.2906			0.4699		
IR Inten --		4.3993			35.4396			4.9648		
Atom	AN	X	Y	Z	X	Y	Z	X	Y	Z
1	13	0.01	0.07	0.04	0.03	0.00	-0.09	0.34	-0.04	0.07
2	13	-0.15	-0.03	-0.11	-0.04	-0.01	0.08	-0.12	-0.01	-0.05
3	13	-0.15	0.03	-0.11	-0.05	0.01	0.08	0.12	-0.01	0.05
4	13	0.01	-0.07	0.04	0.04	0.00	-0.09	-0.34	-0.04	-0.08
5	3	0.06	0.00	-0.16	0.01	-0.01	-0.12	0.00	0.79	0.00
6	3	0.39	0.00	0.47	0.60	0.01	0.41	0.00	-0.24	0.00
7	3	0.63	0.00	0.34	-0.50	0.00	-0.27	-0.01	-0.21	0.00
8	11	-0.02	0.00	-0.05	-0.20	0.00	0.06	0.00	0.01	0.00
9	6	0.01	0.00	0.01	0.06	0.00	-0.01	0.00	0.00	0.00
10	6	-0.01	0.00	0.01	0.06	0.00	-0.01	0.00	0.00	0.00
11	6	0.02	0.00	0.00	0.07	0.00	-0.01	0.00	0.00	0.00
12	1	0.01	0.00	0.01	0.08	0.00	-0.02	0.00	0.00	0.00
13	6	0.00	0.00	0.01	0.06	0.00	-0.01	0.00	0.00	0.00
14	1	0.00	0.00	0.01	0.07	0.00	-0.01	0.00	0.00	0.00
15	6	0.01	0.00	0.00	0.07	0.00	-0.01	0.00	0.00	0.00
16	1	0.03	0.00	0.00	0.09	0.00	-0.02	0.00	0.00	0.00
17	1	0.00	0.00	0.01	0.08	0.00	-0.02	0.00	0.00	0.00
18	1	0.02	0.00	0.00	0.09	0.00	-0.02	0.00	0.00	0.00

		19			20			21		
		A			A			A		
Frequencies --		258.5776			287.3618			330.3685		
Red. masses --		12.8038			16.9215			12.5132		
Frc consts --		0.5044			0.8233			0.8047		
IR Inten --		88.8196			4.0993			3.5870		
Atom	AN	X	Y	Z	X	Y	Z	X	Y	Z
1	13	0.06	-0.06	-0.02	0.08	0.49	0.02	-0.03	-0.02	-0.08
2	13	-0.11	0.04	0.01	0.00	-0.06	0.03	0.10	0.35	0.00
3	13	-0.11	-0.04	0.01	0.00	0.06	0.03	0.10	-0.35	0.00

4	13	0.06	0.06	-0.02	0.08	-0.48	0.02	-0.03	0.02	-0.08
5	3	0.11	0.00	-0.02	-0.40	0.00	0.01	-0.15	0.00	-0.04
6	3	0.19	0.00	0.28	-0.26	0.00	0.12	-0.42	0.00	0.70
7	3	-0.30	0.00	-0.17	-0.02	0.00	-0.50	0.15	0.00	-0.08
8	11	0.59	0.00	-0.08	0.08	0.00	-0.01	-0.05	0.00	0.00
9	6	-0.16	0.00	0.03	-0.02	0.00	0.00	0.01	0.00	0.00
10	6	-0.14	0.00	0.02	-0.02	0.00	0.00	0.01	0.00	0.00
11	6	-0.18	0.00	0.03	-0.02	0.00	0.00	0.01	0.00	0.00
12	1	-0.20	0.00	0.03	-0.03	0.00	0.01	0.01	0.00	0.00
13	6	-0.15	0.00	0.02	-0.02	0.00	0.00	0.01	0.00	0.00
14	1	-0.16	0.00	0.03	-0.02	0.00	0.00	0.02	0.00	0.00
15	6	-0.18	0.00	0.03	-0.02	0.00	0.00	0.01	0.00	0.00
16	1	-0.25	0.00	0.05	-0.03	0.00	0.01	0.01	0.00	0.00
17	1	-0.18	0.00	0.03	-0.02	0.00	0.01	0.02	0.00	0.00
18	1	-0.24	0.00	0.04	-0.03	0.00	0.01	0.01	0.00	0.00

	22	23	24
	A	A	A
Frequencies --	332.8029	347.3316	373.4584
Red. masses --	8.5119	10.5868	8.2516
Frc consts --	0.5555	0.7525	0.6781
IR Inten --	16.6466	13.5288	8.9314

Atom	AN	X	Y	Z	X	Y	Z	X	Y	Z
1	13	-0.08	-0.01	0.05	-0.01	-0.17	-0.02	-0.13	0.07	-0.04
2	13	-0.04	0.14	0.08	0.04	-0.24	0.04	0.04	-0.07	0.03
3	13	-0.04	-0.14	0.09	0.04	0.24	0.04	0.04	0.07	0.03
4	13	-0.08	0.01	0.05	-0.01	0.17	-0.02	-0.13	-0.07	-0.04
5	3	0.07	0.00	0.00	-0.36	0.00	-0.02	0.91	0.00	0.00
6	3	0.40	0.00	-0.40	-0.27	0.00	0.41	-0.21	0.00	0.20
7	3	0.47	0.00	-0.62	0.38	0.00	-0.56	0.03	0.00	-0.16
8	11	0.00	0.00	-0.01	0.01	0.00	-0.01	0.00	0.00	0.00
9	6	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
10	6	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
11	6	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
12	1	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
13	6	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
14	1	0.01	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
15	6	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
16	1	0.00	0.00	0.00	-0.01	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
17	1	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
18	1	0.00	0.00	0.00	-0.01	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00

	25	26	27
	A	A	A
Frequencies --	633.2297	633.5947	690.2517
Red. masses --	4.5170	4.5118	1.2691

Frc consts --		1.0671			1.0671			0.3563		
IR Inten --		0.0704			0.0002			2.4661		
Atom	AN	X	Y	Z	X	Y	Z	X	Y	Z
1	13	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
2	13	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
3	13	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
4	13	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
5	3	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
6	3	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
7	3	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
8	11	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
9	6	0.29	-0.01	-0.06	-0.19	0.01	0.04	0.09	0.00	-0.02
10	6	-0.35	0.01	0.06	-0.02	0.00	0.00	0.05	0.00	-0.01
11	6	-0.12	0.01	0.03	0.33	-0.01	-0.08	0.00	0.00	0.00
12	1	0.45	-0.02	-0.09	-0.29	0.01	0.07	-0.59	0.02	0.12
13	6	0.28	0.01	-0.05	0.22	0.01	-0.04	-0.06	0.00	0.01
14	1	-0.49	0.01	0.09	-0.02	0.00	0.00	-0.37	0.00	0.07
15	6	-0.09	0.00	0.02	-0.33	-0.01	0.08	-0.09	0.00	0.02
16	1	-0.18	0.01	0.04	0.47	-0.01	-0.12	-0.03	-0.01	0.01
17	1	0.40	0.01	-0.08	0.32	0.01	-0.07	0.36	0.00	-0.07
18	1	-0.15	-0.01	0.03	-0.49	-0.01	0.12	0.56	0.01	-0.13

		28			29			30		
		A			A			A		
Frequencies --		690.7396			715.5649			825.3646		
Red. masses --		1.2693			1.0968			1.1781		
Frc consts --		0.3568			0.3309			0.4728		
IR Inten --		4.3541			479.6557			0.0219		
Atom	AN	X	Y	Z	X	Y	Z	X	Y	Z
1	13	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
2	13	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
3	13	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
4	13	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
5	3	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
6	3	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
7	3	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
8	11	0.00	0.00	0.00	-0.01	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
9	6	-0.03	0.00	0.00	0.04	0.00	-0.01	-0.06	0.02	0.01
10	6	0.08	0.00	-0.01	0.03	0.00	-0.01	0.08	-0.01	0.00
11	6	-0.09	0.00	0.02	0.04	0.00	-0.01	0.03	0.00	-0.01
12	1	0.17	0.00	-0.03	-0.42	0.02	0.09	0.52	0.00	-0.13
13	6	0.08	0.00	-0.02	0.04	0.00	-0.01	-0.06	-0.01	0.00
14	1	-0.53	0.01	0.10	-0.42	0.01	0.08	-0.60	0.00	0.13
15	6	-0.03	0.00	0.01	0.04	0.00	-0.01	0.02	0.00	-0.01
16	1	0.60	-0.01	-0.14	-0.45	0.01	0.11	-0.22	-0.02	0.06

17	1	-0.49	-0.01	0.10	-0.43	-0.01	0.08	0.48	0.00	-0.12
18	1	0.18	0.01	-0.04	-0.45	-0.01	0.10	-0.16	0.02	0.06

	31	32	33
	A	A	A
Frequencies --	826.7323	857.1556	857.4253
Red. masses --	1.1774	4.3549	4.3551
Frc consts --	0.4741	1.8852	1.8864
IR Inten --	0.0740	0.0034	0.0036

Atom	AN	X	Y	Z	X	Y	Z	X	Y	Z
1	13	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
2	13	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
3	13	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
4	13	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
5	3	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
6	3	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
7	3	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
8	11	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
9	6	-0.04	0.01	0.01	0.03	0.19	0.07	-0.01	-0.27	0.08
10	6	0.00	0.00	0.00	0.03	-0.11	0.29	-0.02	-0.07	-0.14
11	6	0.07	-0.01	-0.03	0.00	0.11	-0.03	0.09	0.12	0.30
12	1	0.35	0.00	-0.05	-0.13	0.16	-0.32	0.05	-0.29	-0.21
13	6	0.05	0.01	-0.01	-0.01	-0.29	-0.15	-0.02	-0.02	-0.13
14	1	0.02	-0.03	-0.01	0.17	0.06	0.31	-0.04	0.39	-0.01
15	6	-0.07	-0.01	0.03	-0.05	0.10	-0.19	-0.04	0.24	-0.11
16	1	-0.57	0.01	0.12	0.03	-0.36	0.16	-0.04	0.14	0.32
17	1	-0.39	0.02	0.06	-0.15	-0.21	-0.23	0.03	-0.28	0.27
18	1	0.59	0.00	-0.12	0.08	0.36	0.09	0.01	0.04	-0.36

	34	35	36
	A	A	A
Frequencies --	1018.9887	1019.3661	1066.3379
Red. masses --	1.4504	1.4458	1.2532
Frc consts --	0.8873	0.8852	0.8396
IR Inten --	23.6493	21.2570	0.0224

Atom	AN	X	Y	Z	X	Y	Z	X	Y	Z
1	13	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
2	13	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
3	13	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
4	13	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
5	3	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
6	3	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
7	3	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
8	11	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
9	6	0.01	0.03	0.06	0.00	-0.10	0.02	0.02	0.01	0.09
10	6	-0.02	0.03	-0.10	0.01	0.06	0.03	0.00	-0.07	0.00

11	6	-0.02	-0.07	-0.07	-0.02	0.03	-0.07	0.00	0.07	-0.01
12	1	0.12	0.06	0.58	0.02	-0.10	0.12	0.13	0.04	0.61
13	6	0.01	-0.07	0.03	-0.02	-0.07	-0.07	-0.01	-0.01	-0.04
14	1	-0.02	0.09	-0.09	0.04	0.59	0.16	-0.04	-0.49	-0.10
15	6	0.00	0.09	-0.02	0.02	-0.03	0.08	-0.01	0.01	-0.04
16	1	0.00	-0.32	0.02	-0.05	0.47	-0.25	-0.02	0.47	-0.17
17	1	0.09	-0.33	0.43	-0.05	0.04	-0.25	-0.02	0.08	-0.18
18	1	0.05	0.33	0.26	0.08	0.23	0.38	-0.05	-0.09	-0.15

	37	38	39
	A	A	A
Frequencies --	1066.6669	1139.7134	1282.0983
Red. masses --	1.2534	5.8834	1.2806
Frc consts --	0.8402	4.5026	1.2403
IR Inten --	0.0237	5.5480	0.0001

Atom	AN	X	Y	Z	X	Y	Z	X	Y	Z
1	13	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
2	13	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
3	13	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
4	13	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
5	3	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
6	3	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
7	3	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
8	11	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
9	6	0.00	0.03	0.00	0.00	0.30	-0.02	0.01	0.00	0.07
10	6	0.01	0.04	0.03	-0.06	0.07	-0.28	0.00	0.07	0.02
11	6	-0.01	0.04	-0.04	0.06	0.11	0.27	0.01	-0.07	0.03
12	1	0.02	0.04	0.00	0.02	0.33	-0.03	-0.09	-0.03	-0.43
13	6	0.01	-0.05	0.07	-0.04	-0.25	-0.15	-0.01	0.04	-0.06
14	1	0.01	0.34	0.11	-0.05	0.08	-0.32	-0.03	-0.43	-0.10
15	6	-0.01	-0.06	-0.06	0.04	-0.23	0.19	-0.01	-0.04	-0.05
16	1	-0.04	0.33	-0.15	0.09	0.11	0.30	-0.03	0.41	-0.16
17	1	0.11	-0.33	0.49	-0.02	-0.28	-0.18	0.08	-0.24	0.37
18	1	-0.09	-0.39	-0.44	0.07	-0.25	0.21	0.07	0.28	0.33

	40	41	42
	A	A	A
Frequencies --	1374.3003	1375.3223	1461.9449
Red. masses --	4.8243	4.8487	2.5349
Frc consts --	5.3684	5.4036	3.1921
IR Inten --	0.0411	0.0044	4.0491

Atom	AN	X	Y	Z	X	Y	Z	X	Y	Z
1	13	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
2	13	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
3	13	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
4	13	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00

5	3	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
6	3	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
7	3	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
8	11	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
9	6	0.04	-0.08	0.26	-0.06	-0.12	-0.22	-0.04	-0.07	-0.17
10	6	-0.02	-0.03	-0.15	0.02	0.33	0.05	0.02	-0.01	0.13
11	6	-0.02	0.32	-0.11	0.04	0.02	0.14	0.01	0.16	0.04
12	1	-0.06	-0.13	-0.35	0.08	-0.09	0.33	0.11	-0.04	0.50
13	6	0.03	0.04	0.19	0.05	-0.22	0.23	-0.03	0.12	-0.15
14	1	-0.05	0.13	-0.11	-0.04	-0.45	-0.14	0.03	-0.12	0.13
15	6	-0.03	-0.25	-0.18	-0.06	-0.01	-0.21	0.00	-0.15	0.01
16	1	0.04	-0.44	0.19	0.00	0.10	0.12	0.05	-0.32	0.25
17	1	0.00	0.22	-0.09	-0.09	0.18	-0.40	0.10	-0.27	0.48
18	1	0.07	0.22	0.37	0.04	0.26	0.09	0.06	0.06	0.29

	43	44	45
	A	A	A
Frequencies --	1462.5610	3157.3666	3158.5213
Red. masses --	2.5480	1.0849	1.0849
Frc consts --	3.2113	6.3723	6.3772
IR Inten --	2.9414	0.3447	0.2163

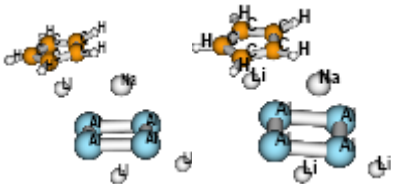
Atom	AN	X	Y	Z	X	Y	Z	X	Y	Z
1	13	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
2	13	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
3	13	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
4	13	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
5	3	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
6	3	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
7	3	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
8	11	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
9	6	0.02	-0.11	0.09	0.00	-0.04	0.00	0.00	0.03	0.00
10	6	0.01	0.19	0.03	-0.01	0.01	-0.06	0.00	0.00	0.00
11	6	-0.03	0.09	-0.14	0.00	0.01	0.02	-0.01	-0.02	-0.05
12	1	-0.05	-0.16	-0.23	0.01	0.49	-0.04	-0.01	-0.32	0.02
13	6	-0.02	-0.09	-0.10	0.00	0.03	0.02	0.00	0.03	0.02
14	1	-0.04	-0.53	-0.15	0.12	-0.17	0.66	0.01	-0.01	0.05
15	6	0.04	0.06	0.17	0.00	-0.01	0.01	0.01	-0.04	0.03
16	1	0.01	-0.42	0.04	-0.05	-0.08	-0.19	0.14	0.23	0.55
17	1	-0.01	-0.19	0.00	-0.04	-0.39	-0.24	-0.04	-0.33	-0.20
18	1	-0.07	-0.38	-0.33	-0.02	0.10	-0.08	-0.09	0.46	-0.38

	46	47	48
	A	A	A
Frequencies --	3177.5342	3179.7092	3196.1979
Red. masses --	1.0950	1.0951	1.1040
Frc consts --	6.5140	6.5237	6.6451

IR Inten	--	56.5782			51.8180			8.0068		
Atom	AN	X	Y	Z	X	Y	Z	X	Y	Z
1	13	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
2	13	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
3	13	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
4	13	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
5	3	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
6	3	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
7	3	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
8	11	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
9	6	0.00	-0.01	0.00	0.00	-0.06	0.00	0.00	-0.04	0.00
10	6	0.01	-0.01	0.05	0.00	0.00	0.01	0.01	-0.01	0.04
11	6	0.01	0.02	0.04	-0.01	-0.01	-0.02	-0.01	-0.02	-0.04
12	1	0.00	0.13	0.00	0.01	0.65	-0.05	0.01	0.46	-0.03
13	6	0.00	0.03	0.01	0.00	-0.04	-0.03	0.00	0.04	0.02
14	1	-0.10	0.14	-0.55	-0.02	0.02	-0.09	-0.07	0.10	-0.38
15	6	0.01	-0.03	0.02	0.01	-0.03	0.03	-0.01	0.03	-0.03
16	1	-0.12	-0.21	-0.49	0.06	0.09	0.24	0.10	0.16	0.40
17	1	-0.03	-0.30	-0.18	0.05	0.46	0.29	-0.04	-0.39	-0.24
18	1	-0.07	0.36	-0.28	-0.07	0.33	-0.27	0.07	-0.36	0.29

$CpNaAl_4Li_3^- \rightarrow CpNa + Al_4Li_3^-$ **-27.45341512**

$CpNaAl_4Li_3^- \rightarrow Cp^- + Al_4Li_3Na$ **-47.35638494**



Charge = -1 Multiplicity = 1

Al,0,2.6863780375,-0.5599756345,1.3902058856
Al,0,0.9552004119,1.5402566584,1.1310895842
Al,0,0.9916930966,1.3268600086,-1.345604946
Al,0,2.7273442781,-0.7828447204,-1.1888254651
Li,0,-1.7121865571,0.8179317268,-0.0941156638
Li,0,4.9792164953,-1.0152232386,0.1670226973
Li,0,3.4234429818,1.7249759586,-0.0981789098
Na,0,0.0133665626,-1.4382437118,0.1237359598
C,0,-2.8452439203,-1.029201494,0.7571425183
C,0,-3.5088023083,0.179932967,1.0792315342
C,0,-2.8200530352,-1.1515100882,-0.6575245873
H,0,-2.4848141793,-1.7563510935,1.4782968056
C,0,-3.9002445485,0.7999122215,-0.1327203412
H,0,-3.6864085128,0.5582362927,2.0780551624

C,0,-3.4678881845,-0.0174505202,-1.205676532
H,0,-2.436780746,-1.9906827418,-1.229932373
H,0,-4.4365921652,1.7370153004,-0.2234042593
H,0,-3.6084690772,0.1834591568,-2.2602565796

State=1-A\HF=-1348.3731136

		1			2			3		
		A			A			A		
Frequencies --		17.7585			35.0042			49.0426		
Red. masses --		4.2643			11.2601			9.6365		
Frc consts --		0.0008			0.0081			0.0137		
IR Inten --		0.1339			0.0990			0.1815		
Atom	AN	X	Y	Z	X	Y	Z	X	Y	Z
1	13	0.02	-0.06	0.04	-0.18	-0.01	0.07	0.19	0.00	-0.01
2	13	0.01	-0.05	-0.04	-0.08	-0.05	-0.12	-0.06	0.19	0.00
3	13	-0.01	0.05	-0.04	0.08	0.05	-0.12	-0.06	0.19	-0.01
4	13	-0.02	0.06	0.04	0.18	0.01	0.07	0.19	0.00	0.01
5	3	0.00	0.00	-0.01	0.00	0.00	-0.01	-0.07	0.08	0.00
6	3	0.00	0.00	0.02	0.00	0.00	0.40	0.31	-0.53	0.00
7	3	0.00	0.00	-0.07	0.00	0.00	0.08	-0.11	-0.13	0.00
8	11	0.00	0.00	0.13	0.00	0.00	-0.44	0.07	0.03	0.00
9	6	0.05	0.11	-0.20	0.08	0.02	0.07	-0.21	-0.07	0.00
10	6	0.08	0.18	0.03	0.13	0.03	0.17	-0.13	-0.12	0.00
11	6	-0.05	-0.11	-0.20	-0.08	-0.02	0.07	-0.21	-0.07	0.00
12	1	0.06	0.23	-0.35	0.16	0.03	0.01	-0.26	-0.05	-0.01
13	6	0.00	0.00	0.17	0.00	0.00	0.23	-0.07	-0.15	0.00
14	1	0.14	0.34	0.08	0.24	0.06	0.19	-0.10	-0.13	0.00
15	6	-0.07	-0.17	0.02	-0.13	-0.03	0.17	-0.13	-0.12	0.00
16	1	-0.06	-0.22	-0.35	-0.16	-0.03	0.01	-0.26	-0.05	0.00
17	1	0.00	0.00	0.35	0.00	0.00	0.32	0.00	-0.19	0.00
18	1	-0.14	-0.34	0.08	-0.24	-0.06	0.19	-0.10	-0.14	0.00

		4			5			6		
		A			A			A		
Frequencies --		76.2482			87.3743			88.6448		
Red. masses --		8.1777			6.0447			8.9477		
Frc consts --		0.0280			0.0272			0.0414		
IR Inten --		0.0740			0.6227			1.8924		
Atom	AN	X	Y	Z	X	Y	Z	X	Y	Z
1	13	-0.03	0.11	-0.04	0.01	0.02	0.04	0.10	0.05	-0.01
2	13	-0.14	0.12	-0.09	0.12	-0.03	0.13	0.14	-0.04	-0.01
3	13	0.15	-0.12	-0.09	-0.11	0.02	0.13	0.16	-0.04	-0.01
4	13	0.03	-0.11	-0.04	0.00	-0.01	0.04	0.10	0.06	0.00
5	3	0.00	0.00	-0.33	-0.01	-0.01	-0.35	-0.24	-0.10	0.04
6	3	0.00	0.00	0.02	0.01	0.00	0.00	0.08	0.13	0.00

7	3	0.00	0.00	0.35	0.01	0.01	-0.34	0.18	0.09	0.03
8	11	0.00	0.00	0.24	-0.01	-0.02	-0.07	-0.06	-0.32	0.00
9	6	0.12	-0.06	0.00	0.13	-0.06	-0.06	-0.10	0.04	0.01
10	6	0.20	-0.09	0.03	0.19	-0.09	-0.04	-0.24	0.12	0.00
11	6	-0.12	0.05	0.00	-0.13	0.07	-0.06	-0.07	0.03	0.01
12	1	0.21	-0.09	0.00	0.23	-0.11	-0.05	-0.02	0.00	0.01
13	6	0.00	0.00	0.04	-0.02	0.01	-0.03	-0.31	0.16	0.00
14	1	0.38	-0.17	0.03	0.38	-0.18	-0.04	-0.31	0.16	0.00
15	6	-0.20	0.09	0.02	-0.22	0.11	-0.04	-0.20	0.10	0.00
16	1	-0.21	0.09	0.00	-0.23	0.11	-0.05	0.03	-0.02	0.01
17	1	0.00	0.00	0.07	-0.03	0.02	-0.01	-0.43	0.23	0.00
18	1	-0.38	0.17	0.03	-0.41	0.20	-0.04	-0.23	0.12	0.00

	7	8	9
	A	A	A
Frequencies --	98.9365	108.6800	134.4634
Red. masses --	9.6748	19.5748	8.5615
Frc consts --	0.0558	0.1362	0.0912
IR Inten --	14.0086	1.2256	0.9295

Atom	AN	X	Y	Z	X	Y	Z	X	Y	Z
1	13	0.09	-0.14	0.02	0.34	-0.17	0.26	0.08	-0.05	0.01
2	13	0.01	-0.04	-0.01	-0.15	0.22	-0.06	-0.16	0.17	0.00
3	13	0.01	-0.04	0.01	0.15	-0.22	-0.06	-0.16	0.17	0.00
4	13	0.08	-0.15	-0.02	-0.34	0.17	0.26	0.08	-0.05	-0.01
5	3	-0.05	0.18	-0.01	0.00	0.00	-0.07	-0.06	-0.15	0.00
6	3	-0.19	0.68	0.00	0.00	0.00	-0.53	-0.13	0.44	0.00
7	3	0.08	0.00	0.00	0.00	0.00	0.02	-0.16	-0.06	0.00
8	11	0.25	0.22	0.00	0.00	0.00	-0.27	0.04	-0.20	0.00
9	6	-0.20	0.01	0.00	0.03	-0.02	0.00	0.23	-0.13	0.00
10	6	-0.13	-0.03	0.00	0.06	-0.03	0.00	0.04	-0.02	0.00
11	6	-0.21	0.01	0.00	-0.03	0.02	0.00	0.23	-0.13	0.00
12	1	-0.24	0.03	-0.01	0.08	-0.04	0.00	0.37	-0.20	0.01
13	6	-0.08	-0.06	0.00	0.00	0.00	0.00	-0.07	0.04	0.00
14	1	-0.11	-0.04	0.00	0.11	-0.06	0.00	0.00	0.00	0.00
15	6	-0.14	-0.03	0.00	-0.05	0.03	0.00	0.04	-0.02	0.00
16	1	-0.25	0.04	0.00	-0.08	0.04	0.00	0.37	-0.20	-0.01
17	1	-0.01	-0.10	0.00	0.00	0.00	0.01	-0.22	0.13	0.00
18	1	-0.12	-0.04	0.00	-0.11	0.06	0.00	0.00	0.00	0.00

	10	11	12
	A	A	A
Frequencies --	136.7231	146.6594	151.2115
Red. masses --	11.5226	21.5062	5.4655
Frc consts --	0.1269	0.2725	0.0736
IR Inten --	2.1573	1.1307	0.9526

Atom	AN	X	Y	Z	X	Y	Z	X	Y	Z

1	13	-0.12	0.07	0.10	0.08	0.37	0.25	-0.05	0.06	0.01
2	13	0.05	0.28	-0.10	0.29	-0.12	-0.24	0.02	-0.03	0.00
3	13	-0.05	-0.28	-0.10	-0.29	0.12	-0.24	0.02	-0.03	0.00
4	13	0.12	-0.07	0.10	-0.08	-0.37	0.25	-0.05	0.06	-0.01
5	3	0.00	0.00	0.09	0.00	0.00	0.04	-0.11	-0.10	0.00
6	3	0.00	0.00	0.18	0.00	0.00	-0.32	0.03	-0.18	0.00
7	3	0.00	0.00	-0.78	0.00	0.00	0.39	-0.01	0.03	0.00
8	11	0.00	0.00	0.11	0.00	0.00	-0.05	0.19	0.19	0.00
9	6	-0.05	0.03	0.02	-0.01	0.01	-0.01	0.16	-0.16	0.00
10	6	-0.08	0.04	0.02	-0.02	0.01	-0.01	-0.10	-0.02	0.00
11	6	0.05	-0.03	0.02	0.01	-0.01	-0.01	0.16	-0.16	0.00
12	1	-0.09	0.05	0.02	-0.03	0.02	-0.01	0.34	-0.26	0.01
13	6	0.00	0.00	0.02	0.00	0.00	-0.01	-0.25	0.07	0.00
14	1	-0.15	0.08	0.02	-0.05	0.03	-0.01	-0.17	0.01	0.00
15	6	0.08	-0.04	0.02	0.02	-0.01	-0.01	-0.10	-0.02	0.00
16	1	0.09	-0.05	0.02	0.03	-0.02	-0.01	0.34	-0.26	-0.01
17	1	0.00	0.00	0.02	0.00	0.00	-0.01	-0.46	0.19	0.00
18	1	0.15	-0.08	0.02	0.05	-0.03	-0.01	-0.16	0.01	0.00

	13	14	15
	A	A	A
Frequencies --	181.7188	206.7162	222.6337
Red. masses --	15.8267	12.8106	17.7579
Frc consts --	0.3079	0.3225	0.5186
IR Inten --	32.0376	5.3406	4.7824

Atom	AN	X	Y	Z	X	Y	Z	X	Y	Z
1	13	-0.11	0.17	0.03	0.08	-0.16	-0.07	-0.24	-0.23	0.12
2	13	-0.11	-0.07	0.01	0.27	0.17	-0.06	0.20	0.30	-0.05
3	13	-0.12	-0.07	-0.01	-0.28	-0.18	-0.06	0.19	0.29	0.04
4	13	-0.11	0.17	-0.03	-0.07	0.17	-0.07	-0.24	-0.23	-0.13
5	3	0.02	0.24	0.00	0.00	0.00	0.05	0.01	0.01	0.00
6	3	-0.04	-0.08	0.00	0.01	0.00	0.63	-0.38	-0.31	0.02
7	3	-0.12	0.19	0.01	-0.01	0.00	0.52	0.44	0.12	0.00
8	11	0.57	-0.38	0.00	0.00	0.00	-0.01	0.14	-0.12	0.00
9	6	-0.12	0.08	0.00	0.03	-0.02	-0.02	-0.02	0.01	0.00
10	6	0.04	-0.01	0.00	0.05	-0.03	-0.02	-0.02	0.01	0.00
11	6	-0.12	0.08	0.00	-0.03	0.02	-0.02	-0.02	0.01	0.00
12	1	-0.19	0.12	-0.02	0.05	-0.03	-0.02	-0.02	0.01	0.00
13	6	0.14	-0.07	0.00	0.00	0.00	-0.02	-0.02	0.00	0.00
14	1	0.09	-0.04	0.00	0.08	-0.05	-0.02	-0.03	0.01	0.00
15	6	0.04	-0.01	0.00	-0.05	0.03	-0.02	-0.02	0.01	0.00
16	1	-0.19	0.12	0.02	-0.05	0.03	-0.02	-0.02	0.01	0.00
17	1	0.29	-0.16	0.00	0.00	0.00	-0.02	-0.02	0.01	0.00
18	1	0.08	-0.04	0.00	-0.08	0.05	-0.02	-0.03	0.01	0.00

	16	17	18

		A			A			A		
Frequencies --		244.5058			246.9754			281.2094		
Red. masses --		8.2167			11.8006			20.3845		
Frc consts --		0.2894			0.4241			0.9498		
IR Inten --		6.2471			7.1071			4.6428		
Atom	AN	X	Y	Z	X	Y	Z	X	Y	Z
1	13	-0.06	0.06	-0.04	0.28	0.16	-0.05	0.12	0.07	0.55
2	13	0.14	0.04	0.02	-0.11	-0.07	-0.01	0.01	-0.07	-0.07
3	13	0.14	0.04	-0.02	0.10	0.06	0.00	0.01	-0.07	0.07
4	13	-0.07	0.05	0.03	-0.27	-0.16	-0.05	0.12	0.07	-0.55
5	3	0.01	-0.03	0.00	0.00	0.00	-0.06	-0.02	-0.06	0.00
6	3	-0.09	0.13	0.03	0.01	0.00	0.80	-0.35	-0.11	0.00
7	3	-0.50	-0.81	-0.01	0.02	0.04	-0.30	-0.43	0.02	0.00
8	11	0.05	-0.02	0.00	0.00	0.00	-0.03	-0.09	0.04	0.00
9	6	-0.03	0.02	0.00	-0.02	0.01	0.01	0.00	0.01	0.00
10	6	-0.01	0.01	0.00	-0.03	0.02	0.01	0.01	0.00	0.00
11	6	-0.03	0.02	0.00	0.02	-0.01	0.01	0.00	0.01	0.00
12	1	-0.05	0.03	0.00	-0.03	0.02	0.01	-0.02	0.02	0.00
13	6	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.01	0.01	0.00	0.00
14	1	-0.01	0.01	0.00	-0.05	0.03	0.01	0.01	0.00	0.00
15	6	-0.01	0.01	0.00	0.03	-0.02	0.01	0.01	0.00	0.00
16	1	-0.05	0.03	0.00	0.04	-0.02	0.01	-0.02	0.02	0.00
17	1	0.01	-0.01	0.00	0.00	0.00	0.01	0.02	-0.01	0.00
18	1	-0.01	0.01	0.00	0.05	-0.03	0.01	0.01	0.00	0.00

		19			20			21		
		A			A			A		
Frequencies --		294.3757			311.1646			338.4993		
Red. masses --		6.0928			6.8880			8.7650		
Frc consts --		0.3111			0.3929			0.5917		
IR Inten --		0.0106			31.2899			8.1922		
Atom	AN	X	Y	Z	X	Y	Z	X	Y	Z
1	13	0.00	0.02	0.00	-0.01	0.00	0.01	-0.03	0.07	0.08
2	13	-0.03	-0.01	-0.01	0.02	-0.01	-0.02	-0.10	-0.01	-0.15
3	13	0.03	0.01	-0.01	0.02	-0.01	0.02	-0.10	-0.01	0.15
4	13	0.00	-0.02	0.00	-0.01	0.00	-0.01	-0.03	0.07	-0.08
5	3	0.00	-0.01	0.78	0.07	0.91	0.00	-0.03	-0.06	0.00
6	3	0.00	0.00	0.02	0.02	0.01	0.00	0.24	0.11	0.00
7	3	0.00	0.00	-0.06	0.01	-0.06	0.00	0.71	-0.58	0.00
8	11	0.00	0.00	0.01	-0.09	-0.06	0.00	0.01	0.00	0.00
9	6	0.12	-0.06	-0.08	0.10	-0.11	0.01	-0.01	0.01	0.00
10	6	0.15	-0.09	-0.07	-0.03	-0.04	0.00	0.01	0.00	0.00
11	6	-0.12	0.06	-0.08	0.09	-0.11	-0.01	-0.01	0.01	0.00
12	1	0.16	-0.09	-0.07	0.16	-0.14	0.01	-0.01	0.01	0.00
13	6	0.00	0.00	-0.08	-0.08	0.00	0.00	0.01	0.00	0.00

14	1	0.25	-0.15	-0.07	0.00	-0.07	-0.01	0.01	0.00	0.00
15	6	-0.15	0.09	-0.07	-0.03	-0.04	0.00	0.01	0.00	0.00
16	1	-0.16	0.09	-0.07	0.16	-0.14	-0.01	-0.01	0.01	0.00
17	1	0.00	0.00	-0.10	-0.05	-0.01	0.00	0.01	0.00	0.00
18	1	-0.25	0.15	-0.07	-0.01	-0.06	0.00	0.01	0.00	0.00

	22	23	24
	A	A	A
Frequencies --	345.5391	368.5742	471.1754
Red. masses --	18.3435	8.4673	5.8581
Frc consts --	1.2904	0.6777	0.7663
IR Inten --	7.7486	3.3008	106.4233

Atom	AN	X	Y	Z	X	Y	Z	X	Y	Z
1	13	-0.07	-0.02	0.17	-0.10	-0.07	0.06	0.00	0.00	0.00
2	13	-0.03	0.02	0.50	0.04	0.02	-0.13	-0.02	0.00	0.00
3	13	-0.03	0.02	-0.50	0.04	0.02	0.13	-0.02	0.00	0.00
4	13	-0.07	-0.02	-0.17	-0.10	-0.07	-0.06	0.00	0.00	0.00
5	3	0.01	0.03	0.00	0.00	-0.03	0.00	0.86	-0.08	0.00
6	3	0.53	0.17	0.00	0.84	0.25	0.00	0.00	0.01	0.00
7	3	0.30	-0.18	0.00	-0.35	0.20	0.00	0.00	0.00	0.00
8	11	-0.01	0.01	0.00	0.01	-0.01	0.00	0.00	-0.02	0.00
9	6	0.00	-0.01	0.00	0.00	0.00	0.00	-0.02	-0.02	0.00
10	6	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	-0.10	0.02	-0.01
11	6	0.01	-0.01	0.00	0.00	0.00	0.00	-0.02	-0.02	0.00
12	1	0.01	-0.01	0.00	-0.01	0.01	0.00	-0.10	0.03	0.00
13	6	-0.01	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	-0.10	0.04	0.00
14	1	-0.01	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	-0.23	0.09	-0.01
15	6	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	-0.10	0.02	0.00
16	1	0.01	-0.01	0.00	-0.01	0.01	0.00	-0.10	0.03	0.00
17	1	-0.01	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	-0.26	0.13	0.00
18	1	-0.01	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	-0.23	0.09	0.01

	25	26	27
	A	A	A
Frequencies --	625.2389	635.1751	723.2427
Red. masses --	5.0107	4.2213	1.2605
Frc consts --	1.1541	1.0034	0.3885
IR Inten --	0.0589	0.0237	5.0347

Atom	AN	X	Y	Z	X	Y	Z	X	Y	Z
1	13	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
2	13	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
3	13	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
4	13	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
5	3	0.00	0.00	-0.03	0.03	0.02	0.00	0.00	0.00	-0.01
6	3	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
7	3	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00

8	11	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
9	6	0.33	-0.17	0.01	-0.09	0.05	-0.01	0.04	-0.01	0.01
10	6	-0.18	0.10	-0.01	0.23	-0.14	0.01	0.08	-0.05	0.00
11	6	-0.33	0.17	0.01	-0.09	0.05	0.01	-0.04	0.01	0.01
12	1	0.32	-0.17	0.02	-0.17	0.08	-0.01	-0.41	0.21	-0.02
13	6	0.00	0.00	0.01	-0.30	0.19	0.00	0.00	0.00	0.00
14	1	-0.39	0.20	-0.01	0.35	-0.22	0.01	-0.46	0.25	0.00
15	6	0.18	-0.10	-0.01	0.23	-0.14	-0.01	-0.08	0.05	0.00
16	1	-0.31	0.17	0.02	-0.17	0.08	0.01	0.41	-0.21	-0.01
17	1	0.00	0.00	0.02	-0.46	0.28	0.00	0.00	0.00	0.01
18	1	0.38	-0.20	-0.01	0.36	-0.22	-0.01	0.46	-0.25	0.00

	28	29	30
	A	A	A
Frequencies --	732.3844	750.3677	840.8373
Red. masses --	1.2688	1.1276	1.2173
Frc consts --	0.4010	0.3741	0.5071
IR Inten --	28.2517	465.8796	0.1688

Atom	AN	X	Y	Z	X	Y	Z	X	Y	Z
1	13	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
2	13	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
3	13	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
4	13	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
5	3	-0.01	-0.01	0.00	-0.04	0.02	0.00	0.00	0.00	0.00
6	3	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
7	3	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
8	11	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
9	6	0.08	-0.04	0.00	0.03	-0.02	0.00	-0.07	-0.01	-0.04
10	6	-0.03	0.01	0.00	0.04	-0.02	0.00	0.04	-0.03	0.02
11	6	0.07	-0.04	0.00	0.03	-0.02	0.00	0.07	0.01	-0.04
12	1	-0.50	0.28	-0.06	-0.33	0.17	-0.03	0.45	-0.31	0.03
13	6	-0.07	0.05	0.00	0.05	-0.03	0.00	0.00	0.00	0.01
14	1	0.11	-0.07	0.00	-0.41	0.23	0.00	-0.34	0.27	0.05
15	6	-0.03	0.01	0.00	0.04	-0.02	0.00	-0.04	0.03	0.02
16	1	-0.50	0.28	0.06	-0.33	0.17	0.03	-0.45	0.31	0.03
17	1	0.46	-0.26	0.00	-0.45	0.26	0.00	0.00	0.00	-0.06
18	1	0.12	-0.07	0.00	-0.41	0.23	0.00	0.34	-0.27	0.05

	31	32	33
	A	A	A
Frequencies --	858.2520	861.5679	863.8627
Red. masses --	1.1948	4.4062	3.7259
Frc consts --	0.5185	1.9271	1.6382
IR Inten --	0.2393	1.0262	0.0392

Atom	AN	X	Y	Z	X	Y	Z	X	Y	Z
1	13	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00

2	13	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
3	13	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
4	13	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
5	3	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
6	3	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
7	3	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
8	11	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
9	6	0.02	-0.01	0.00	-0.07	-0.13	0.02	0.06	0.20	0.19
10	6	-0.05	0.04	-0.01	-0.03	-0.01	0.28	0.10	0.11	-0.14
11	6	0.02	-0.01	0.00	-0.07	-0.13	-0.02	-0.06	-0.20	0.19
12	1	-0.16	0.07	0.01	0.10	0.11	-0.37	0.40	0.09	0.12
13	6	0.06	-0.06	0.00	0.19	0.27	0.00	0.00	0.00	-0.10
14	1	0.45	-0.23	-0.01	-0.08	-0.29	0.19	-0.26	-0.06	-0.25
15	6	-0.05	0.04	0.01	-0.03	-0.01	-0.28	-0.10	-0.11	-0.14
16	1	-0.16	0.07	-0.01	0.10	0.11	0.37	-0.40	-0.09	0.12
17	1	-0.56	0.30	0.00	0.08	0.34	0.00	0.00	0.00	0.36
18	1	0.45	-0.23	0.01	-0.08	-0.29	-0.19	0.26	0.06	-0.25

	34	35	36
	A	A	A
Frequencies --	1023.7547	1027.5862	1073.1720
Red. masses --	1.4580	1.4356	1.2406
Frc consts --	0.9003	0.8932	0.8419
IR Inten --	24.8273	14.6395	0.2700

Atom	AN	X	Y	Z	X	Y	Z	X	Y	Z
1	13	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
2	13	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
3	13	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
4	13	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
5	3	-0.01	-0.01	0.00	0.00	0.00	-0.01	0.00	0.00	0.00
6	3	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
7	3	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
8	11	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
9	6	0.02	0.04	0.09	0.04	0.08	0.00	0.01	0.00	0.03
10	6	-0.02	-0.04	-0.04	-0.02	-0.04	0.09	0.03	0.06	0.01
11	6	0.02	0.04	-0.09	-0.04	-0.08	0.00	-0.01	0.00	0.04
12	1	-0.10	-0.14	0.38	0.22	0.28	-0.35	-0.08	-0.05	0.15
13	6	0.06	0.10	0.00	0.00	0.00	-0.07	0.00	0.00	-0.09
14	1	-0.25	-0.44	-0.20	-0.13	-0.17	0.04	0.24	0.40	0.13
15	6	-0.02	-0.04	0.04	0.02	0.04	0.09	-0.03	-0.07	0.01
16	1	-0.10	-0.13	-0.38	-0.22	-0.28	-0.35	0.09	0.07	0.19
17	1	0.06	0.10	0.00	0.00	0.00	-0.60	0.00	0.00	-0.63
18	1	-0.25	-0.45	0.19	0.13	0.17	0.04	-0.26	-0.42	0.14

	37	38	39
	A	A	A

Frequencies --		1073.9399			1143.1027			1286.8814		
Red. masses --		1.2485			5.8318			1.2794		
Frc consts --		0.8484			4.4897			1.2483		
IR Inten --		3.2798			5.1947			0.0225		
Atom	AN	X	Y	Z	X	Y	Z	X	Y	Z
1	13	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
2	13	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
3	13	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
4	13	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
5	3	0.00	0.00	0.00	0.01	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
6	3	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
7	3	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
8	11	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
9	6	-0.03	-0.05	0.06	0.12	0.21	0.18	-0.02	-0.04	0.06
10	6	0.02	0.04	0.05	-0.04	-0.08	0.28	-0.03	-0.06	-0.02
11	6	-0.03	-0.05	-0.06	0.12	0.21	-0.17	0.02	0.04	0.06
12	1	-0.20	-0.29	0.45	0.12	0.27	0.15	0.14	0.23	-0.35
13	6	0.01	0.02	0.00	-0.15	-0.26	0.00	0.00	0.00	-0.07
14	1	0.19	0.35	0.16	-0.08	-0.08	0.31	0.20	0.37	0.14
15	6	0.02	0.04	-0.05	-0.04	-0.08	-0.28	0.03	0.06	-0.02
16	1	-0.19	-0.29	-0.44	0.12	0.27	-0.15	-0.14	-0.22	-0.35
17	1	0.02	0.01	-0.02	-0.19	-0.28	0.00	0.00	0.00	0.44
18	1	0.17	0.32	-0.15	-0.08	-0.07	-0.32	-0.20	-0.37	0.13

		40			41			42		
		A			A			A		
Frequencies --		1377.5869			1384.8258			1468.1689		
Red. masses --		4.7612			4.8773			2.5216		
Frc consts --		5.3236			5.5109			3.2024		
IR Inten --		0.0004			0.6674			3.1263		
Atom	AN	X	Y	Z	X	Y	Z	X	Y	Z
1	13	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
2	13	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
3	13	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
4	13	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
5	3	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
6	3	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
7	3	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
8	11	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
9	6	0.07	0.17	0.00	-0.08	-0.14	0.29	-0.01	-0.01	-0.15
10	6	-0.11	-0.21	-0.16	0.12	0.19	-0.06	0.08	0.14	0.10
11	6	-0.07	-0.17	-0.01	-0.08	-0.13	-0.29	-0.01	-0.03	0.14
12	1	0.06	0.00	0.22	0.18	0.28	-0.35	-0.16	-0.26	0.20
13	6	0.00	0.00	0.33	-0.08	-0.12	0.00	-0.07	-0.12	-0.01
14	1	0.20	0.37	0.05	-0.11	-0.17	-0.20	-0.26	-0.46	-0.11

15	6	0.11	0.21	-0.16	0.12	0.19	0.06	0.08	0.15	-0.09
16	1	-0.06	0.01	0.22	0.18	0.28	0.35	-0.15	-0.25	-0.17
17	1	0.00	0.00	-0.44	-0.06	-0.14	0.00	-0.08	-0.15	0.02
18	1	-0.20	-0.37	0.05	-0.11	-0.17	0.20	-0.26	-0.47	0.13

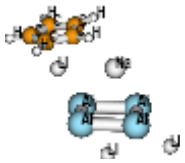
		43			44			45		
		A			A			A		
Frequencies --		1468.7925			3153.3272			3170.7990		
Red. masses --		2.5704			1.0868			1.0934		
Frc consts --		3.2671			6.3670			6.4767		
IR Inten --		0.0508			2.4034			11.5014		
Atom	AN	X	Y	Z	X	Y	Z	X	Y	Z
1	13	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
2	13	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
3	13	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
4	13	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
5	3	0.00	0.00	0.01	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
6	3	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
7	3	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
8	11	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
9	6	-0.07	-0.14	0.07	-0.02	-0.04	-0.03	-0.02	-0.04	-0.04
10	6	0.05	0.09	-0.10	0.00	0.00	0.01	0.00	0.00	0.02
11	6	0.07	0.13	0.09	0.02	0.04	-0.03	-0.02	-0.04	0.04
12	1	0.09	0.16	-0.41	0.23	0.50	0.41	0.22	0.47	0.39
13	6	0.00	-0.01	0.20	0.00	0.00	0.00	0.01	0.01	0.00
14	1	-0.07	-0.11	-0.21	0.02	0.03	-0.12	0.04	0.07	-0.24
15	6	-0.04	-0.07	-0.11	0.00	0.00	0.01	0.00	0.00	-0.02
16	1	-0.10	-0.18	-0.42	-0.24	-0.51	0.41	0.22	0.47	-0.39
17	1	0.00	-0.01	-0.57	0.00	0.00	0.00	-0.08	-0.14	0.00
18	1	0.05	0.07	-0.20	-0.02	-0.03	-0.12	0.04	0.06	0.24

		46			47			48		
		A			A			A		
Frequencies --		3184.9661			3202.8314			3213.3736		
Red. masses --		1.0903			1.0946			1.1026		
Frc consts --		6.5164			6.6156			6.7079		
IR Inten --		17.1218			18.7798			9.5977		
Atom	AN	X	Y	Z	X	Y	Z	X	Y	Z
1	13	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
2	13	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
3	13	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
4	13	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
5	3	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
6	3	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
7	3	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
8	11	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00

9	6	-0.01	-0.01	-0.01	-0.01	-0.01	0.00	-0.01	-0.01	-0.01
10	6	0.01	0.01	-0.02	0.01	0.02	-0.06	0.01	0.01	-0.05
11	6	-0.01	-0.01	0.01	0.00	0.01	0.00	-0.01	-0.01	0.01
12	1	0.07	0.16	0.13	0.04	0.09	0.07	0.05	0.12	0.09
13	6	-0.04	-0.06	0.00	0.00	0.00	0.00	0.02	0.04	0.00
14	1	-0.05	-0.09	0.29	-0.11	-0.19	0.66	-0.09	-0.15	0.55
15	6	0.01	0.01	0.02	-0.01	-0.02	-0.06	0.01	0.01	0.05
16	1	0.07	0.16	-0.13	-0.04	-0.09	0.07	0.06	0.12	-0.09
17	1	0.42	0.73	0.00	0.00	-0.01	-0.01	-0.25	-0.44	0.00
18	1	-0.05	-0.09	-0.29	0.10	0.18	0.66	-0.09	-0.16	-0.56

$CpNaAl_4Li_3^- \rightarrow CpLi + Al_4Li_2Na^-$ **-23.25694534**

$CpNaAl_4Li_3^- \rightarrow Cp^- + Al_4Li_3Na$ **-60.18951897**



Charge = -1 Multiplicity = 1

Al,0,2.7209574695,-0.7384084525,1.2516888889
Al,0,0.9826432959,1.3744076495,1.3132228512
Al,0,0.9628102643,1.4883846267,-1.1707851077
Al,0,2.7008763967,-0.6162207593,-1.3331211409
Li,0,-1.7137625284,0.819571272,0.0533667671
Li,0,4.9868447993,-1.0128560328,-0.0760665634
Li,0,3.4221035739,1.7285341963,0.0641832538
Na,0,0.0147085257,-1.4423135412,-0.0543125809
C,0,-3.8997040233,0.8036580924,0.1348239021
C,0,-3.5280376669,0.2216906091,-1.1028025389
C,0,-3.4530432818,-0.0479947035,1.1738226791
H,0,-4.4327627367,1.7380875111,0.2643391642
C,0,-2.8624479501,-0.9975512484,-0.8304461867
H,0,-3.7191222865,0.6325412894,-2.0862074576
C,0,-2.8152686338,-1.1648624333,0.5790443803
H,0,-3.5791568971,0.1185742992,2.2361395557
H,0,-2.5034688267,-1.696611081,-1.578718316
H,0,-2.436567778,-2.0286531058,1.1177102648

State=1-A\HF=-1348.3730983

	1	2	3
	A	A	A
Frequencies --	8.4207	36.8823	48.5413
Red. masses --	4.1140	12.1816	9.4325

Frc consts --		0.0002			0.0098			0.0131		
IR Inten --		0.0865			0.1476			0.0643		
Atom	AN	X	Y	Z	X	Y	Z	X	Y	Z
1	13	0.01	-0.06	0.05	-0.21	0.02	0.06	0.17	0.02	-0.01
2	13	-0.01	-0.05	-0.05	-0.08	-0.04	-0.10	-0.07	0.20	0.00
3	13	0.00	0.07	-0.05	0.10	0.00	-0.10	-0.04	0.17	-0.01
4	13	0.02	0.06	0.05	0.17	-0.01	0.06	0.20	-0.02	0.01
5	3	0.00	0.02	-0.01	0.01	-0.02	-0.03	-0.06	0.07	-0.04
6	3	0.02	-0.03	0.07	-0.03	0.05	0.40	0.30	-0.52	0.02
7	3	-0.01	-0.01	-0.06	0.01	0.01	0.12	-0.11	-0.13	0.03
8	11	0.01	0.01	0.06	-0.02	-0.01	-0.48	0.07	0.04	-0.04
9	6	0.00	0.00	0.19	0.01	0.02	0.17	-0.07	-0.15	-0.02
10	6	-0.09	-0.18	0.06	-0.10	0.06	0.16	-0.13	-0.08	0.00
11	6	0.08	0.17	0.03	0.13	-0.03	0.16	-0.11	-0.16	0.01
12	1	0.02	0.01	0.37	0.01	0.02	0.19	0.01	-0.20	-0.04
13	6	-0.08	-0.12	-0.17	-0.04	0.04	0.14	-0.22	-0.04	0.04
14	1	-0.16	-0.33	0.13	-0.20	0.10	0.16	-0.12	-0.05	-0.01
15	6	0.03	0.09	-0.19	0.09	-0.02	0.14	-0.20	-0.09	0.04
16	1	0.15	0.32	0.08	0.24	-0.07	0.16	-0.07	-0.21	0.00
17	1	-0.11	-0.24	-0.31	-0.13	0.07	0.13	-0.27	0.01	0.07
18	1	0.03	0.20	-0.35	0.19	-0.06	0.14	-0.23	-0.10	0.07

			4			5			6	
			A			A			A	
Frequencies --		77.1930			86.7004			88.6570		
Red. masses --		8.1955			6.3455			8.6838		
Frc consts --		0.0288			0.0281			0.0402		
IR Inten --		0.1949			0.5808			2.0824		
Atom	AN	X	Y	Z	X	Y	Z	X	Y	Z
1	13	-0.03	0.10	-0.04	0.03	0.02	0.05	0.09	0.05	-0.02
2	13	-0.13	0.10	-0.09	0.16	-0.05	0.13	0.09	-0.02	-0.04
3	13	0.14	-0.13	-0.09	-0.07	0.01	0.13	0.18	-0.04	-0.05
4	13	0.01	-0.11	-0.04	0.01	-0.01	0.04	0.10	0.06	-0.01
5	3	0.00	0.01	-0.34	-0.06	-0.01	-0.34	-0.22	-0.10	0.12
6	3	-0.03	0.07	0.00	0.00	0.08	-0.01	0.09	0.09	0.00
7	3	0.02	0.01	0.34	0.05	0.03	-0.34	0.16	0.08	0.13
8	11	0.02	0.01	0.26	0.00	-0.06	-0.07	-0.07	-0.31	0.02
9	6	0.02	0.00	0.04	-0.07	0.03	-0.03	-0.29	0.15	0.01
10	6	-0.20	0.09	0.02	-0.26	0.12	-0.04	-0.15	0.07	0.02
11	6	0.20	-0.08	0.02	0.14	-0.07	-0.04	-0.27	0.14	0.01
12	1	0.04	-0.01	0.07	-0.08	0.04	-0.02	-0.42	0.22	0.01
13	6	-0.14	0.06	-0.01	-0.17	0.08	-0.06	-0.03	0.01	0.02
14	1	-0.38	0.16	0.03	-0.45	0.21	-0.04	-0.13	0.07	0.01
15	6	0.11	-0.04	-0.01	0.08	-0.04	-0.06	-0.11	0.05	0.02
16	1	0.39	-0.15	0.03	0.32	-0.15	-0.04	-0.37	0.19	0.01

17	1	-0.24	0.10	-0.02	-0.26	0.12	-0.06	0.09	-0.05	0.02
18	1	0.18	-0.06	-0.02	0.18	-0.09	-0.05	-0.05	0.02	0.02
			7			8			9	
			A			A			A	
Frequencies --			99.3285			108.8383			135.1061	
Red. masses --			9.5980			19.6339			8.4795	
Frc consts --			0.0558			0.1370			0.0912	
IR Inten --			13.4397			1.2277			0.7904	
Atom	AN	X	Y	Z	X	Y	Z	X	Y	Z
1	13	0.08	-0.15	0.01	0.35	-0.18	0.25	0.08	-0.05	0.00
2	13	0.01	-0.04	-0.01	-0.16	0.22	-0.07	-0.16	0.17	0.01
3	13	0.01	-0.03	0.00	0.15	-0.22	-0.07	-0.16	0.17	0.00
4	13	0.09	-0.14	-0.03	-0.34	0.17	0.26	0.08	-0.05	-0.01
5	3	-0.05	0.18	0.07	0.00	0.00	-0.06	-0.06	-0.15	-0.01
6	3	-0.18	0.66	0.02	-0.01	0.03	-0.54	-0.13	0.43	0.01
7	3	0.08	0.00	0.02	0.00	0.00	0.06	-0.16	-0.06	-0.01
8	11	0.25	0.22	-0.02	0.01	0.01	-0.28	0.04	-0.20	0.01
9	6	-0.09	-0.06	-0.01	0.00	0.00	0.00	-0.08	0.04	0.00
10	6	-0.09	-0.04	0.00	-0.05	0.02	0.00	0.02	-0.02	0.00
11	6	-0.18	-0.02	0.00	0.05	-0.03	0.00	0.06	-0.03	0.00
12	1	-0.03	-0.09	-0.02	0.00	-0.01	0.00	-0.23	0.13	0.00
13	6	-0.17	0.00	0.02	-0.03	0.02	0.00	0.21	-0.12	0.00
14	1	-0.03	-0.06	0.00	-0.10	0.05	0.00	-0.04	0.01	0.00
15	6	-0.23	0.02	0.02	0.02	-0.02	0.00	0.24	-0.13	-0.01
16	1	-0.21	-0.02	0.00	0.10	-0.06	0.00	0.04	-0.01	0.00
17	1	-0.19	0.02	0.03	-0.08	0.04	0.00	0.35	-0.20	-0.01
18	1	-0.28	0.04	0.02	0.07	-0.04	0.01	0.38	-0.20	0.00
			10			11			12	
			A			A			A	
Frequencies --			136.4935			146.7061			150.6915	
Red. masses --			11.6615			21.4465			5.5489	
Frc consts --			0.1280			0.2720			0.0742	
IR Inten --			2.0783			1.1889			1.0547	
Atom	AN	X	Y	Z	X	Y	Z	X	Y	Z
1	13	-0.12	0.07	0.10	0.09	0.37	0.25	-0.06	0.07	0.01
2	13	0.05	0.28	-0.10	0.28	-0.12	-0.24	0.02	-0.04	-0.01
3	13	-0.05	-0.28	-0.11	-0.29	0.13	-0.23	0.01	-0.03	0.00
4	13	0.12	-0.07	0.10	-0.07	-0.38	0.25	-0.06	0.06	0.00
5	3	0.00	0.00	0.09	0.01	0.01	0.05	-0.11	-0.10	0.00
6	3	0.00	-0.01	0.17	-0.01	0.03	-0.31	0.03	-0.19	-0.01
7	3	-0.01	0.00	-0.78	0.01	-0.01	0.39	-0.01	0.03	0.01
8	11	0.00	0.00	0.11	-0.01	-0.01	-0.05	0.20	0.19	0.00
9	6	-0.01	0.00	0.02	0.01	0.00	-0.01	-0.25	0.07	0.00
10	6	0.07	-0.04	0.02	0.03	-0.01	-0.01	-0.12	-0.01	0.00

11	6	-0.08	0.04	0.02	-0.02	0.01	-0.01	-0.09	-0.03	0.00
12	1	-0.01	0.00	0.02	0.03	-0.01	-0.01	-0.46	0.18	0.00
13	6	0.05	-0.03	0.02	0.01	0.00	-0.01	0.15	-0.16	0.00
14	1	0.14	-0.08	0.02	0.07	-0.03	-0.01	-0.19	0.03	0.00
15	6	-0.05	0.02	0.02	-0.02	0.02	-0.01	0.17	-0.17	0.00
16	1	-0.15	0.08	0.02	-0.05	0.03	-0.01	-0.13	0.00	0.00
17	1	0.09	-0.05	0.02	0.02	0.00	-0.01	0.32	-0.25	-0.01
18	1	-0.08	0.05	0.02	-0.05	0.03	-0.01	0.35	-0.26	0.01

	13	14	15
	A	A	A
Frequencies --	181.6933	206.5077	222.8177
Red. masses --	15.6477	12.8020	17.6163
Frc consts --	0.3044	0.3217	0.5153
IR Inten --	32.6107	5.3205	4.0666

Atom	AN	X	Y	Z	X	Y	Z	X	Y	Z
1	13	-0.10	0.17	0.03	0.07	-0.17	-0.07	-0.24	-0.22	0.13
2	13	-0.12	-0.07	0.01	0.28	0.18	-0.06	0.19	0.29	-0.04
3	13	-0.12	-0.07	-0.01	-0.27	-0.17	-0.06	0.20	0.30	0.04
4	13	-0.10	0.17	-0.03	-0.08	0.16	-0.07	-0.24	-0.23	-0.12
5	3	0.02	0.24	0.01	0.00	0.00	0.04	0.01	0.01	0.00
6	3	-0.03	-0.07	0.00	0.00	-0.01	0.63	-0.38	-0.31	-0.01
7	3	-0.13	0.18	0.00	0.01	0.01	0.52	0.45	0.12	-0.01
8	11	0.56	-0.38	-0.01	0.00	0.00	-0.01	0.14	-0.12	0.00
9	6	0.15	-0.07	0.00	0.00	0.00	-0.02	-0.02	0.01	0.00
10	6	0.06	-0.01	0.00	-0.04	0.03	-0.02	-0.02	0.01	0.00
11	6	0.03	-0.01	0.00	0.05	-0.03	-0.02	-0.03	0.01	0.00
12	1	0.29	-0.16	-0.01	0.01	0.00	-0.02	-0.02	0.01	0.00
13	6	-0.11	0.08	0.01	-0.03	0.02	-0.02	-0.02	0.01	0.00
14	1	0.12	-0.04	0.00	-0.08	0.05	-0.02	-0.02	0.01	0.00
15	6	-0.13	0.08	0.00	0.03	-0.02	-0.02	-0.02	0.01	0.00
16	1	0.06	-0.03	0.00	0.08	-0.05	-0.02	-0.04	0.01	0.00
17	1	-0.18	0.13	0.02	-0.05	0.03	-0.02	-0.01	0.01	0.01
18	1	-0.19	0.12	-0.01	0.04	-0.02	-0.02	-0.02	0.01	0.00

	16	17	18
	A	A	A
Frequencies --	244.0345	246.3003	281.7166
Red. masses --	8.2620	11.7372	20.3282
Frc consts --	0.2899	0.4195	0.9505
IR Inten --	7.5575	6.9592	4.4717

Atom	AN	X	Y	Z	X	Y	Z	X	Y	Z
1	13	-0.09	0.03	-0.03	0.26	0.17	-0.06	0.12	0.06	0.55
2	13	0.15	0.05	0.02	-0.08	-0.06	0.00	0.01	-0.07	-0.07
3	13	0.13	0.03	-0.02	0.13	0.07	-0.01	0.01	-0.07	0.07
4	13	-0.04	0.07	0.04	-0.28	-0.15	-0.05	0.12	0.07	-0.55

5	3	0.01	-0.03	0.01	0.00	0.00	-0.06	-0.02	-0.06	-0.01
6	3	-0.10	0.13	-0.08	-0.01	0.02	0.79	-0.35	-0.11	0.00
7	3	-0.50	-0.80	0.04	-0.08	-0.13	-0.30	-0.43	0.02	0.00
8	11	0.05	-0.02	0.00	0.01	0.00	-0.03	-0.09	0.04	0.00
9	6	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.01	0.01	0.00	0.00
10	6	-0.01	0.01	0.00	0.03	-0.01	0.01	0.01	0.00	0.00
11	6	-0.01	0.01	0.00	-0.03	0.02	0.01	0.01	0.00	0.00
12	1	0.01	-0.01	0.00	0.00	0.00	0.01	0.02	-0.01	0.00
13	6	-0.03	0.02	0.00	0.02	-0.01	0.01	0.00	0.01	0.00
14	1	-0.02	0.01	0.00	0.05	-0.03	0.01	0.02	0.00	0.00
15	6	-0.03	0.02	0.00	-0.02	0.01	0.01	-0.01	0.01	0.00
16	1	0.00	0.00	0.00	-0.06	0.03	0.01	0.01	0.00	0.00
17	1	-0.05	0.03	0.00	0.03	-0.02	0.01	-0.02	0.01	0.00
18	1	-0.04	0.03	-0.01	-0.04	0.02	0.01	-0.02	0.02	0.00

	19	20	21
	A	A	A
Frequencies --	295.9783	311.0840	337.9656
Red. masses --	6.0743	6.8828	8.5995
Frc consts --	0.3135	0.3924	0.5787
IR Inten --	0.0892	31.4455	7.8249

Atom	AN	X	Y	Z	X	Y	Z	X	Y	Z
1	13	0.01	0.02	0.00	-0.01	0.00	0.01	-0.03	0.07	0.08
2	13	-0.03	-0.01	-0.01	0.02	-0.01	-0.02	-0.10	-0.01	-0.13
3	13	0.03	0.01	-0.01	0.02	-0.01	0.02	-0.10	-0.01	0.13
4	13	0.00	-0.02	0.00	-0.01	0.00	-0.01	-0.03	0.07	-0.08
5	3	0.00	0.01	0.77	0.06	0.91	-0.01	-0.03	-0.06	0.00
6	3	0.00	0.00	0.02	0.02	0.01	0.00	0.25	0.11	0.00
7	3	0.00	0.00	-0.06	0.01	-0.06	0.00	0.71	-0.58	-0.01
8	11	0.00	0.00	0.01	-0.09	-0.06	0.00	0.01	0.01	0.00
9	6	0.01	-0.01	-0.08	-0.07	0.00	0.00	0.01	0.00	0.00
10	6	-0.14	0.09	-0.07	-0.04	-0.04	0.00	0.01	0.00	0.00
11	6	0.15	-0.09	-0.07	-0.03	-0.04	0.00	0.01	0.00	0.00
12	1	0.02	-0.01	-0.09	-0.05	-0.01	0.00	0.01	0.00	0.00
13	6	-0.13	0.06	-0.08	0.09	-0.10	0.00	-0.01	0.01	0.00
14	1	-0.24	0.14	-0.07	-0.01	-0.06	0.01	0.01	0.00	0.00
15	6	0.11	-0.06	-0.08	0.10	-0.11	0.01	-0.01	0.01	0.00
16	1	0.26	-0.15	-0.07	0.00	-0.07	0.00	0.01	0.00	0.00
17	1	-0.18	0.10	-0.07	0.16	-0.14	-0.01	-0.01	0.01	0.00
18	1	0.14	-0.08	-0.07	0.16	-0.14	0.01	-0.01	0.01	0.00

	22	23	24
	A	A	A
Frequencies --	344.6758	368.3260	471.4918
Red. masses --	19.1747	8.4704	5.8528
Frc consts --	1.3422	0.6770	0.7666

IR Inten --	8.3417			3.3945			104.1803		
Atom AN	X	Y	Z	X	Y	Z	X	Y	Z
1 13	-0.07	-0.02	0.16	-0.10	-0.07	0.06	0.00	0.00	0.00
2 13	-0.02	0.01	0.52	0.04	0.02	-0.13	-0.02	0.00	-0.01
3 13	-0.03	0.02	-0.52	0.04	0.02	0.12	-0.02	0.00	0.01
4 13	-0.07	-0.02	-0.16	-0.10	-0.07	-0.06	0.00	0.00	0.00
5 3	0.01	0.03	0.01	0.00	-0.03	0.00	0.86	-0.08	0.00
6 3	0.52	0.16	0.00	0.84	0.24	0.00	0.00	0.01	0.00
7 3	0.26	-0.15	0.00	-0.35	0.20	0.00	0.00	0.00	0.00
8 11	-0.01	0.01	0.00	0.01	-0.01	0.00	0.00	-0.02	0.00
9 6	-0.01	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	-0.10	0.04	0.00
10 6	-0.01	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	-0.10	0.03	0.01
11 6	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	-0.09	0.02	0.00
12 1	-0.01	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	-0.26	0.13	0.00
13 6	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	-0.02	-0.02	0.00
14 1	-0.01	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	-0.23	0.09	0.01
15 6	0.01	-0.01	0.00	0.00	0.00	0.00	-0.01	-0.02	0.00
16 1	-0.01	0.00	0.00	0.00	0.01	0.00	-0.23	0.08	-0.01
17 1	0.01	-0.01	0.00	-0.01	0.01	0.00	-0.11	0.03	0.00
18 1	0.01	-0.01	0.00	-0.01	0.01	0.00	-0.10	0.03	0.00

	25			26			27		
	A			A			A		
Frequencies --	625.6660			635.1344			722.2805		
Red. masses --	5.0250			4.2396			1.2600		
Frc consts --	1.1590			1.0076			0.3873		
IR Inten --	0.4940			0.0062			11.7016		
Atom AN	X	Y	Z	X	Y	Z	X	Y	Z
1 13	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
2 13	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
3 13	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
4 13	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
5 3	0.01	0.00	0.03	-0.03	-0.02	0.00	0.01	0.00	0.01
6 3	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
7 3	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
8 11	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
9 6	0.00	0.00	-0.01	0.30	-0.19	0.00	0.01	-0.01	0.00
10 6	-0.19	0.10	0.01	-0.23	0.14	0.01	0.08	-0.05	0.00
11 6	0.18	-0.10	0.01	-0.23	0.14	-0.01	-0.08	0.05	0.00
12 1	0.00	0.00	-0.03	0.46	-0.28	0.00	-0.05	0.03	-0.01
13 6	0.33	-0.16	-0.01	0.09	-0.04	-0.01	0.02	0.00	-0.01
14 1	-0.39	0.21	0.01	-0.35	0.22	0.00	-0.45	0.24	0.00
15 6	-0.34	0.17	-0.01	0.09	-0.05	0.01	-0.05	0.02	-0.01
16 1	0.38	-0.20	0.01	-0.36	0.22	-0.01	0.45	-0.23	0.01
17 1	0.35	-0.19	-0.02	0.17	-0.09	-0.01	-0.28	0.15	0.00

18	1	-0.27	0.14	-0.02	0.16	-0.07	0.01	0.53	-0.27	0.04

	28	29	30
	A	A	A
Frequencies --	732.7221	750.2237	841.2410
Red. masses --	1.2665	1.1292	1.2227
Frc consts --	0.4006	0.3745	0.5098
IR Inten --	27.1613	458.0034	0.2939

Atom	AN	X	Y	Z	X	Y	Z	X	Y	Z
1	13	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
2	13	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
3	13	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
4	13	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
5	3	0.01	0.01	0.00	-0.04	0.02	0.00	0.00	0.00	0.00
6	3	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
7	3	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
8	11	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
9	6	0.07	-0.05	0.00	0.05	-0.03	0.00	0.00	0.00	-0.01
10	6	0.01	0.00	0.00	0.05	-0.02	0.00	0.04	-0.03	-0.02
11	6	0.04	-0.02	0.00	0.04	-0.02	0.00	-0.04	0.03	-0.03
12	1	-0.45	0.25	0.00	-0.46	0.27	0.00	-0.01	0.01	0.06
13	6	-0.08	0.05	0.00	0.03	-0.02	0.00	-0.07	-0.01	0.04
14	1	0.00	0.01	0.00	-0.44	0.25	0.00	-0.33	0.26	-0.06
15	6	-0.06	0.03	0.00	0.02	-0.01	0.00	0.07	0.02	0.03
16	1	-0.22	0.13	0.00	-0.38	0.21	-0.01	0.34	-0.28	-0.04
17	1	0.55	-0.30	-0.05	-0.33	0.18	0.03	0.47	-0.33	-0.02
18	1	0.43	-0.23	0.07	-0.31	0.16	-0.04	-0.43	0.30	-0.04

	31	32	33
	A	A	A
Frequencies --	858.3273	861.5038	863.7673
Red. masses --	1.2061	4.4029	3.5615
Frc consts --	0.5235	1.9253	1.5656
IR Inten --	0.1415	1.0725	0.0705

Atom	AN	X	Y	Z	X	Y	Z	X	Y	Z
1	13	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
2	13	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
3	13	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
4	13	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
5	3	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
6	3	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
7	3	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
8	11	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
9	6	-0.06	0.06	0.00	-0.19	-0.27	0.03	0.02	0.01	0.10
10	6	0.06	-0.03	0.00	0.04	0.03	0.28	0.09	0.12	0.12
11	6	0.05	-0.04	0.02	0.01	-0.02	-0.27	-0.10	-0.09	0.16

12	1	0.56	-0.30	-0.02	-0.08	-0.34	0.01	-0.13	0.05	-0.34
13	6	-0.02	0.02	-0.01	0.08	0.14	0.00	0.05	0.17	-0.20
14	1	-0.46	0.22	0.01	0.07	0.30	0.18	-0.16	-0.10	0.25
15	6	-0.02	-0.01	-0.02	0.07	0.12	-0.04	-0.06	-0.21	-0.16
16	1	-0.43	0.24	0.02	0.09	0.28	-0.20	0.35	0.01	0.23
17	1	0.19	-0.07	0.00	-0.09	-0.13	-0.36	0.36	0.10	-0.12
18	1	0.13	-0.08	-0.02	-0.12	-0.09	0.38	-0.43	-0.07	-0.12

	34	35	36
	A	A	A
Frequencies --	1023.2975	1027.7227	1073.0283
Red. masses --	1.4583	1.4372	1.2416
Frc consts --	0.8997	0.8944	0.8423
IR Inten --	24.0317	15.0184	1.5527

Atom	AN	X	Y	Z	X	Y	Z	X	Y	Z
1	13	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
2	13	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
3	13	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
4	13	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
5	3	0.01	0.01	0.00	0.00	0.00	0.01	0.00	0.00	0.00
6	3	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
7	3	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
8	11	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
9	6	-0.06	-0.10	0.00	0.00	-0.01	0.07	0.00	-0.01	0.07
10	6	0.02	0.04	-0.04	-0.02	-0.04	-0.09	0.01	0.03	0.02
11	6	0.02	0.04	0.05	0.02	0.04	-0.08	-0.04	-0.08	-0.03
12	1	-0.06	-0.10	-0.05	0.01	0.03	0.60	0.00	0.03	0.52
13	6	-0.02	-0.04	0.09	0.03	0.07	0.01	0.02	0.04	0.00
14	1	0.26	0.45	-0.23	-0.09	-0.11	-0.06	0.09	0.12	-0.03
15	6	-0.02	-0.04	-0.09	-0.04	-0.08	0.00	0.01	0.02	-0.06
16	1	0.24	0.43	0.16	0.16	0.23	-0.04	-0.31	-0.54	-0.16
17	1	0.09	0.12	0.32	0.23	0.31	0.35	0.05	0.14	0.12
18	1	0.11	0.14	-0.44	-0.21	-0.25	0.35	0.17	0.19	-0.41

	37	38	39
	A	A	A
Frequencies --	1073.8774	1143.1741	1287.0962
Red. masses --	1.2476	5.8266	1.2791
Frc consts --	0.8477	4.4863	1.2484
IR Inten --	2.1265	5.0141	0.0185

Atom	AN	X	Y	Z	X	Y	Z	X	Y	Z
1	13	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
2	13	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
3	13	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
4	13	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
5	3	0.00	0.00	0.00	-0.01	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00

6	3	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
7	3	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
8	11	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
9	6	-0.01	-0.02	-0.05	0.15	0.26	-0.02	0.00	-0.01	-0.07
10	6	-0.04	-0.07	0.04	0.05	0.10	0.27	0.03	0.05	-0.03
11	6	0.00	0.01	-0.04	0.03	0.06	-0.28	-0.03	-0.06	-0.02
12	1	-0.03	-0.03	-0.36	0.19	0.28	0.00	0.01	0.03	0.44
13	6	0.02	0.05	0.07	-0.11	-0.19	0.19	0.02	0.04	0.05
14	1	-0.28	-0.51	0.25	0.09	0.11	0.30	-0.20	-0.36	0.17
15	6	0.02	0.04	-0.03	-0.12	-0.22	-0.16	-0.02	-0.03	0.06
16	1	0.01	-0.01	-0.04	0.06	0.04	-0.32	0.21	0.38	0.10
17	1	0.22	0.31	0.44	-0.11	-0.27	0.17	-0.15	-0.25	-0.34
18	1	0.09	0.17	-0.27	-0.13	-0.28	-0.14	0.13	0.20	-0.37

	40	41	42
	A	A	A
Frequencies --	1377.4309	1384.7902	1467.4789
Red. masses --	4.7532	4.8839	2.5121
Frc consts --	5.3134	5.5181	3.1873
IR Inten --	0.0043	0.7675	3.0017

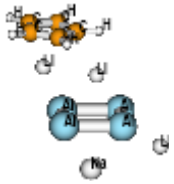
Atom	AN	X	Y	Z	X	Y	Z	X	Y	Z
1	13	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
2	13	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
3	13	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
4	13	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
5	3	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
6	3	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
7	3	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
8	11	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
9	6	0.01	0.02	0.33	0.08	0.12	-0.02	-0.07	-0.11	0.03
10	6	0.11	0.20	-0.18	-0.12	-0.19	-0.04	0.07	0.12	-0.12
11	6	-0.11	-0.22	-0.15	-0.12	-0.19	0.08	0.09	0.16	0.07
12	1	-0.01	-0.03	-0.44	0.06	0.14	0.01	-0.08	-0.15	-0.06
13	6	-0.07	-0.17	0.01	0.09	0.15	0.28	0.01	0.01	0.16
14	1	-0.20	-0.37	0.08	0.10	0.15	-0.21	-0.24	-0.44	0.13
15	6	0.07	0.17	-0.02	0.08	0.12	-0.30	-0.02	-0.05	-0.13
16	1	0.20	0.37	0.01	0.12	0.19	0.19	-0.27	-0.48	-0.10
17	1	-0.05	0.02	0.22	-0.18	-0.30	-0.32	-0.17	-0.30	-0.22
18	1	0.07	0.00	0.22	-0.17	-0.25	0.38	-0.13	-0.22	0.15

	43	44	45
	A	A	A
Frequencies --	1468.9546	3151.7361	3172.6848
Red. masses --	2.5721	1.0875	1.0923
Frc consts --	3.2700	6.3645	6.4780
IR Inten --	0.0774	5.1297	8.2226

Atom	AN	X	Y	Z	X	Y	Z	X	Y	Z
1	13	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
2	13	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
3	13	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
4	13	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
5	3	0.00	0.00	0.01	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
6	3	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
7	3	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
8	11	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
9	6	0.02	0.03	0.20	0.00	0.00	0.00	-0.01	-0.01	0.00
10	6	-0.06	-0.11	-0.09	0.00	0.00	0.00	0.00	0.01	0.03
11	6	0.03	0.05	-0.12	0.00	0.00	-0.01	0.00	0.00	-0.02
12	1	-0.01	-0.02	-0.57	0.00	0.01	0.00	0.09	0.17	-0.01
13	6	0.07	0.14	0.05	-0.01	-0.03	0.02	0.02	0.05	-0.05
14	1	0.09	0.14	-0.23	0.01	0.02	0.07	-0.06	-0.11	-0.30
15	6	-0.07	-0.12	0.11	0.03	0.06	0.04	0.01	0.03	0.02
16	1	-0.03	-0.04	-0.18	-0.02	-0.03	0.15	-0.02	-0.04	0.19
17	1	-0.09	-0.17	-0.38	0.15	0.32	-0.30	-0.26	-0.54	0.53
18	1	0.10	0.17	-0.44	-0.30	-0.67	-0.46	-0.14	-0.32	-0.23

	46	47	48
	A	A	A
Frequencies --	3185.1253	3202.8836	3213.5402
Red. masses --	1.0906	1.0946	1.1026
Frc consts --	6.5189	6.6161	6.7085
IR Inten --	17.6305	19.5661	9.7275

Atom	AN	X	Y	Z	X	Y	Z	X	Y	Z
1	13	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
2	13	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
3	13	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
4	13	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
5	3	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
6	3	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
7	3	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
8	11	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
9	6	-0.04	-0.06	0.01	0.00	0.00	0.00	-0.02	-0.04	0.00
10	6	0.01	0.01	0.02	0.01	0.02	0.06	-0.01	-0.02	-0.05
11	6	0.00	0.01	-0.02	-0.01	-0.01	0.06	-0.01	-0.01	0.06
12	1	0.41	0.72	-0.06	-0.01	-0.02	0.01	0.25	0.44	-0.04
13	6	-0.01	-0.02	0.02	-0.01	-0.01	0.01	0.01	0.01	-0.01
14	1	-0.05	-0.10	-0.26	-0.13	-0.23	-0.65	0.10	0.18	0.51
15	6	-0.01	-0.01	-0.01	0.00	0.01	0.00	0.01	0.01	0.01
16	1	-0.04	-0.07	0.30	0.08	0.14	-0.66	0.07	0.12	-0.60
17	1	0.09	0.19	-0.19	0.05	0.11	-0.10	-0.06	-0.12	0.11
18	1	0.07	0.15	0.10	-0.03	-0.07	-0.05	-0.05	-0.12	-0.08



Charge = -1 Multiplicity = 1

Al,0,-0.7874485439,-1.2544393081,1.2549758787
Al,0,-2.0720552669,1.1480147309,1.3003423457
Al,0,-2.0858706029,1.1514319156,-1.2944476714
Al,0,-0.7859650419,-1.2574011193,-1.2422229929
Li,0,-4.1839342727,2.1283923013,0.0140746682
Li,0,1.9190665683,-0.8954414793,0.0115031172
Li,0,0.3846892899,1.1257380953,-0.0424179649
Na,0,-3.637958637,-1.2556474975,-0.0094889496
C,0,3.2291186404,0.5859849499,1.1454744923
C,0,3.9666405755,-0.5371391289,0.7133180591
C,0,2.7634908095,1.2736011023,-0.0084326218
H,0,3.0493467141,0.8740178757,2.1733236187
C,0,3.9634809983,-0.5473037634,-0.7087573569
H,0,4.4507536072,-1.2629610709,1.355731425
C,0,3.2245776748,0.5695434255,-1.1540990744
H,0,2.2948009976,2.2568204017,-0.0134670042
H,0,4.444442471,-1.2824730582,-1.3427688468
H,0,3.0422971932,0.8436512135,-2.1853594805

State=1-A\HF=-1348.374265

		1			2			3		
		A			A			A		
Frequencies --		13.7568			45.2336			57.3376		
Red. masses --		4.0333			8.3362			11.1422		
Frc consts --		0.0004			0.0100			0.0216		
IR Inten --		0.0052			0.4638			2.0565		
Atom	AN	X	Y	Z	X	Y	Z	X	Y	Z
1	13	0.02	-0.05	-0.05	-0.10	-0.03	0.13	0.06	0.21	-0.01
2	13	0.04	-0.05	0.05	-0.14	-0.06	0.08	-0.17	0.11	-0.01
3	13	-0.04	0.05	0.05	0.13	0.07	0.08	-0.14	0.10	0.02
4	13	-0.02	0.04	-0.05	0.10	0.04	0.13	0.04	0.19	-0.02
5	3	0.00	0.00	0.14	-0.02	-0.01	-0.11	-0.43	-0.38	-0.03
6	3	0.00	0.00	-0.05	0.00	0.01	0.18	-0.02	0.05	-0.05
7	3	0.00	0.00	-0.06	0.00	0.01	0.30	-0.03	0.13	0.07
8	11	0.00	0.00	-0.01	0.00	-0.01	-0.27	0.17	-0.26	0.03
9	6	-0.12	0.15	-0.06	0.14	0.14	-0.13	0.08	-0.14	0.00
10	6	-0.08	0.09	0.16	0.08	0.08	-0.08	0.00	-0.19	0.00

11	6	0.00	0.00	-0.20	0.01	0.00	-0.16	0.15	-0.09	0.00
12	1	-0.23	0.28	-0.12	0.28	0.27	-0.14	0.08	-0.14	0.00
13	6	0.08	-0.09	0.17	-0.08	-0.09	-0.08	0.02	-0.18	0.00
14	1	-0.15	0.17	0.31	0.16	0.16	-0.05	-0.08	-0.24	0.01
15	6	0.13	-0.15	-0.06	-0.13	-0.15	-0.13	0.13	-0.11	0.00
16	1	0.00	0.00	-0.39	0.02	0.00	-0.23	0.23	-0.06	0.00
17	1	0.15	-0.17	0.31	-0.16	-0.18	-0.04	-0.02	-0.21	0.01
18	1	0.23	-0.28	-0.11	-0.26	-0.28	-0.14	0.16	-0.09	0.00

	4	5	6
	A	A	A
Frequencies --	69.2843	76.9300	90.2921
Red. masses --	8.6753	6.5368	9.4404
Frc consts --	0.0245	0.0228	0.0453
IR Inten --	0.1432	1.4178	0.4224

Atom	AN	X	Y	Z	X	Y	Z	X	Y	Z
1	13	0.04	0.02	-0.08	-0.01	0.05	0.16	0.05	0.00	0.01
2	13	-0.18	0.01	0.03	0.03	0.05	0.04	0.15	0.07	-0.01
3	13	0.19	-0.04	0.02	-0.03	-0.05	0.04	0.17	0.07	0.00
4	13	-0.05	-0.05	-0.08	0.01	-0.05	0.16	0.06	0.01	-0.01
5	3	0.04	0.05	-0.30	0.00	0.00	0.04	0.12	0.03	-0.01
6	3	0.02	-0.02	-0.29	0.00	-0.01	-0.39	-0.23	-0.06	-0.01
7	3	0.00	-0.02	0.68	0.00	0.00	-0.05	0.03	0.06	0.04
8	11	-0.02	0.03	0.19	0.00	0.00	-0.23	0.28	-0.15	0.01
9	6	-0.12	-0.03	-0.04	-0.20	-0.12	-0.04	-0.26	-0.01	0.00
10	6	-0.06	-0.01	-0.01	-0.12	-0.08	-0.04	-0.31	-0.04	0.00
11	6	-0.01	0.00	-0.07	0.00	0.00	-0.05	-0.21	0.02	-0.01
12	1	-0.22	-0.06	-0.05	-0.38	-0.24	-0.04	-0.25	0.00	-0.01
13	6	0.09	0.05	-0.01	0.13	0.08	-0.04	-0.30	-0.04	0.00
14	1	-0.13	-0.02	0.02	-0.24	-0.15	-0.03	-0.35	-0.06	0.00
15	6	0.12	0.05	-0.05	0.20	0.12	-0.05	-0.25	-0.01	-0.01
16	1	-0.02	0.00	-0.11	-0.01	0.00	-0.03	-0.16	0.04	-0.01
17	1	0.18	0.08	0.02	0.24	0.15	-0.04	-0.34	-0.06	0.00
18	1	0.20	0.08	-0.05	0.37	0.24	-0.05	-0.24	0.00	-0.01

	7	8	9
	A	A	A
Frequencies --	113.7039	117.2785	123.1929
Red. masses --	19.1085	8.7415	9.3462
Frc consts --	0.1456	0.0708	0.0836
IR Inten --	1.0731	6.8883	5.2346

Atom	AN	X	Y	Z	X	Y	Z	X	Y	Z
1	13	0.25	0.32	-0.15	0.10	0.11	-0.03	-0.21	-0.05	0.01
2	13	-0.06	0.09	0.23	-0.14	-0.09	0.04	0.02	0.16	-0.02
3	13	0.16	0.00	0.24	-0.12	-0.12	0.03	0.01	0.15	0.02
4	13	-0.28	-0.37	-0.15	0.00	0.00	-0.02	-0.19	-0.04	-0.02

5	3	-0.15	-0.24	-0.07	0.45	0.71	0.00	0.10	0.30	0.01
6	3	0.03	-0.08	0.15	-0.06	0.15	0.03	0.17	-0.15	0.00
7	3	0.05	-0.12	-0.30	-0.10	0.20	-0.05	-0.03	-0.24	0.02
8	11	-0.01	0.05	-0.26	0.06	-0.14	-0.05	0.14	-0.28	0.00
9	6	0.04	0.04	0.04	0.06	0.00	0.01	0.03	-0.01	0.00
10	6	0.06	0.06	0.04	-0.03	-0.06	0.01	0.22	0.11	0.00
11	6	-0.06	-0.02	0.05	0.09	0.03	0.01	-0.09	-0.10	0.00
12	1	0.09	0.07	0.04	0.09	0.02	0.01	-0.01	-0.04	0.00
13	6	-0.04	0.00	0.04	-0.05	-0.07	0.01	0.22	0.11	0.00
14	1	0.14	0.10	0.03	-0.09	-0.10	0.01	0.36	0.20	0.00
15	6	-0.11	-0.04	0.04	0.03	-0.02	0.01	0.03	-0.01	0.00
16	1	-0.09	-0.03	0.06	0.15	0.05	0.01	-0.25	-0.17	0.00
17	1	-0.04	0.00	0.03	-0.13	-0.12	0.01	0.35	0.20	0.00
18	1	-0.17	-0.08	0.05	0.03	-0.01	0.01	-0.02	-0.04	0.00

	10	11	12
	A	A	A
Frequencies --	133.9445	144.8575	156.6948
Red. masses --	10.5822	23.0084	6.1929
Frc consts --	0.1119	0.2845	0.0896
IR Inten --	0.0094	0.1293	2.9613

Atom	AN	X	Y	Z	X	Y	Z	X	Y	Z
1	13	0.06	0.02	-0.05	0.42	0.01	0.21	0.11	0.07	0.00
2	13	0.22	0.18	-0.05	-0.06	-0.33	-0.28	-0.09	-0.01	0.01
3	13	-0.21	-0.18	-0.05	0.04	0.34	-0.28	-0.10	-0.02	0.00
4	13	-0.05	-0.01	-0.05	-0.39	0.00	0.20	0.16	0.07	-0.01
5	3	-0.01	-0.03	0.30	0.01	0.02	0.33	0.01	0.08	0.00
6	3	0.00	-0.01	0.04	0.02	-0.03	-0.03	0.10	-0.20	0.00
7	3	-0.01	0.00	0.76	-0.01	-0.04	0.23	-0.07	-0.23	-0.02
8	11	-0.01	0.01	-0.18	0.02	0.01	-0.06	0.08	0.15	0.01
9	6	0.07	0.05	0.03	0.00	0.00	0.03	-0.13	-0.10	0.00
10	6	0.04	0.03	0.03	0.02	0.02	0.03	0.10	0.06	0.00
11	6	-0.01	0.00	0.02	-0.04	-0.03	0.03	-0.27	-0.20	0.00
12	1	0.15	0.10	0.03	0.00	0.00	0.03	-0.20	-0.14	0.00
13	6	-0.04	-0.03	0.03	0.01	0.00	0.03	0.10	0.05	0.00
14	1	0.09	0.06	0.03	0.05	0.03	0.03	0.26	0.16	0.00
15	6	-0.08	-0.06	0.03	-0.04	-0.03	0.03	-0.13	-0.10	0.00
16	1	-0.01	0.00	0.00	-0.07	-0.04	0.02	-0.46	-0.28	0.00
17	1	-0.08	-0.06	0.04	0.02	0.01	0.03	0.26	0.16	0.00
18	1	-0.16	-0.11	0.03	-0.06	-0.04	0.03	-0.20	-0.14	0.00

	13	14	15
	A	A	A
Frequencies --	181.1410	188.7875	230.1835
Red. masses --	18.1989	14.8135	14.0719
Frc consts --	0.3518	0.3111	0.4393

IR Inten --		11.9684			6.7369			9.1072		
Atom	AN	X	Y	Z	X	Y	Z	X	Y	Z
1	13	-0.13	-0.18	0.01	-0.23	0.33	-0.06	0.23	-0.21	0.05
2	13	-0.16	0.00	-0.01	-0.01	-0.15	-0.08	-0.08	0.21	-0.11
3	13	-0.16	0.06	-0.01	0.06	0.16	-0.08	-0.13	0.24	0.12
4	13	-0.05	-0.30	-0.03	0.27	-0.28	-0.05	0.23	-0.20	-0.04
5	3	-0.21	0.02	0.13	0.03	0.00	0.74	-0.25	0.33	-0.09
6	3	-0.05	0.20	0.00	0.00	-0.02	0.00	0.06	-0.13	0.00
7	3	-0.19	0.08	0.04	0.02	-0.01	0.18	0.08	-0.39	0.02
8	11	0.58	0.38	0.01	-0.10	-0.06	0.08	-0.20	-0.09	0.00
9	6	0.08	0.03	0.00	-0.04	-0.02	-0.02	0.02	0.06	0.00
10	6	-0.03	-0.04	0.00	-0.03	-0.01	-0.02	-0.12	-0.03	0.00
11	6	0.14	0.08	0.00	0.00	0.00	-0.02	0.12	0.13	0.00
12	1	0.10	0.05	0.00	-0.06	-0.03	-0.02	0.05	0.09	0.00
13	6	-0.02	-0.04	0.00	0.01	0.01	-0.02	-0.12	-0.03	0.00
14	1	-0.11	-0.10	0.00	-0.04	-0.02	-0.01	-0.21	-0.09	0.01
15	6	0.09	0.04	0.00	0.03	0.02	-0.02	0.02	0.06	0.00
16	1	0.20	0.11	0.00	0.00	0.00	-0.02	0.17	0.15	0.00
17	1	-0.10	-0.09	0.00	0.03	0.02	-0.02	-0.21	-0.09	0.00
18	1	0.12	0.06	0.00	0.04	0.03	-0.02	0.05	0.09	0.00

	16	17	18
	A	A	A
Frequencies --	237.0517	240.8551	277.7377
Red. masses --	7.4469	12.4542	18.2418
Frc consts --	0.2466	0.4257	0.8291
IR Inten --	7.0318	9.9423	3.8173

Atom	AN	X	Y	Z	X	Y	Z	X	Y	Z
1	13	0.05	-0.07	0.00	0.08	-0.18	0.00	0.05	-0.05	-0.11
2	13	0.10	0.02	0.03	-0.25	0.26	-0.06	-0.05	0.12	0.50
3	13	-0.02	0.12	0.00	0.26	-0.17	-0.05	-0.05	0.11	-0.50
4	13	0.06	-0.13	0.00	-0.01	0.06	-0.01	0.05	-0.04	0.11
5	3	-0.08	0.01	-0.19	-0.06	0.03	0.75	0.33	-0.21	0.01
6	3	-0.07	0.44	-0.01	-0.03	0.17	0.02	0.05	0.10	0.00
7	3	-0.33	0.52	0.04	-0.10	0.19	-0.20	-0.27	-0.36	-0.01
8	11	-0.09	-0.03	0.01	-0.04	-0.02	-0.03	-0.04	-0.05	0.00
9	6	-0.03	-0.09	0.01	-0.01	-0.03	0.00	0.02	0.02	0.00
10	6	0.11	0.01	0.00	0.04	0.00	0.00	-0.05	-0.03	0.00
11	6	-0.16	-0.17	0.00	-0.06	-0.06	0.00	0.07	0.05	0.00
12	1	-0.08	-0.13	0.01	-0.03	-0.05	0.00	0.03	0.03	0.00
13	6	0.11	0.00	0.00	0.04	0.00	0.00	-0.05	-0.03	0.00
14	1	0.18	0.05	-0.01	0.06	0.01	-0.01	-0.11	-0.07	0.00
15	6	-0.03	-0.10	0.00	-0.01	-0.03	0.00	0.02	0.02	0.00
16	1	-0.22	-0.20	0.00	-0.08	-0.07	0.00	0.04	0.04	0.00
17	1	0.18	0.04	0.01	0.06	0.01	0.00	-0.11	-0.07	0.00

18	1	-0.09	-0.14	0.00	-0.03	-0.05	0.00	0.04	0.03	0.00

	19	20	21
	A	A	A
Frequencies --	295.1029	315.0407	334.7716
Red. masses --	5.7803	7.3858	23.3016
Frc consts --	0.2966	0.4319	1.5386
IR Inten --	0.0510	16.0018	9.1550

Atom	AN	X	Y	Z	X	Y	Z	X	Y	Z
1	13	0.02	0.00	-0.01	-0.01	0.05	0.04	0.00	0.03	0.60
2	13	0.01	0.00	0.00	0.05	-0.02	-0.09	0.05	-0.06	0.19
3	13	-0.01	0.00	0.00	0.06	-0.02	0.09	0.06	-0.06	-0.19
4	13	-0.02	0.01	-0.01	-0.01	0.06	-0.04	0.00	0.03	-0.60
5	3	0.00	0.00	-0.01	0.09	-0.06	0.00	-0.33	0.21	0.01
6	3	-0.01	0.02	0.74	0.02	0.60	-0.02	-0.02	-0.10	0.00
7	3	0.00	-0.01	0.08	-0.41	-0.61	0.00	-0.11	0.04	-0.01
8	11	0.00	0.00	-0.01	0.00	0.01	0.00	-0.02	0.00	0.00
9	6	-0.17	-0.10	-0.07	0.02	0.00	0.00	0.01	0.01	0.00
10	6	-0.09	-0.06	-0.08	-0.02	-0.04	0.00	0.01	0.00	0.00
11	6	0.00	0.00	-0.09	0.01	0.00	0.00	0.02	0.01	0.00
12	1	-0.28	-0.17	-0.07	0.01	-0.02	0.00	0.03	0.02	0.00
13	6	0.09	0.06	-0.08	-0.03	-0.04	0.00	0.01	0.00	0.00
14	1	-0.15	-0.11	-0.08	-0.10	-0.09	0.00	0.02	0.01	0.00
15	6	0.17	0.10	-0.08	0.02	-0.01	0.00	0.01	0.01	0.00
16	1	0.00	0.00	-0.08	-0.10	-0.06	0.00	0.02	0.01	0.00
17	1	0.15	0.11	-0.08	-0.10	-0.09	0.01	0.02	0.01	0.00
18	1	0.28	0.17	-0.08	0.00	-0.02	0.00	0.03	0.02	0.00

	22	23	24
	A	A	A
Frequencies --	353.9713	386.5691	478.5945
Red. masses --	8.6376	7.2049	5.9361
Frc consts --	0.6376	0.6344	0.8011
IR Inten --	13.4939	159.6892	76.8766

Atom	AN	X	Y	Z	X	Y	Z	X	Y	Z
1	13	0.01	-0.03	0.12	-0.02	-0.02	0.03	-0.02	0.00	0.01
2	13	-0.10	0.09	-0.09	-0.05	0.00	0.04	0.00	0.00	0.00
3	13	-0.10	0.08	0.09	-0.06	0.01	-0.04	0.00	0.00	0.00
4	13	0.01	-0.03	-0.12	-0.01	-0.02	-0.03	-0.02	0.00	-0.01
5	3	0.79	-0.52	-0.01	0.03	0.00	0.00	0.00	-0.01	0.00
6	3	-0.03	-0.09	0.00	-0.02	0.53	-0.01	0.85	0.06	0.01
7	3	-0.01	0.13	0.00	0.80	-0.10	0.01	-0.02	0.15	0.00
8	11	-0.02	0.01	0.00	0.00	-0.01	0.00	0.00	0.00	0.00
9	6	0.00	0.00	0.00	-0.05	-0.05	0.01	-0.08	-0.02	0.00
10	6	0.01	0.00	0.00	0.02	0.01	0.00	-0.09	-0.04	0.01
11	6	0.00	0.00	0.00	-0.10	-0.08	0.00	0.02	0.03	0.00

12	1	0.01	0.00	0.00	-0.08	-0.07	0.01	-0.19	-0.08	0.00
13	6	0.01	0.00	0.00	0.02	0.01	0.00	-0.09	-0.04	-0.01
14	1	0.02	0.01	0.00	-0.02	-0.02	-0.01	-0.22	-0.12	0.01
15	6	0.00	0.00	0.00	-0.05	-0.05	-0.01	-0.08	-0.01	0.00
16	1	0.02	0.01	0.00	-0.03	-0.04	0.00	-0.09	-0.02	0.00
17	1	0.02	0.01	0.00	-0.02	-0.02	0.01	-0.22	-0.12	-0.01
18	1	0.01	0.00	0.00	-0.08	-0.07	-0.01	-0.18	-0.07	0.00

	25	26	27
	A	A	A
Frequencies --	625.3001	635.3254	733.3951
Red. masses --	5.1131	4.2097	1.2719
Frc consts --	1.1779	1.0011	0.4031
IR Inten --	23.1202	0.0073	6.9186

Atom	AN	X	Y	Z	X	Y	Z	X	Y	Z
1	13	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
2	13	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
3	13	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
4	13	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
5	3	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
6	3	0.08	-0.03	0.00	0.00	0.00	-0.02	0.00	0.00	-0.01
7	3	0.02	0.01	0.00	0.00	0.00	0.01	0.00	0.00	0.00
8	11	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
9	6	0.24	0.15	-0.01	-0.17	-0.11	0.01	-0.08	-0.05	0.00
10	6	-0.10	-0.05	0.02	0.27	0.20	-0.01	-0.04	-0.03	0.01
11	6	-0.36	-0.21	0.00	0.01	0.00	-0.01	0.00	0.00	0.00
12	1	0.42	0.26	-0.01	-0.28	-0.19	0.01	0.47	0.32	-0.02
13	6	-0.11	-0.06	-0.01	-0.26	-0.19	0.00	0.05	0.04	0.00
14	1	-0.18	-0.10	0.02	0.41	0.29	0.00	0.32	0.21	0.01
15	6	0.25	0.15	0.01	0.16	0.10	0.01	0.08	0.05	-0.01
16	1	-0.16	-0.11	0.00	0.01	0.00	0.03	0.02	0.01	0.06
17	1	-0.20	-0.11	-0.02	-0.40	-0.29	0.00	-0.35	-0.23	0.01
18	1	0.42	0.26	0.01	0.27	0.18	0.01	-0.47	-0.33	-0.01

	28	29	30
	A	A	A
Frequencies --	740.3790	761.1992	851.2284
Red. masses --	1.2461	1.1386	1.4083
Frc consts --	0.4025	0.3887	0.6012
IR Inten --	5.3864	479.8038	0.8376

Atom	AN	X	Y	Z	X	Y	Z	X	Y	Z
1	13	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
2	13	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
3	13	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
4	13	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
5	3	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00

6	3	-0.01	-0.02	0.00	-0.04	-0.02	0.00	0.00	0.00	0.00
7	3	-0.02	-0.01	0.00	0.01	0.01	0.00	0.00	0.01	0.00
8	11	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
9	6	-0.01	-0.02	0.00	0.05	0.04	0.01	-0.06	-0.02	0.07
10	6	0.07	0.05	0.00	0.02	0.01	0.00	0.01	0.04	0.00
11	6	-0.06	-0.02	0.00	0.04	0.01	0.00	0.09	-0.07	0.00
12	1	-0.04	-0.05	0.00	-0.37	-0.22	0.01	0.37	0.39	0.03
13	6	0.07	0.05	-0.01	0.02	0.01	0.00	0.01	0.05	0.00
14	1	-0.49	-0.32	0.01	-0.25	-0.18	-0.01	-0.17	-0.17	-0.11
15	6	-0.02	-0.02	0.00	0.05	0.04	-0.01	-0.06	-0.02	-0.07
16	1	0.51	0.25	-0.01	-0.58	-0.28	0.01	-0.38	-0.30	0.01
17	1	-0.47	-0.31	-0.01	-0.26	-0.18	0.01	-0.18	-0.17	0.11
18	1	-0.01	-0.03	0.00	-0.37	-0.23	-0.01	0.37	0.39	-0.04

	31	32	33
	A	A	A
Frequencies --	860.5013	863.0788	865.1239
Red. masses --	4.3921	1.1941	2.5875
Frc consts --	1.9161	0.5241	1.1410
IR Inten --	0.0441	0.5108	3.2290

Atom	AN	X	Y	Z	X	Y	Z	X	Y	Z
1	13	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
2	13	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
3	13	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
4	13	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
5	3	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
6	3	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.01	0.00	0.00
7	3	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	-0.02	-0.01	0.00
8	11	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
9	6	0.08	-0.12	-0.17	0.04	0.03	0.00	0.04	0.03	0.19
10	6	0.15	-0.18	0.21	-0.06	-0.05	0.00	-0.08	0.07	0.03
11	6	0.00	0.01	-0.11	0.00	0.00	0.00	0.07	-0.20	0.00
12	1	-0.16	0.17	-0.29	-0.34	-0.21	0.00	-0.39	-0.06	0.14
13	6	-0.14	0.18	0.21	0.06	0.05	0.00	-0.08	0.07	-0.02
14	1	0.12	-0.29	0.11	0.49	0.32	-0.01	0.20	0.02	-0.23
15	6	-0.08	0.12	-0.15	-0.04	-0.03	-0.01	0.04	0.03	-0.19
16	1	0.00	0.01	0.43	0.01	0.00	0.01	0.55	0.03	0.00
17	1	-0.13	0.30	0.09	-0.48	-0.31	0.00	0.21	0.05	0.23
18	1	0.17	-0.18	-0.28	0.33	0.21	-0.01	-0.40	-0.07	-0.14

	34	35	36
	A	A	A
Frequencies --	1020.6724	1021.8343	1070.1753
Red. masses --	1.4066	1.4711	1.2462
Frc consts --	0.8634	0.9050	0.8409
IR Inten --	7.2837	34.5271	4.3052

Atom	AN	X	Y	Z	X	Y	Z	X	Y	Z
1	13	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
2	13	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
3	13	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
4	13	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
5	3	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
6	3	0.00	0.00	-0.01	-0.01	0.01	0.00	0.00	0.00	0.00
7	3	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
8	11	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
9	6	-0.02	0.02	0.09	-0.02	0.04	-0.05	-0.04	0.07	0.01
10	6	0.05	-0.07	0.01	0.02	-0.03	0.09	0.01	-0.01	-0.04
11	6	0.00	0.00	-0.08	0.06	-0.10	0.00	0.00	0.00	0.06
12	1	-0.03	0.09	0.07	-0.31	0.41	-0.21	-0.30	0.44	-0.13
13	6	-0.04	0.07	0.01	0.03	-0.04	-0.09	-0.01	0.00	-0.03
14	1	0.18	-0.24	-0.28	-0.08	0.14	0.38	0.09	-0.18	-0.29
15	6	0.02	-0.01	0.09	-0.02	0.04	0.05	0.04	-0.07	0.02
16	1	0.00	-0.01	-0.77	0.11	-0.08	0.01	0.01	0.01	0.47
17	1	-0.19	0.24	-0.29	-0.08	0.13	-0.37	-0.07	0.14	-0.24
18	1	0.03	-0.08	0.07	-0.31	0.41	0.20	0.27	-0.41	-0.11

	37	38	39
	A	A	A
Frequencies --	1073.9900	1141.8717	1284.0362
Red. masses --	1.2591	5.5168	1.2842
Frc consts --	0.8557	4.2381	1.2475
IR Inten --	0.7059	6.1877	0.0010

Atom	AN	X	Y	Z	X	Y	Z	X	Y	Z
1	13	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
2	13	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
3	13	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
4	13	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
5	3	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
6	3	0.00	0.00	0.00	-0.01	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
7	3	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
8	11	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
9	6	-0.01	0.03	-0.05	-0.05	0.07	0.26	0.03	-0.05	0.02
10	6	0.02	-0.04	-0.06	0.13	-0.20	0.18	0.02	-0.03	-0.06
11	6	-0.02	0.00	0.00	-0.17	0.25	0.00	0.00	0.00	0.08
12	1	-0.21	0.26	-0.16	-0.08	0.21	0.25	-0.24	0.36	-0.15
13	6	0.03	-0.04	0.07	0.13	-0.20	-0.17	-0.02	0.03	-0.06
14	1	0.18	-0.27	-0.45	0.21	-0.27	0.09	-0.14	0.22	0.35
15	6	-0.02	0.04	0.05	-0.05	0.06	-0.26	-0.03	0.05	0.01
16	1	0.05	0.03	-0.03	-0.18	0.28	0.00	0.00	0.00	-0.42
17	1	0.20	-0.28	0.48	0.21	-0.27	-0.08	0.14	-0.21	0.35
18	1	-0.24	0.31	0.16	-0.08	0.21	-0.25	0.24	-0.36	-0.14

		40			41			42		
		A			A			A		
Frequencies --		1379.3150			1383.7280			1464.5725		
Red. masses --		4.6758			4.9626			2.4596		
Frc consts --		5.2413			5.5984			3.1084		
IR Inten --		0.7742			0.0120			7.4694		
Atom	AN	X	Y	Z	X	Y	Z	X	Y	Z
1	13	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
2	13	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
3	13	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
4	13	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
5	3	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
6	3	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
7	3	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
8	11	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
9	6	0.12	-0.21	-0.06	-0.13	0.17	-0.19	-0.09	0.13	-0.09
10	6	-0.09	0.15	0.27	0.09	-0.11	0.03	0.01	-0.02	0.15
11	6	-0.04	0.12	-0.02	0.00	0.01	0.37	0.07	-0.11	0.00
12	1	-0.12	0.21	-0.22	0.21	-0.32	0.00	0.29	-0.44	0.12
13	6	-0.08	0.13	-0.28	-0.10	0.13	0.00	0.01	-0.02	-0.15
14	1	0.16	-0.25	-0.36	0.05	-0.10	0.08	0.16	-0.25	-0.19
15	6	0.10	-0.18	0.08	0.14	-0.20	-0.18	-0.09	0.14	0.09
16	1	-0.19	0.05	0.03	-0.01	0.00	-0.54	0.10	-0.12	0.00
17	1	0.17	-0.25	0.35	-0.03	0.07	0.13	0.16	-0.25	0.19
18	1	-0.09	0.17	0.22	-0.22	0.34	0.02	0.29	-0.45	-0.12

		43			44			45		
		A			A			A		
Frequencies --		1469.1950			3123.9808			3181.2497		
Red. masses --		2.6753			1.0904			1.0868		
Frc consts --		3.4024			6.2696			6.4802		
IR Inten --		0.0347			4.6570			3.6617		
Atom	AN	X	Y	Z	X	Y	Z	X	Y	Z
1	13	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
2	13	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
3	13	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
4	13	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
5	3	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
6	3	0.00	0.00	0.01	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
7	3	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
8	11	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
9	6	0.06	-0.10	-0.09	0.00	0.00	-0.01	0.00	0.00	0.02
10	6	-0.10	0.15	0.08	0.00	0.00	0.00	-0.03	0.04	-0.03
11	6	0.00	0.00	0.17	-0.04	0.08	0.00	0.00	0.00	0.00
12	1	-0.08	0.12	-0.21	-0.02	0.03	0.10	0.04	-0.06	-0.22

13	6	0.10	-0.15	0.09	0.00	0.00	0.00	0.03	-0.04	-0.03
14	1	0.11	-0.16	-0.45	0.00	0.00	0.00	0.30	-0.45	0.40
15	6	-0.06	0.10	-0.10	0.00	0.00	0.01	0.00	0.00	0.02
16	1	0.00	0.00	-0.49	0.42	-0.89	0.00	0.00	0.00	0.00
17	1	-0.11	0.15	-0.45	0.00	0.00	0.00	-0.29	0.45	0.38
18	1	0.07	-0.12	-0.21	-0.02	0.03	-0.10	-0.04	0.06	-0.23

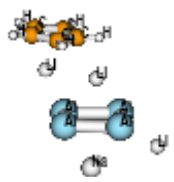
	46	47	48
	A	A	A
Frequencies --	3194.9150	3207.6673	3215.2189
Red. masses --	1.0923	1.0956	1.1028
Frc consts --	6.5691	6.6419	6.7168
IR Inten --	24.8867	14.5935	8.3869

Atom	AN	X	Y	Z	X	Y	Z	X	Y	Z
1	13	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
2	13	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
3	13	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
4	13	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
5	3	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
6	3	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
7	3	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
8	11	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
9	6	0.00	-0.01	-0.03	0.01	-0.02	-0.06	0.01	-0.01	-0.05
10	6	0.02	-0.03	0.03	-0.01	0.01	-0.01	-0.02	0.03	-0.02
11	6	0.00	-0.01	0.00	0.00	0.00	0.00	0.01	-0.01	0.00
12	1	-0.06	0.10	0.38	-0.11	0.18	0.62	-0.10	0.15	0.55
13	6	0.02	-0.03	-0.03	0.01	-0.02	-0.01	-0.02	0.03	0.02
14	1	-0.25	0.37	-0.34	0.10	-0.14	0.12	0.19	-0.28	0.25
15	6	0.00	-0.01	0.04	-0.01	0.02	-0.06	0.01	-0.01	0.05
16	1	-0.04	0.08	0.00	0.00	0.00	-0.01	-0.05	0.10	0.00
17	1	-0.25	0.38	0.33	-0.12	0.18	0.15	0.19	-0.28	-0.25
18	1	-0.07	0.11	-0.41	0.11	-0.17	0.64	-0.09	0.14	-0.51

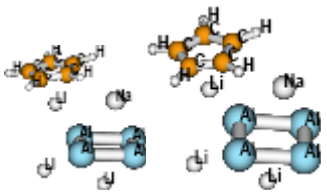
$CpNaAl_4Li_3^- \rightarrow CpLi + Al_4Li_2Na^-$ **-24.83111567**

$CpNaAl_4Li_3^- \rightarrow Cp^- + Al_4Li_3Na$ **-60.91203341**

CpNaAl4Li3-C1-f-f-405-slop-B36311+gx.frq+16.4 △E=4.90kcal same



State=1-A\HF=-1348.3742578



Charge = -1 Multiplicity = 1

Al,0,-1.3811913192,-0.7385897523,1.350630869
Al,0,0.0633812946,-3.0215935322,1.0903228431
Al,0,-0.1157136938,-2.8892426758,-1.4100199423
Al,0,-1.5726228459,-0.6014889767,-1.2220266563
Li,0,-3.64548848,0.0689534425,0.2640320795
Li,0,-2.5352035442,-2.8855919096,0.0216338517
Li,0,-0.2721634816,1.7443511292,0.0946765623
Na,0,1.6264043937,-0.6825603335,-0.1534943228
C,0,1.9181266057,2.2193618521,-0.4288674045
C,0,1.0475409192,3.1079981943,-1.1103536565
C,0,1.7340634489,2.4065687498,0.967044241
H,0,2.6727754832,1.5983708877,-0.9047105802
C,0,0.3308194137,3.8438264703,-0.1384327215
H,0,0.9548647055,3.206201618,-2.1844701969
C,0,0.7504671275,3.4072410727,1.1445659282
H,0,2.2658608668,1.8964743305,1.7619533304
H,0,-0.4125759911,4.605799468,-0.3405854647
H,0,0.3809933682,3.7700955232,2.0956921872

State=1-A\HF=-1348.3762064

		1			2			3		
		A			A			A		
Frequencies --		-18.5597			38.8624			56.8249		
Red. masses --		4.0290			13.6633			8.5141		
Frc consts --		0.0008			0.0122			0.0162		
IR Inten --		0.0730			1.4912			0.2321		
Atom	AN	X	Y	Z	X	Y	Z	X	Y	Z
1	13	0.01	0.06	-0.03	0.11	0.05	-0.07	0.01	0.08	-0.02
2	13	0.03	0.04	0.05	0.20	-0.02	0.12	0.19	-0.08	-0.01
3	13	0.02	-0.05	0.05	-0.26	0.03	0.12	0.16	-0.01	-0.01
4	13	-0.01	-0.03	-0.03	-0.09	-0.09	-0.07	-0.08	0.20	-0.01
5	3	-0.03	0.02	-0.11	0.05	-0.02	-0.21	-0.35	0.16	0.09
6	3	-0.01	-0.02	-0.03	0.02	0.02	0.17	-0.10	-0.15	0.08
7	3	-0.01	0.02	-0.05	0.01	-0.02	-0.05	-0.05	0.06	-0.17
8	11	0.04	0.02	0.07	-0.04	-0.02	-0.51	0.17	0.07	0.00
9	6	0.00	0.05	-0.21	0.08	0.00	0.13	-0.14	-0.12	0.07

10	6	0.09	0.15	-0.01	0.15	-0.03	0.15	-0.03	-0.23	0.02
11	6	-0.13	-0.14	-0.14	-0.07	0.05	0.14	-0.23	0.00	0.05
12	1	-0.01	0.13	-0.38	0.16	-0.04	0.14	-0.13	-0.15	0.13
13	6	0.02	0.02	0.18	0.04	0.02	0.17	-0.03	-0.18	-0.04
14	1	0.19	0.30	0.00	0.27	-0.07	0.15	0.07	-0.34	0.02
15	6	-0.11	-0.16	0.09	-0.09	0.06	0.16	-0.16	-0.04	-0.02
16	1	-0.20	-0.26	-0.25	-0.17	0.09	0.13	-0.32	0.10	0.09
17	1	0.07	0.05	0.35	0.06	0.01	0.19	0.05	-0.24	-0.09
18	1	-0.19	-0.29	0.19	-0.20	0.10	0.17	-0.20	0.04	-0.05

	4	5	6
	A	A	A
Frequencies --	68.1930	84.1034	85.4338
Red. masses --	7.1884	11.6468	7.8865
Frc consts --	0.0197	0.0485	0.0339
IR Inten --	0.5403	3.2410	0.8050

Atom	AN	X	Y	Z	X	Y	Z	X	Y	Z
1	13	0.13	-0.20	-0.08	0.14	0.03	-0.07	-0.10	0.05	0.19
2	13	-0.08	-0.02	0.00	0.15	0.06	0.00	0.01	0.03	0.01
3	13	-0.04	0.05	0.00	0.14	0.06	-0.01	0.05	0.00	0.01
4	13	-0.09	0.08	-0.08	0.04	0.07	-0.07	0.17	-0.07	0.19
5	3	0.20	-0.08	0.18	0.11	0.03	0.00	0.15	-0.03	-0.01
6	3	0.06	0.07	0.17	0.11	0.06	0.13	0.06	0.04	-0.38
7	3	0.01	-0.01	-0.34	-0.19	-0.07	0.13	-0.06	0.00	-0.31
8	11	-0.05	-0.02	0.17	-0.10	-0.49	0.03	-0.01	-0.10	-0.10
9	6	0.11	0.01	0.00	-0.11	0.05	0.02	0.02	-0.01	-0.06
10	6	0.23	-0.05	0.01	-0.25	0.13	0.02	0.12	-0.06	-0.06
11	6	-0.13	0.13	0.00	-0.05	0.01	0.02	-0.20	0.11	-0.06
12	1	0.14	-0.01	0.01	-0.06	0.04	0.01	0.07	-0.04	-0.04
13	6	0.07	0.03	0.02	-0.27	0.13	0.02	-0.03	0.02	-0.06
14	1	0.42	-0.14	0.01	-0.33	0.17	0.02	0.28	-0.15	-0.05
15	6	-0.16	0.14	0.01	-0.14	0.07	0.02	-0.22	0.12	-0.06
16	1	-0.27	0.19	0.00	0.05	-0.04	0.02	-0.31	0.17	-0.06
17	1	0.11	0.01	0.03	-0.37	0.19	0.02	0.00	0.00	-0.06
18	1	-0.32	0.22	0.01	-0.13	0.06	0.02	-0.37	0.20	-0.07

	7	8	9
	A	A	A
Frequencies --	94.9106	109.1458	123.9001
Red. masses --	8.4734	15.3997	11.7616
Frc consts --	0.0450	0.1081	0.1064
IR Inten --	6.0058	0.1093	2.2811

Atom	AN	X	Y	Z	X	Y	Z	X	Y	Z
1	13	0.02	-0.05	-0.01	0.04	-0.20	-0.09	0.28	-0.20	0.00
2	13	0.05	-0.06	-0.02	-0.20	0.21	0.20	-0.05	0.06	0.00
3	13	0.02	-0.03	-0.01	0.22	-0.22	0.20	-0.05	0.05	0.00

4	13	0.01	-0.07	-0.03	-0.05	0.21	-0.09	0.27	-0.19	-0.01
5	3	0.68	-0.19	-0.03	0.06	-0.01	0.40	-0.67	0.05	0.01
6	3	0.12	0.06	0.08	0.00	0.00	-0.59	0.18	0.04	-0.01
7	3	-0.12	0.07	0.09	-0.02	0.00	0.09	-0.01	0.11	0.02
8	11	0.17	0.24	0.00	0.02	0.04	-0.28	-0.01	0.15	-0.01
9	6	-0.20	0.02	0.03	-0.02	0.00	0.02	-0.19	0.07	0.01
10	6	-0.24	0.02	0.01	-0.07	0.02	0.02	-0.15	0.04	0.00
11	6	-0.13	0.00	0.02	0.03	-0.03	0.02	-0.16	0.06	0.01
12	1	-0.18	0.01	0.03	-0.01	-0.01	0.02	-0.24	0.09	0.01
13	6	-0.19	0.01	-0.01	-0.04	0.01	0.02	-0.07	0.01	0.00
14	1	-0.29	0.03	0.01	-0.11	0.04	0.02	-0.17	0.04	0.00
15	6	-0.12	0.00	0.00	0.02	-0.03	0.02	-0.08	0.02	0.00
16	1	-0.09	-0.01	0.03	0.07	-0.05	0.02	-0.19	0.08	0.01
17	1	-0.20	0.01	-0.02	-0.06	0.02	0.01	-0.03	-0.02	-0.01
18	1	-0.08	-0.01	-0.01	0.05	-0.04	0.02	-0.04	0.01	0.00

	10	11	12
	A	A	A
Frequencies --	137.6466	138.0746	152.1114
Red. masses --	5.9994	7.0808	17.7391
Frc consts --	0.0670	0.0795	0.2418
IR Inten --	0.5269	0.5664	1.8071

Atom	AN	X	Y	Z	X	Y	Z	X	Y	Z
1	13	0.09	0.05	0.06	-0.09	-0.06	-0.08	0.27	-0.06	0.17
2	13	-0.12	0.12	-0.06	0.11	-0.08	0.06	0.27	0.21	-0.19
3	13	0.09	-0.05	-0.05	-0.15	0.15	0.07	-0.28	-0.22	-0.19
4	13	-0.07	-0.05	0.07	0.11	0.06	-0.07	-0.27	0.07	0.17
5	3	-0.09	0.04	-0.09	-0.09	0.04	0.10	0.01	0.00	0.07
6	3	-0.01	0.01	0.28	-0.01	0.01	-0.35	-0.01	-0.01	-0.63
7	3	-0.11	-0.21	-0.04	-0.10	-0.20	0.01	0.00	0.00	0.03
8	11	0.08	0.07	-0.06	0.08	0.06	0.10	0.00	0.00	0.14
9	6	0.22	-0.15	-0.01	0.19	-0.14	0.00	-0.02	0.01	0.03
10	6	0.02	-0.04	0.00	-0.02	-0.02	0.00	-0.05	0.03	0.03
11	6	0.11	-0.10	-0.01	0.14	-0.12	0.00	0.04	-0.02	0.03
12	1	0.41	-0.24	0.00	0.36	-0.21	0.00	-0.04	0.02	0.02
13	6	-0.20	0.07	0.00	-0.20	0.08	0.01	-0.01	0.01	0.03
14	1	0.04	-0.04	0.00	-0.05	0.01	0.00	-0.10	0.05	0.03
15	6	-0.15	0.04	0.00	-0.11	0.02	0.00	0.05	-0.02	0.03
16	1	0.22	-0.17	-0.01	0.28	-0.19	-0.01	0.08	-0.04	0.03
17	1	-0.40	0.18	0.00	-0.40	0.19	0.01	-0.02	0.01	0.03
18	1	-0.29	0.10	0.00	-0.21	0.06	0.01	0.09	-0.05	0.03

	13	14	15
	A	A	A
Frequencies --	181.1710	206.3430	229.6010
Red. masses --	17.3035	12.6964	16.9182

Frc consts --		0.3346			0.3185			0.5255			
IR Inten --		23.3647			5.7195			6.8435			
Atom	AN	X	Y	Z	X	Y	Z	X	Y	Z	
1	13	-0.13	-0.10	0.02	-0.21	0.03	-0.08	-0.22	-0.21	0.10	
2	13	-0.13	0.16	-0.04	0.14	0.25	-0.06	0.31	0.17	-0.05	
3	13	-0.13	0.15	0.04	-0.16	-0.26	-0.06	0.29	0.16	0.04	
4	13	-0.13	-0.10	-0.02	0.22	-0.02	-0.07	-0.21	-0.22	-0.10	
5	3	-0.15	-0.08	0.00	0.00	0.01	0.68	-0.21	-0.42	0.03	
6	3	0.03	0.46	0.00	0.01	-0.01	0.47	0.01	0.50	0.00	
7	3	0.01	0.21	0.03	0.00	0.00	0.02	-0.02	-0.02	-0.01	
8	11	0.63	-0.30	-0.02	0.00	0.00	0.00	-0.22	0.13	0.00	
9	6	-0.08	0.04	0.01	0.02	-0.01	-0.02	0.05	-0.03	0.00	
10	6	-0.01	-0.01	0.00	0.04	-0.02	-0.02	0.03	-0.01	0.00	
11	6	-0.04	0.03	0.01	-0.03	0.02	-0.02	0.04	-0.02	0.00	
12	1	-0.06	0.03	0.00	0.03	-0.01	-0.02	0.05	-0.03	0.00	
13	6	0.08	-0.05	-0.01	0.01	0.00	-0.02	0.00	0.00	0.00	
14	1	-0.01	-0.02	0.00	0.07	-0.04	-0.02	0.04	-0.01	0.00	
15	6	0.06	-0.03	0.00	-0.04	0.02	-0.02	0.01	-0.01	0.00	
16	1	-0.06	0.05	0.02	-0.06	0.03	-0.02	0.06	-0.04	-0.01	
17	1	0.16	-0.10	-0.01	0.01	-0.01	-0.02	-0.01	0.01	0.00	
18	1	0.12	-0.05	-0.01	-0.06	0.03	-0.02	0.01	0.00	0.00	

			16			17			18		
			A			A			A		
Frequencies --			242.0206			248.7927			286.3858		
Red. masses --			8.7976			12.1680			19.2015		
Frc consts --			0.3036			0.4438			0.9279		
IR Inten --			1.3927			4.5046			4.3829		
Atom	AN	X	Y	Z	X	Y	Z	X	Y	Z	
1	13	0.02	-0.06	-0.03	0.14	0.30	-0.06	0.04	0.11	0.53	
2	13	0.02	0.18	0.01	-0.06	-0.13	-0.01	-0.07	0.00	-0.09	
3	13	0.03	0.19	-0.01	0.05	0.10	-0.01	-0.07	0.00	0.09	
4	13	0.01	-0.10	0.02	-0.14	-0.29	-0.06	0.04	0.11	-0.53	
5	3	0.14	-0.14	0.05	-0.01	0.01	0.81	-0.08	-0.41	0.00	
6	3	-0.57	-0.73	-0.01	0.04	0.05	-0.27	0.23	-0.37	0.00	
7	3	-0.01	0.00	0.00	0.00	0.00	0.01	0.00	0.11	-0.01	
8	11	0.05	-0.01	0.00	0.00	0.00	0.00	0.01	-0.03	0.00	
9	6	-0.02	0.02	0.00	0.00	0.00	0.00	0.02	-0.02	0.00	
10	6	0.00	0.01	0.00	0.01	-0.01	0.00	0.00	-0.01	0.00	
11	6	-0.02	0.02	0.00	-0.01	0.00	0.00	0.02	-0.01	0.00	
12	1	-0.03	0.02	0.00	0.01	0.00	0.00	0.04	-0.03	0.00	
13	6	0.02	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	-0.01	0.00	0.00	
14	1	0.00	0.01	0.00	0.02	-0.01	0.00	0.00	-0.01	0.00	
15	6	0.01	0.00	0.00	-0.01	0.00	0.00	-0.01	0.00	0.00	
16	1	-0.03	0.02	0.00	-0.02	0.01	0.00	0.03	-0.02	0.00	

17	1	0.04	-0.02	0.00	0.01	0.00	0.00	-0.02	0.01	0.00
18	1	0.02	0.00	0.00	-0.02	0.01	0.00	-0.01	0.00	0.00

	19	20	21
	A	A	A
Frequencies --	307.2687	313.6970	331.9144
Red. masses --	5.9840	6.5522	23.9671
Frc consts --	0.3329	0.3799	1.5557
IR Inten --	0.4188	12.0712	2.7816

Atom	AN	X	Y	Z	X	Y	Z	X	Y	Z
1	13	0.02	-0.01	-0.01	0.01	-0.01	-0.03	-0.07	-0.03	0.09
2	13	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.02	0.01	0.04	0.64
3	13	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	-0.02	0.00	0.04	-0.64
4	13	-0.02	0.01	0.00	0.01	-0.01	0.03	-0.07	-0.03	-0.09
5	3	0.00	0.00	-0.04	0.02	-0.03	0.00	-0.02	0.00	0.00
6	3	0.00	0.00	-0.03	-0.02	-0.01	0.00	0.37	-0.11	0.00
7	3	0.01	0.08	0.77	0.12	0.85	-0.08	-0.01	-0.06	0.00
8	11	-0.01	0.00	0.01	-0.06	-0.03	0.00	0.04	0.01	0.00
9	6	0.09	-0.05	-0.08	0.13	-0.13	0.01	-0.01	0.00	0.00
10	6	0.17	-0.10	-0.07	-0.03	-0.05	0.01	0.00	0.00	0.00
11	6	-0.14	0.06	-0.08	0.09	-0.12	0.00	0.00	0.00	0.00
12	1	0.11	-0.06	-0.07	0.20	-0.16	0.02	-0.01	0.01	0.00
13	6	0.03	-0.02	-0.08	-0.12	0.01	0.00	0.01	0.00	0.00
14	1	0.28	-0.15	-0.07	-0.02	-0.07	0.01	0.00	0.00	0.00
15	6	-0.14	0.07	-0.07	-0.07	-0.03	0.01	0.01	0.00	0.00
16	1	-0.22	0.10	-0.08	0.18	-0.17	0.00	0.00	0.00	0.00
17	1	0.05	-0.04	-0.09	-0.15	0.02	0.00	0.00	0.00	0.00
18	1	-0.23	0.13	-0.08	-0.06	-0.05	0.02	0.01	0.00	0.00

	22	23	24
	A	A	A
Frequencies --	341.2117	369.4119	470.4017
Red. masses --	8.3634	8.2268	5.8009
Frc consts --	0.5737	0.6615	0.7563
IR Inten --	13.2460	5.1958	92.1038

Atom	AN	X	Y	Z	X	Y	Z	X	Y	Z
1	13	-0.07	0.04	-0.14	-0.08	-0.12	0.07	-0.02	0.00	0.01
2	13	-0.01	0.06	-0.06	0.02	0.04	-0.06	0.00	0.00	0.00
3	13	-0.01	0.06	0.06	0.02	0.04	0.06	0.00	0.00	0.00
4	13	-0.07	0.04	0.14	-0.08	-0.12	-0.07	-0.03	0.00	-0.01
5	3	-0.12	-0.40	0.00	0.15	0.85	0.00	0.01	0.02	0.00
6	3	0.76	-0.43	0.00	0.35	-0.27	0.00	0.00	-0.01	0.00
7	3	-0.01	0.00	0.00	-0.04	0.05	0.00	0.85	-0.14	0.01
8	11	0.00	0.01	0.00	-0.01	0.00	0.00	0.01	-0.01	0.00
9	6	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	-0.01	-0.02	0.00
10	6	0.00	0.00	0.00	0.01	0.00	0.00	-0.08	0.02	0.00

11	6	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	-0.04	0.00	0.00
12	1	-0.01	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	-0.13	0.04	-0.01
13	6	0.00	0.00	0.00	0.01	0.00	0.00	-0.10	0.04	0.00
14	1	0.00	0.00	0.00	0.01	-0.01	0.00	-0.21	0.07	0.00
15	6	0.00	0.00	0.00	0.01	0.00	0.00	-0.09	0.03	0.00
16	1	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	-0.15	0.05	0.00
17	1	0.00	0.00	0.00	0.02	-0.01	0.00	-0.25	0.12	-0.01
18	1	0.00	0.00	0.00	0.02	-0.01	0.00	-0.23	0.09	0.00

	25	26	27
	A	A	A
Frequencies --	626.7643	633.9431	723.5347
Red. masses --	4.9210	4.1988	1.2654
Frc consts --	1.1390	0.9942	0.3903
IR Inten --	4.4616	0.0176	9.4109

Atom	AN	X	Y	Z	X	Y	Z	X	Y	Z
1	13	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
2	13	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
3	13	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
4	13	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
5	3	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
6	3	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
7	3	-0.03	-0.01	-0.02	0.02	0.01	-0.01	-0.01	0.00	-0.01
8	11	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
9	6	0.36	-0.16	0.01	-0.07	0.04	-0.01	0.04	-0.01	0.01
10	6	-0.20	0.10	-0.01	0.22	-0.13	0.02	0.09	-0.05	0.00
11	6	-0.31	0.15	0.01	-0.11	0.06	0.01	-0.04	0.02	0.00
12	1	0.23	-0.12	0.02	-0.11	0.04	0.01	-0.42	0.18	-0.01
13	6	0.02	-0.01	0.01	-0.30	0.18	-0.01	0.00	0.00	0.00
14	1	-0.40	0.20	-0.02	0.36	-0.21	0.02	-0.50	0.26	-0.01
15	6	0.16	-0.08	-0.01	0.25	-0.15	-0.01	-0.08	0.05	0.00
16	1	-0.43	0.21	0.01	-0.20	0.11	0.01	0.37	-0.21	-0.01
17	1	0.06	-0.02	0.03	-0.46	0.26	-0.01	-0.06	0.03	0.01
18	1	0.33	-0.16	-0.01	0.38	-0.23	0.00	0.46	-0.23	0.01

	28	29	30
	A	A	A
Frequencies --	731.9065	749.4186	841.6649
Red. masses --	1.2675	1.1289	1.2356
Frc consts --	0.4000	0.3736	0.5157
IR Inten --	14.5453	433.2451	0.5927

Atom	AN	X	Y	Z	X	Y	Z	X	Y	Z
1	13	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
2	13	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
3	13	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
4	13	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00

5	3	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
6	3	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
7	3	-0.01	-0.01	0.00	-0.05	0.02	0.00	0.00	0.00	0.00
8	11	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
9	6	0.07	-0.03	0.01	0.02	-0.01	0.00	-0.07	-0.03	-0.03
10	6	-0.02	0.01	0.00	0.04	-0.02	0.00	0.05	-0.03	0.03
11	6	0.08	-0.05	0.01	0.04	-0.03	0.01	0.07	0.00	-0.04
12	1	-0.55	0.26	-0.08	-0.36	0.16	-0.04	0.45	-0.28	0.05
13	6	-0.08	0.05	0.00	0.05	-0.02	0.00	-0.01	0.02	0.01
14	1	0.17	-0.11	0.01	-0.37	0.19	-0.01	-0.39	0.31	0.03
15	6	-0.03	0.02	-0.01	0.04	-0.02	0.00	-0.03	0.03	0.02
16	1	-0.41	0.22	0.02	-0.38	0.20	0.02	-0.45	0.33	0.00
17	1	0.50	-0.27	0.00	-0.41	0.23	-0.01	0.12	-0.08	-0.06
18	1	0.14	-0.07	0.00	-0.44	0.24	-0.01	0.26	-0.20	0.07

	31	32	33
	A	A	A
Frequencies --	857.2454	861.3547	864.2771
Red. masses --	1.1973	4.4098	3.5602
Frc consts --	0.5184	1.9277	1.5669
IR Inten --	0.4348	0.3550	1.3515

Atom	AN	X	Y	Z	X	Y	Z	X	Y	Z
1	13	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
2	13	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
3	13	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
4	13	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
5	3	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
6	3	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
7	3	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
8	11	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
9	6	0.01	0.00	0.01	-0.06	-0.12	0.07	0.07	0.23	0.12
10	6	-0.05	0.03	0.00	0.02	0.06	0.27	0.08	0.06	-0.17
11	6	0.03	-0.02	0.00	-0.08	-0.13	0.02	-0.03	-0.14	0.23
12	1	-0.06	0.03	0.00	0.05	0.04	-0.41	0.47	0.09	0.06
13	6	0.07	-0.04	0.00	0.17	0.27	-0.09	-0.03	-0.02	-0.10
14	1	0.37	-0.20	0.00	-0.14	-0.20	0.26	-0.33	-0.08	-0.19
15	6	-0.07	0.03	-0.01	-0.05	-0.08	-0.26	-0.10	-0.14	-0.09
16	1	-0.26	0.13	0.01	0.19	0.16	0.31	-0.33	-0.08	0.17
17	1	-0.55	0.30	0.00	0.15	0.28	-0.09	0.15	0.02	0.33
18	1	0.50	-0.26	0.00	-0.18	-0.28	-0.11	0.17	0.04	-0.28

	34	35	36
	A	A	A
Frequencies --	1021.9938	1026.4314	1071.4031
Red. masses --	1.4553	1.4335	1.2423
Frc consts --	0.8955	0.8898	0.8402

IR Inten --		18.2530			13.6342			3.9826		
Atom	AN	X	Y	Z	X	Y	Z	X	Y	Z
1	13	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
2	13	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
3	13	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
4	13	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
5	3	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
6	3	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
7	3	-0.01	-0.01	0.00	0.00	0.00	0.01	0.00	0.00	0.00
8	11	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
9	6	0.03	0.06	0.08	-0.04	-0.08	0.03	-0.01	-0.02	0.07
10	6	-0.02	-0.04	-0.03	0.01	0.03	-0.09	0.04	0.07	0.03
11	6	0.01	0.01	-0.10	0.03	0.06	-0.02	-0.03	-0.06	-0.01
12	1	-0.05	-0.06	0.45	-0.19	-0.20	0.46	-0.14	-0.15	0.51
13	6	0.05	0.09	-0.03	0.01	0.01	0.06	0.00	0.00	-0.05
14	1	-0.24	-0.45	-0.05	0.15	0.21	-0.09	0.29	0.52	0.05
15	6	-0.02	-0.03	0.05	-0.03	-0.06	-0.08	0.00	0.00	-0.03
16	1	-0.13	-0.19	-0.30	0.22	0.34	0.23	-0.16	-0.30	-0.22
17	1	0.06	0.09	-0.03	0.07	0.14	0.58	-0.02	-0.08	-0.35
18	1	-0.23	-0.40	0.33	-0.10	-0.14	-0.02	0.03	0.10	-0.10

	37	38	39
	A	A	A
Frequencies --	1073.1611	1143.0304	1285.7463
Red. masses --	1.2492	5.7722	1.2804
Frc consts --	0.8477	4.4433	1.2471
IR Inten --	2.1248	2.9110	0.0509

Atom	AN	X	Y	Z	X	Y	Z	X	Y	Z
1	13	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
2	13	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
3	13	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
4	13	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
5	3	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
6	3	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
7	3	0.00	0.00	0.00	0.01	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
8	11	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
9	6	0.02	0.02	-0.01	0.13	0.25	0.10	-0.01	-0.02	0.07
10	6	0.01	0.04	-0.04	-0.01	-0.01	0.29	-0.03	-0.06	0.00
11	6	0.01	0.04	0.06	0.09	0.15	-0.23	0.02	0.05	0.04
12	1	0.00	0.06	-0.09	0.15	0.29	0.08	0.09	0.13	-0.40
13	6	-0.01	-0.03	-0.07	-0.14	-0.25	0.08	-0.01	-0.02	-0.07
14	1	0.14	0.21	-0.03	-0.02	0.05	0.33	0.21	0.39	0.01
15	6	-0.03	-0.07	0.05	-0.07	-0.15	-0.25	0.03	0.05	-0.04
16	1	0.20	0.30	0.31	0.10	0.25	-0.20	-0.17	-0.31	-0.28
17	1	-0.07	-0.13	-0.50	-0.18	-0.29	0.03	0.05	0.11	0.42

18	1	-0.26	-0.46	0.35	-0.13	-0.19	-0.25	-0.17	-0.32	0.24

	40	41	42
	A	A	A
Frequencies --	1377.8200	1383.4833	1466.2919
Red. masses --	4.7571	4.9107	2.4944
Frc consts --	5.3208	5.5378	3.1598
IR Inten --	0.1499	0.6603	2.1157

Atom	AN	X	Y	Z	X	Y	Z	X	Y	Z
1	13	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
2	13	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
3	13	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
4	13	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
5	3	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
6	3	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
7	3	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
8	11	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
9	6	0.05	0.15	-0.04	-0.05	-0.07	0.33	-0.05	-0.11	-0.05
10	6	-0.11	-0.23	-0.10	0.12	0.19	-0.12	0.09	0.16	-0.03
11	6	-0.07	-0.18	0.04	-0.10	-0.19	-0.24	0.05	0.10	0.14
12	1	0.11	0.04	0.18	0.13	0.18	-0.45	-0.08	-0.13	-0.04
13	6	0.04	0.08	0.32	-0.08	-0.12	0.03	-0.04	-0.07	0.14
14	1	0.17	0.35	-0.09	-0.14	-0.25	-0.15	-0.25	-0.47	-0.06
15	6	0.09	0.18	-0.22	0.11	0.18	0.01	0.02	0.04	-0.16
16	1	-0.01	0.06	0.24	0.19	0.35	0.23	-0.21	-0.40	-0.29
17	1	-0.05	-0.11	-0.42	-0.06	-0.14	0.02	-0.10	-0.19	-0.27
18	1	-0.19	-0.36	0.18	-0.05	-0.08	0.22	-0.17	-0.32	0.09

	43	44	45
	A	A	A
Frequencies --	1468.7356	3141.5212	3179.1730
Red. masses --	2.6080	1.0892	1.0871
Frc consts --	3.3147	6.3334	6.4735
IR Inten --	0.2378	7.8809	0.1685

Atom	AN	X	Y	Z	X	Y	Z	X	Y	Z
1	13	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
2	13	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
3	13	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
4	13	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
5	3	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
6	3	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
7	3	0.00	0.00	0.01	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
8	11	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
9	6	-0.03	-0.06	0.17	-0.03	-0.07	-0.03	0.00	0.01	0.00
10	6	-0.03	-0.06	-0.13	0.00	0.00	0.01	0.00	0.00	-0.02
11	6	0.06	0.12	-0.05	0.01	0.01	-0.01	0.01	0.03	-0.04

12	1	0.10	0.16	-0.49	0.34	0.83	0.34	-0.03	-0.07	-0.03
13	6	0.06	0.11	0.14	0.00	0.00	0.00	-0.02	-0.04	0.01
14	1	0.08	0.16	-0.15	0.00	0.00	-0.15	-0.01	-0.01	0.25
15	6	-0.09	-0.16	0.01	0.00	0.00	0.00	0.01	0.02	0.04
16	1	-0.03	-0.06	-0.24	-0.06	-0.12	0.16	-0.15	-0.30	0.44
17	1	-0.01	-0.03	-0.49	0.00	-0.01	0.00	0.26	0.48	-0.15
18	1	0.16	0.27	-0.34	0.00	-0.01	-0.02	-0.13	-0.27	-0.45

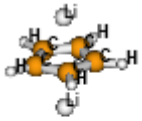
	46	47	48
	A	A	A
Frequencies --	3187.3097	3202.1591	3212.7982
Red. masses --	1.0933	1.0953	1.1027
Frc consts --	6.5439	6.6173	6.7064
IR Inten --	18.0401	18.6859	6.9612

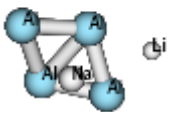
Atom	AN	X	Y	Z	X	Y	Z	X	Y	Z
1	13	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
2	13	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
3	13	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
4	13	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
5	3	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
6	3	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
7	3	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
8	11	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
9	6	0.01	0.02	0.01	0.00	0.00	0.00	-0.01	-0.01	0.00
10	6	0.00	0.00	0.02	0.00	0.00	-0.06	0.00	0.00	-0.06
11	6	0.02	0.03	-0.05	0.01	0.02	-0.02	-0.01	-0.01	0.02
12	1	-0.07	-0.16	-0.07	0.02	0.04	0.01	0.05	0.12	0.05
13	6	0.03	0.05	-0.02	0.00	0.00	0.00	0.02	0.04	-0.01
14	1	0.01	0.01	-0.24	-0.02	-0.02	0.65	-0.02	-0.02	0.65
15	6	0.00	0.00	0.01	-0.02	-0.03	-0.05	0.01	0.02	0.04
16	1	-0.19	-0.37	0.54	-0.09	-0.18	0.26	0.07	0.14	-0.19
17	1	-0.30	-0.55	0.18	0.02	0.03	-0.02	-0.23	-0.42	0.13
18	1	-0.01	-0.02	-0.05	0.17	0.33	0.56	-0.12	-0.24	-0.41

$CpNaAl_4Li_3^- \rightarrow CpLi + Al_4Li_2Na^-$ **-25.19770672**

$CpNaAl_4Li_3^- \rightarrow Cp^- + Al_4Li_3Na$ **-62.76287268**

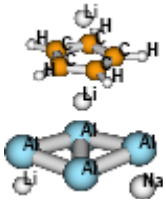
CpNaAl4Li3-fusion60002-b36311+gx.frq 15.4586461





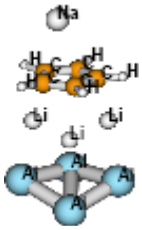
State=1-A\HF=-1348.3574289

CpNaAl4Li3-fusion60001-b36311+gx.frq 16.52735838



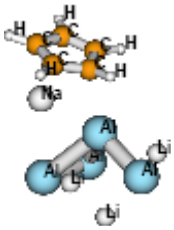
State=1-A\HF=-1348.3557258

CpNaAl4Li3-fusion60000-b36311+gx.frq 25.29655963



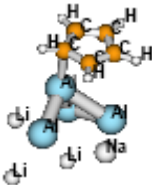
State=1-A\HF=-1348.3417512

CpNaAl4Li3-fusion1357-b36311+gx.frq 23.00589712



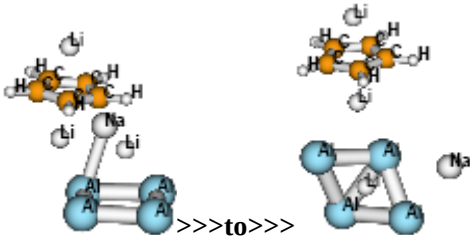
State=1-A\HF=-1348.3454016

CpNaAl4Li3-fusion80000-b36311+gx.frq 36.88660658

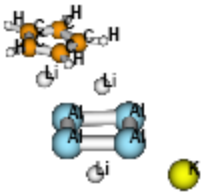


State=1-A\HF=-1348.3232813

CpNaAl4Li3-fusion10000-b36311+gx.frq 18.15700185



State=1-A\HF=-1348.3531288



Charge = -1 Multiplicity = 1

Al,0,0.0576244835,1.7123146475,-1.2013873144
Al,0,-1.731398181,-0.3460704856,-1.3050848049
Al,0,-1.7330312768,-0.431481771,1.2700296217
Al,0,0.0569906917,1.6280529279,1.3028662741
Li,0,2.6054588169,0.7519180857,0.0146651487
Li,0,0.6841182155,-0.9426802071,-0.0288649351
Li,0,-2.3414937304,2.1400957255,0.0621021547
K,0,-4.9308947346,-0.7395075237,-0.0273491592
C,0,3.5966354633,-0.9236714142,-1.1810008893
C,0,4.5443953896,-0.0041886987,-0.6831903757
C,0,2.9739935901,-1.554400879,-0.0694251824
H,0,3.3811466731,-1.1162461887,-2.2242044351
C,0,4.5145107237,-0.0638980133,0.7376041485
H,0,5.1830517269,0.6347230802,-1.2813491654
C,0,3.549206489,-1.0213196918,1.1163169789
H,0,2.315379418,-2.420602913,-0.12099187
H,0,5.1255557343,0.5220367272,1.4136762826
H,0,3.2920547413,-1.3006039444,2.1301002086

State=1-A\HF=-1786.0139204

		1			2			3		
		A			A			A		
Frequencies --		6.4734			36.0227			40.6450		
Red. masses --		3.8652			15.3396			12.0257		
Frc consts --		0.0001			0.0117			0.0117		
IR Inten --		0.1382			3.3990			1.0115		
Atom	AN	X	Y	Z	X	Y	Z	X	Y	Z
1	13	-0.01	-0.03	-0.06	0.03	0.21	0.01	0.02	-0.13	0.06
2	13	-0.02	-0.03	0.01	0.04	0.20	0.02	0.10	-0.17	0.23
3	13	0.02	0.03	0.01	0.02	0.22	0.03	-0.10	0.13	0.23
4	13	0.01	0.03	-0.06	0.02	0.22	0.01	-0.03	0.10	0.07
5	3	0.00	0.00	-0.03	-0.02	-0.03	0.00	0.00	0.00	0.01
6	3	0.00	0.00	-0.03	-0.09	0.10	0.05	0.01	-0.01	0.51
7	3	0.00	0.00	-0.05	-0.02	0.14	0.00	0.00	-0.01	-0.03
8	19	0.00	0.00	0.07	0.20	-0.36	-0.02	-0.01	0.03	-0.25
9	6	0.15	0.13	-0.05	-0.18	-0.13	-0.01	-0.05	0.12	-0.16
10	6	0.09	0.07	0.18	-0.09	-0.22	-0.01	-0.03	0.08	-0.12

11	6	0.00	0.00	-0.20	-0.22	-0.09	-0.02	0.01	0.01	-0.18
12	1	0.28	0.24	-0.10	-0.20	-0.11	-0.01	-0.12	0.23	-0.16
13	6	-0.10	-0.08	0.17	-0.09	-0.22	-0.01	0.04	-0.05	-0.12
14	1	0.17	0.14	0.33	-0.04	-0.27	-0.01	-0.07	0.14	-0.09
15	6	-0.15	-0.13	-0.06	-0.17	-0.14	-0.01	0.07	-0.10	-0.16
16	1	0.00	0.01	-0.39	-0.29	-0.03	-0.02	0.01	0.01	-0.25
17	1	-0.19	-0.15	0.32	-0.04	-0.28	-0.01	0.08	-0.11	-0.09
18	1	-0.28	-0.24	-0.12	-0.18	-0.13	-0.01	0.15	-0.21	-0.17

	4	5	6
	A	A	A
Frequencies --	63.5970	77.6280	83.9414
Red. masses --	5.3549	11.0899	12.5698
Frc consts --	0.0128	0.0394	0.0522
IR Inten --	1.4872	0.5688	1.9608

Atom	AN	X	Y	Z	X	Y	Z	X	Y	Z
1	13	-0.10	0.06	-0.01	0.10	0.04	0.08	-0.09	0.05	-0.03
2	13	0.00	0.05	0.06	0.18	0.01	-0.19	0.21	-0.17	-0.02
3	13	0.01	-0.05	0.06	-0.14	-0.03	-0.19	0.22	-0.17	0.01
4	13	0.09	-0.06	-0.01	-0.11	-0.03	0.07	-0.03	0.05	-0.04
5	3	0.00	0.00	-0.39	-0.01	0.01	-0.16	-0.18	0.11	0.08
6	3	0.00	0.00	0.21	0.01	-0.01	0.79	0.09	-0.03	0.00
7	3	0.00	-0.01	0.23	-0.01	-0.02	-0.32	-0.07	-0.20	0.15
8	19	0.00	0.01	-0.08	0.01	0.01	0.18	0.22	0.17	-0.01
9	6	0.16	-0.16	-0.01	0.02	-0.02	-0.05	-0.28	0.04	0.02
10	6	0.10	-0.09	0.00	0.01	-0.02	-0.03	-0.28	0.04	0.01
11	6	0.00	0.00	-0.01	-0.02	0.00	-0.06	-0.21	-0.02	0.02
12	1	0.32	-0.31	-0.01	0.04	-0.04	-0.05	-0.30	0.06	0.02
13	6	-0.12	0.11	0.00	-0.05	0.02	-0.03	-0.24	0.01	0.01
14	1	0.19	-0.19	0.01	0.03	-0.03	-0.02	-0.32	0.07	0.00
15	6	-0.17	0.16	-0.01	-0.06	0.02	-0.05	-0.20	-0.02	0.02
16	1	0.00	-0.01	0.00	-0.02	0.00	-0.09	-0.18	-0.04	0.02
17	1	-0.22	0.20	0.01	-0.08	0.04	-0.02	-0.23	0.01	0.01
18	1	-0.32	0.30	-0.01	-0.08	0.03	-0.05	-0.17	-0.05	0.02

	7	8	9
	A	A	A
Frequencies --	84.6244	107.2426	122.6349
Red. masses --	7.9031	9.1115	21.9793
Frc consts --	0.0333	0.0617	0.1948
IR Inten --	0.3910	0.5006	4.8047

Atom	AN	X	Y	Z	X	Y	Z	X	Y	Z
1	13	0.11	-0.01	0.15	0.16	-0.18	0.00	0.26	0.06	-0.02
2	13	-0.02	-0.03	0.08	-0.08	0.10	0.00	0.28	-0.01	0.01
3	13	0.07	-0.02	0.08	-0.09	0.10	0.00	0.27	0.00	-0.01
4	13	-0.13	0.02	0.15	0.16	-0.18	0.00	0.26	0.06	0.02

5	3	-0.02	0.02	-0.20	-0.23	-0.09	0.00	-0.08	0.10	0.01
6	3	0.01	0.00	-0.39	-0.13	-0.24	0.01	0.16	-0.06	-0.02
7	3	-0.01	-0.02	-0.64	0.23	0.19	0.00	0.19	-0.05	0.00
8	19	0.03	0.02	-0.02	0.13	-0.02	0.00	-0.52	-0.13	0.00
9	6	0.07	-0.10	-0.05	-0.09	0.06	0.00	-0.16	0.03	0.00
10	6	0.03	-0.06	-0.04	-0.22	0.20	0.00	-0.20	0.07	0.00
11	6	-0.03	0.00	-0.05	0.00	-0.03	0.00	-0.11	-0.01	0.00
12	1	0.17	-0.20	-0.05	-0.07	0.04	0.00	-0.15	0.02	0.00
13	6	-0.10	0.07	-0.04	-0.22	0.19	0.00	-0.19	0.07	0.00
14	1	0.08	-0.11	-0.04	-0.32	0.30	0.00	-0.23	0.11	0.00
15	6	-0.13	0.10	-0.05	-0.08	0.06	0.00	-0.15	0.03	0.00
16	1	-0.02	-0.01	-0.02	0.11	-0.11	0.00	-0.06	-0.05	0.00
17	1	-0.16	0.13	-0.04	-0.31	0.29	0.00	-0.22	0.10	0.00
18	1	-0.23	0.20	-0.05	-0.05	0.03	0.00	-0.14	0.02	0.00

	10	11	12
	A	A	A
Frequencies --	129.3922	144.3234	147.7286
Red. masses --	11.2625	22.0839	5.0433
Frc consts --	0.1111	0.2710	0.0648
IR Inten --	0.0076	0.0732	2.6546

Atom	AN	X	Y	Z	X	Y	Z	X	Y	Z
1	13	0.03	-0.16	0.13	-0.08	0.46	-0.10	-0.06	0.07	0.01
2	13	0.18	-0.17	-0.12	0.34	-0.21	0.12	0.03	0.05	-0.01
3	13	-0.19	0.17	-0.12	-0.32	0.22	0.13	0.06	0.03	0.00
4	13	-0.04	0.16	0.13	0.05	-0.42	-0.11	-0.07	0.11	0.00
5	3	0.00	0.00	-0.11	-0.03	-0.05	0.04	-0.16	-0.21	-0.01
6	3	0.00	0.01	-0.44	-0.02	-0.06	-0.39	-0.04	-0.29	0.01
7	3	0.00	-0.01	0.60	-0.03	-0.01	-0.22	-0.12	-0.07	0.01
8	19	0.00	0.00	0.04	0.00	0.00	0.06	-0.02	0.01	0.00
9	6	0.08	-0.08	-0.04	0.01	-0.01	0.01	0.12	-0.11	0.00
10	6	0.05	-0.05	-0.04	-0.02	0.03	0.01	-0.08	0.09	0.00
11	6	0.00	0.00	-0.04	0.05	-0.04	0.01	0.23	-0.23	0.00
12	1	0.16	-0.15	-0.04	0.02	-0.01	0.01	0.17	-0.16	0.00
13	6	-0.05	0.05	-0.04	0.00	0.01	0.01	-0.08	0.09	0.00
14	1	0.10	-0.10	-0.03	-0.05	0.06	0.01	-0.22	0.23	0.00
15	6	-0.08	0.08	-0.04	0.04	-0.03	0.01	0.12	-0.11	0.00
16	1	0.00	0.00	-0.02	0.08	-0.07	0.02	0.40	-0.36	0.00
17	1	-0.10	0.09	-0.03	-0.02	0.03	0.01	-0.21	0.23	0.00
18	1	-0.16	0.16	-0.04	0.05	-0.05	0.01	0.18	-0.17	0.00

	13	14	15
	A	A	A
Frequencies --	166.8914	213.1086	216.4306
Red. masses --	23.1832	7.6408	19.0842
Frc consts --	0.3804	0.2045	0.5267

IR Inten --		0.9379			13.0357			12.3083		
Atom	AN	X	Y	Z	X	Y	Z	X	Y	Z
1	13	0.36	-0.07	-0.23	-0.10	0.01	-0.03	0.37	0.21	-0.04
2	13	0.23	0.34	0.21	0.02	-0.09	0.03	-0.28	-0.23	-0.02
3	13	-0.23	-0.35	0.20	0.04	-0.07	-0.03	0.27	0.24	-0.02
4	13	-0.37	0.07	-0.23	-0.12	0.00	0.03	-0.35	-0.20	-0.05
5	3	0.00	0.00	0.02	0.02	0.10	0.00	0.00	0.00	0.05
6	3	0.00	0.00	-0.18	0.15	0.11	0.01	0.00	0.00	0.21
7	3	0.01	0.01	0.36	0.43	0.80	0.02	-0.03	-0.07	0.52
8	19	0.00	0.00	0.05	-0.01	-0.02	0.00	0.00	0.00	-0.02
9	6	0.03	-0.03	-0.03	0.02	-0.05	0.00	0.05	-0.05	-0.02
10	6	0.02	-0.01	-0.03	-0.04	0.01	0.00	0.03	-0.03	-0.02
11	6	0.00	0.00	-0.03	0.06	-0.10	0.00	0.00	0.00	-0.03
12	1	0.05	-0.05	-0.03	0.04	-0.08	0.00	0.08	-0.08	-0.02
13	6	-0.02	0.02	-0.03	-0.04	0.01	0.00	-0.03	0.03	-0.02
14	1	0.03	-0.03	-0.03	-0.07	0.04	0.00	0.05	-0.05	-0.03
15	6	-0.03	0.03	-0.03	0.02	-0.05	0.00	-0.05	0.05	-0.02
16	1	0.00	0.00	-0.03	0.11	-0.13	0.00	0.00	0.00	-0.02
17	1	-0.03	0.03	-0.03	-0.07	0.04	0.00	-0.05	0.06	-0.02
18	1	-0.05	0.05	-0.03	0.04	-0.08	0.00	-0.08	0.09	-0.02

		16			17			18		
		A			A			A		
Frequencies --		224.7841			228.7623			287.0116		
Red. masses --		9.6020			9.4192			18.3091		
Frc consts --		0.2859			0.2904			0.8886		
IR Inten --		60.4065			52.1965			2.9354		
Atom	AN	X	Y	Z	X	Y	Z	X	Y	Z
1	13	0.14	0.13	-0.01	-0.08	-0.18	0.00	0.00	0.03	-0.11
2	13	-0.19	-0.12	0.04	0.07	0.17	0.01	-0.03	0.01	0.52
3	13	-0.20	-0.13	-0.04	0.07	0.17	-0.01	-0.03	0.02	-0.52
4	13	0.15	0.13	0.01	-0.08	-0.18	-0.01	0.00	0.03	0.11
5	3	0.09	0.19	0.00	0.15	0.43	0.01	-0.01	0.21	0.02
6	3	0.23	0.50	0.00	0.48	0.35	0.00	0.22	-0.52	0.00
7	3	0.09	-0.23	-0.01	-0.31	-0.09	0.00	-0.04	-0.09	0.00
8	19	0.03	0.00	0.00	-0.01	0.00	0.00	0.02	0.01	0.00
9	6	0.01	-0.09	0.00	0.00	-0.08	0.00	-0.02	0.02	0.00
10	6	-0.13	0.07	0.00	-0.09	0.01	0.00	0.04	-0.05	0.00
11	6	0.13	-0.21	0.00	0.08	-0.17	0.00	-0.05	0.06	0.00
12	1	0.05	-0.13	0.00	0.03	-0.12	0.00	-0.03	0.03	0.00
13	6	-0.13	0.06	0.00	-0.09	0.01	0.00	0.04	-0.04	0.00
14	1	-0.23	0.16	-0.01	-0.12	0.04	-0.01	0.09	-0.10	0.00
15	6	0.02	-0.10	0.00	0.00	-0.08	0.00	-0.02	0.03	0.00
16	1	0.18	-0.24	0.00	0.14	-0.21	0.00	0.00	0.02	0.00
17	1	-0.22	0.15	0.01	-0.12	0.04	0.00	0.09	-0.09	0.00

18	1	0.07	-0.15	0.00	0.04	-0.13	0.00	-0.04	0.04	0.00

	19	20	21
	A	A	A
Frequencies --	299.4010	309.5584	329.6457
Red. masses --	5.8717	7.8128	14.8515
Frc consts --	0.3101	0.4411	0.9509
IR Inten --	0.0374	15.1360	3.5670

Atom	AN	X	Y	Z	X	Y	Z	X	Y	Z
1	13	-0.03	0.00	-0.01	0.01	0.05	0.04	0.09	0.01	0.42
2	13	0.00	0.01	-0.01	-0.07	-0.01	-0.13	-0.01	-0.07	0.08
3	13	-0.01	-0.01	0.01	-0.08	-0.01	0.13	-0.01	-0.07	-0.08
4	13	0.03	0.00	-0.01	0.01	0.05	-0.04	0.09	0.02	-0.42
5	3	0.00	0.01	0.75	0.11	0.62	-0.03	0.01	-0.04	0.00
6	3	0.00	-0.02	0.07	0.25	-0.64	-0.01	0.08	-0.04	0.00
7	3	0.00	0.00	-0.04	0.13	-0.04	0.00	-0.62	0.46	0.01
8	19	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
9	6	0.14	-0.13	-0.07	-0.02	0.00	0.00	-0.01	0.01	0.00
10	6	0.07	-0.07	-0.08	0.01	-0.04	0.00	-0.01	0.00	0.00
11	6	0.00	0.00	-0.09	-0.01	-0.01	0.00	-0.01	0.01	0.00
12	1	0.23	-0.22	-0.08	-0.02	-0.01	0.00	-0.02	0.02	0.00
13	6	-0.07	0.08	-0.08	0.02	-0.05	0.00	0.00	0.00	0.00
14	1	0.12	-0.13	-0.08	0.07	-0.10	0.00	-0.01	0.01	0.00
15	6	-0.14	0.13	-0.07	-0.01	-0.01	0.00	-0.01	0.01	0.00
16	1	0.01	-0.01	-0.07	0.08	-0.08	0.00	0.00	0.00	0.00
17	1	-0.13	0.14	-0.08	0.08	-0.11	0.01	-0.01	0.00	0.00
18	1	-0.23	0.22	-0.08	0.00	-0.03	0.00	-0.02	0.01	0.00

	22	23	24
	A	A	A
Frequencies --	346.4142	380.0621	478.9114
Red. masses --	9.9947	7.2311	5.9818
Frc consts --	0.7067	0.6154	0.8083
IR Inten --	12.5546	213.7387	126.2985

Atom	AN	X	Y	Z	X	Y	Z	X	Y	Z
1	13	-0.11	-0.01	0.24	0.00	0.02	-0.03	-0.02	0.00	-0.01
2	13	0.01	0.07	0.06	-0.05	0.01	-0.05	0.00	0.00	0.00
3	13	0.01	0.07	-0.06	-0.05	0.01	0.05	0.00	0.00	0.00
4	13	-0.11	-0.01	-0.24	0.00	0.02	0.03	-0.02	0.00	0.01
5	3	-0.02	-0.11	0.00	-0.13	-0.51	0.00	0.83	-0.23	0.00
6	3	0.08	0.10	0.00	0.80	-0.09	-0.01	-0.04	-0.13	0.00
7	3	0.78	-0.45	-0.01	-0.03	0.03	0.00	-0.01	0.00	0.00
8	19	-0.01	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
9	6	0.00	0.01	0.00	-0.04	0.06	-0.01	-0.07	0.03	0.00
10	6	0.00	0.00	0.00	0.02	-0.02	0.00	-0.08	0.06	-0.01
11	6	-0.01	0.01	0.00	-0.08	0.10	0.00	0.01	-0.04	0.00

12	1	-0.01	0.01	0.00	-0.07	0.09	-0.01	-0.16	0.10	0.00
13	6	0.00	0.00	0.00	0.02	-0.02	0.00	-0.08	0.06	0.01
14	1	-0.01	0.01	0.00	-0.01	0.01	0.01	-0.20	0.16	-0.01
15	6	0.00	0.01	0.00	-0.04	0.06	0.01	-0.07	0.03	0.00
16	1	-0.03	0.02	0.00	-0.01	0.04	0.00	-0.08	0.03	0.00
17	1	-0.01	0.01	0.00	0.00	0.01	-0.01	-0.19	0.16	0.01
18	1	-0.01	0.01	0.00	-0.07	0.09	0.01	-0.15	0.10	0.00

	25	26	27
	A	A	A
Frequencies --	626.7090	635.0664	733.4262
Red. masses --	5.0399	4.1605	1.2717
Frc consts --	1.1663	0.9886	0.4031
IR Inten --	34.7988	0.0178	6.8490

Atom	AN	X	Y	Z	X	Y	Z	X	Y	Z
1	13	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
2	13	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
3	13	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
4	13	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
5	3	0.08	0.01	0.00	0.00	0.00	-0.02	0.00	0.00	0.01
6	3	0.02	-0.02	0.00	0.00	0.00	0.01	0.00	0.00	0.00
7	3	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
8	19	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
9	6	0.20	-0.19	0.01	0.14	-0.14	0.01	-0.07	0.07	0.01
10	6	-0.08	0.07	-0.01	-0.22	0.25	0.00	-0.03	0.04	-0.01
11	6	-0.31	0.28	0.00	0.00	0.00	-0.01	0.00	0.00	0.00
12	1	0.36	-0.35	0.01	0.23	-0.24	0.01	0.40	-0.42	0.01
13	6	-0.09	0.08	0.01	0.21	-0.24	-0.01	0.04	-0.05	-0.01
14	1	-0.16	0.14	-0.02	-0.34	0.37	0.00	0.26	-0.27	-0.01
15	6	0.21	-0.20	-0.01	-0.13	0.13	0.01	0.06	-0.06	0.01
16	1	-0.13	0.13	0.00	-0.01	0.00	0.04	0.02	-0.02	-0.06
17	1	-0.17	0.15	0.02	0.33	-0.37	0.00	-0.29	0.30	-0.01
18	1	0.36	-0.35	-0.01	-0.22	0.23	0.01	-0.39	0.41	0.01

	28	29	30
	A	A	A
Frequencies --	740.4323	762.1045	850.7639
Red. masses --	1.2435	1.1413	1.4396
Frc consts --	0.4017	0.3905	0.6139
IR Inten --	12.9479	562.3757	0.6634

Atom	AN	X	Y	Z	X	Y	Z	X	Y	Z
1	13	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
2	13	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
3	13	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
4	13	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
5	3	0.00	-0.02	0.00	-0.03	0.03	0.00	0.00	0.00	0.00

6	3	0.02	-0.01	0.00	0.01	-0.01	0.00	0.00	0.01	0.00
7	3	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
8	19	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
9	6	0.01	-0.02	0.00	0.04	-0.05	-0.01	0.05	-0.03	0.08
10	6	-0.06	0.07	0.00	0.01	-0.01	0.00	0.00	0.05	0.00
11	6	0.05	-0.03	0.00	0.04	-0.01	0.00	-0.11	-0.06	0.00
12	1	0.05	-0.07	0.00	-0.31	0.29	-0.01	-0.28	0.46	0.04
13	6	-0.06	0.06	0.00	0.01	-0.01	0.00	0.00	0.05	0.00
14	1	0.42	-0.43	0.01	-0.19	0.20	0.01	0.13	-0.20	-0.12
15	6	0.01	-0.02	0.00	0.04	-0.05	0.01	0.05	-0.03	-0.08
16	1	-0.41	0.32	-0.01	-0.53	0.42	-0.01	0.30	-0.37	0.00
17	1	0.40	-0.41	-0.01	-0.20	0.21	-0.01	0.13	-0.21	0.11
18	1	0.02	-0.04	0.00	-0.31	0.30	0.01	-0.28	0.47	-0.03

	31	32	33
	A	A	A
Frequencies --	861.1062	862.6779	866.4127
Red. masses --	3.0416	1.3603	2.4926
Frc consts --	1.3288	0.5965	1.1024
IR Inten --	0.0358	0.5955	3.9757

Atom	AN	X	Y	Z	X	Y	Z	X	Y	Z
1	13	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
2	13	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
3	13	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
4	13	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
5	3	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	-0.01	0.00	0.00
6	3	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.02	-0.02	0.00
7	3	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
8	19	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
9	6	0.10	0.05	0.13	-0.01	0.06	0.04	-0.04	0.03	0.18
10	6	0.11	0.15	-0.16	0.09	-0.02	-0.04	0.08	0.05	0.03
11	6	0.00	0.00	0.08	0.00	-0.01	0.03	-0.11	-0.17	-0.01
12	1	-0.33	0.07	0.22	0.24	-0.31	0.06	0.35	-0.14	0.13
13	6	-0.10	-0.15	-0.17	-0.09	0.03	-0.05	0.10	0.05	-0.02
14	1	0.41	-0.07	-0.07	-0.36	0.46	-0.03	-0.17	0.06	-0.22
15	6	-0.10	-0.05	0.12	0.01	-0.06	0.02	-0.03	0.05	-0.19
16	1	0.00	0.00	-0.34	-0.02	0.01	-0.09	-0.54	0.16	0.00
17	1	-0.42	0.08	-0.08	0.35	-0.45	-0.02	-0.21	0.11	0.22
18	1	0.34	-0.09	0.22	-0.21	0.29	0.06	0.38	-0.17	-0.14

	34	35	36
	A	A	A
Frequencies --	1019.9712	1021.4298	1069.3102
Red. masses --	1.4048	1.4722	1.2485
Frc consts --	0.8611	0.9050	0.8411
IR Inten --	7.2826	42.9636	4.6106

Atom	AN	X	Y	Z	X	Y	Z	X	Y	Z
1	13	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
2	13	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
3	13	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
4	13	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
5	3	0.00	0.00	-0.01	0.01	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
6	3	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
7	3	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
8	19	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
9	6	0.02	0.01	0.09	0.03	0.04	-0.05	0.06	0.06	0.02
10	6	-0.06	-0.06	0.01	-0.03	-0.03	0.09	-0.01	-0.01	-0.04
11	6	0.00	0.00	-0.08	-0.08	-0.08	0.00	0.00	0.00	0.06
12	1	0.05	0.08	0.07	0.39	0.34	-0.19	0.38	0.37	-0.11
13	6	0.06	0.06	0.01	-0.03	-0.03	-0.09	0.01	0.00	-0.03
14	1	-0.22	-0.19	-0.29	0.10	0.11	0.38	-0.12	-0.14	-0.30
15	6	-0.02	-0.01	0.09	0.03	0.04	0.05	-0.06	-0.06	0.02
16	1	0.02	0.01	-0.77	-0.13	-0.05	0.01	-0.01	-0.01	0.46
17	1	0.24	0.20	-0.28	0.11	0.12	-0.36	0.11	0.14	-0.25
18	1	-0.04	-0.07	0.07	0.39	0.33	0.22	-0.35	-0.34	-0.12

	37	38	39
	A	A	A
Frequencies --	1073.5107	1141.7180	1283.7862
Red. masses --	1.2591	5.5115	1.2842
Frc consts --	0.8549	4.2329	1.2470
IR Inten --	0.6379	9.2749	0.0006

Atom	AN	X	Y	Z	X	Y	Z	X	Y	Z
1	13	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
2	13	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
3	13	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
4	13	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
5	3	0.00	0.00	0.00	0.01	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
6	3	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
7	3	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
8	19	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
9	6	-0.02	-0.03	0.05	0.06	0.05	0.26	-0.04	-0.05	0.01
10	6	0.03	0.03	0.07	-0.17	-0.17	0.17	-0.03	-0.03	-0.06
11	6	-0.02	0.00	0.00	0.21	0.21	0.01	0.00	0.00	0.08
12	1	-0.27	-0.22	0.14	0.12	0.18	0.26	0.31	0.31	-0.14
13	6	0.03	0.04	-0.07	-0.16	-0.16	-0.18	0.03	0.03	-0.05
14	1	0.23	0.22	0.46	-0.26	-0.23	0.07	0.17	0.18	0.36
15	6	-0.03	-0.03	-0.05	0.07	0.06	-0.26	0.04	0.05	0.02
16	1	0.05	-0.05	0.02	0.23	0.24	0.01	0.01	0.01	-0.42
17	1	0.26	0.25	-0.47	-0.26	-0.22	-0.09	-0.19	-0.19	0.34
18	1	-0.29	-0.24	-0.17	0.13	0.19	-0.25	-0.31	-0.30	-0.16

		40			41			42		
		A			A			A		
Frequencies --		1379.1138			1383.8274			1463.8737		
Red. masses --		4.6628			4.9761			2.4550		
Frc consts --		5.2251			5.6144			3.0996		
IR Inten --		1.0837			0.0139			11.2609		
Atom	AN	X	Y	Z	X	Y	Z	X	Y	Z
1	13	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
2	13	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
3	13	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
4	13	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
5	3	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.01	0.00	0.00
6	3	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
7	3	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
8	19	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
9	6	-0.15	-0.16	-0.08	0.18	0.16	-0.18	0.11	0.11	-0.09
10	6	0.11	0.11	0.28	-0.12	-0.10	0.01	-0.02	-0.01	0.15
11	6	0.07	0.11	0.01	-0.01	-0.01	0.37	-0.09	-0.09	0.00
12	1	0.14	0.17	-0.22	-0.28	-0.28	0.00	-0.37	-0.37	0.10
13	6	0.12	0.12	-0.27	0.12	0.09	0.02	-0.02	-0.01	-0.15
14	1	-0.20	-0.20	-0.36	-0.06	-0.07	0.11	-0.21	-0.21	-0.21
15	6	-0.15	-0.17	0.06	-0.17	-0.15	-0.19	0.11	0.11	0.09
16	1	0.20	0.01	0.00	0.01	0.01	-0.54	-0.12	-0.10	-0.02
17	1	-0.22	-0.22	0.35	0.06	0.07	0.10	-0.21	-0.21	0.17
18	1	0.14	0.17	0.23	0.28	0.27	0.01	-0.38	-0.37	-0.14

		43			44			45		
		A			A			A		
Frequencies --		1469.3423			3122.0474			3180.7229		
Red. masses --		2.6806			1.0904			1.0869		
Frc consts --		3.4098			6.2620			6.4787		
IR Inten --		0.0414			5.5468			3.7181		
Atom	AN	X	Y	Z	X	Y	Z	X	Y	Z
1	13	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
2	13	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
3	13	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
4	13	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
5	3	0.00	0.00	0.01	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
6	3	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
7	3	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
8	19	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
9	6	-0.08	-0.09	-0.10	0.00	0.00	0.01	0.00	0.00	-0.02
10	6	0.13	0.12	0.09	0.00	0.00	0.00	-0.04	-0.03	0.03
11	6	0.00	0.00	0.17	-0.05	-0.07	0.00	0.00	0.00	0.00
12	1	0.11	0.11	-0.21	-0.02	-0.02	-0.10	0.05	0.05	0.23

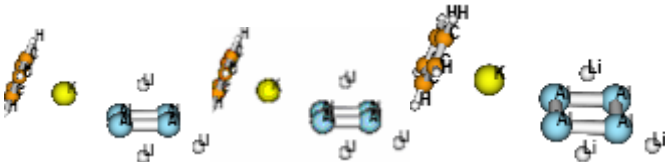
13	6	-0.13	-0.12	0.08	0.00	0.00	0.00	0.03	0.03	0.03
14	1	-0.13	-0.11	-0.45	0.00	0.00	0.00	0.40	0.39	-0.38
15	6	0.08	0.08	-0.09	0.00	0.00	-0.01	0.00	0.00	-0.02
16	1	0.01	0.01	-0.49	0.59	0.79	0.03	0.00	0.00	0.00
17	1	0.16	0.14	-0.45	0.00	0.00	0.00	-0.37	-0.36	-0.39
18	1	-0.08	-0.08	-0.21	-0.03	-0.03	0.10	-0.05	-0.05	0.22

	46	47	48
	A	A	A
Frequencies --	3194.4520	3207.4294	3214.7982
Red. masses --	1.0923	1.0956	1.1027
Frc consts --	6.5674	6.6408	6.7148
IR Inten --	25.8715	14.1585	12.2913

Atom	AN	X	Y	Z	X	Y	Z	X	Y	Z
1	13	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
2	13	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
3	13	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
4	13	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
5	3	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
6	3	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
7	3	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
8	19	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
9	6	0.00	-0.01	-0.03	-0.01	-0.01	-0.06	-0.01	-0.01	-0.05
10	6	-0.03	-0.03	0.03	0.01	0.01	-0.01	0.02	0.02	-0.02
11	6	-0.01	-0.01	0.00	0.00	0.00	0.00	-0.01	-0.01	0.00
12	1	0.08	0.08	0.38	0.13	0.13	0.64	0.11	0.12	0.55
13	6	-0.03	-0.03	-0.03	-0.01	-0.01	-0.01	0.02	0.02	0.02
14	1	0.33	0.32	-0.32	-0.13	-0.13	0.12	-0.24	-0.24	0.23
15	6	-0.01	-0.01	0.04	0.01	0.02	-0.06	-0.01	-0.01	0.05
16	1	0.05	0.07	0.00	0.00	0.00	-0.01	0.07	0.09	0.00
17	1	0.33	0.32	0.36	0.14	0.14	0.15	-0.24	-0.23	-0.26
18	1	0.10	0.10	-0.41	-0.16	-0.16	0.63	0.13	0.13	-0.52

$CpKAl_4Li_3^- \rightarrow CpLi + Al_4Li_2K^-$ **-25.00625357**

$CpKAl_4Li_3^- \rightarrow Cp^- + Al_4Li_3K$ **-59.03107368**



Charge = -1 Multiplicity = 1

Al,0,4.2306606956,1.3080599953,0.4344819759

Al,0,1.6641590277,1.2329669349,-0.4780958904

Al,0,1.6990300368,-1.2710822399,-0.4629145848

Al,0,4.2681554745,-1.2638369438,0.4486261856
Li,0,6.3788126191,0.0473568102,-0.4765519056
Li,0,3.638069795,-0.0021944292,-2.0194513567
Li,0,2.2529087292,0.0007431922,1.9317280895
K,0,-1.7646557338,-0.0693887487,0.0013045045
C,0,-4.5332933301,-1.1437276275,0.3333933439
C,0,-4.470712441,-0.0813357062,1.2686382506
C,0,-4.5429033805,-0.5822716198,-0.9670896737
H,0,-4.6008116869,-2.2004405625,0.5721782291
C,0,-4.4419359228,1.1366543919,0.5459829476
H,0,-4.4830291452,-0.1816402492,2.3494409195
C,0,-4.4865443576,0.8271302132,-0.8356436494
H,0,-4.6176878464,-1.1334882544,-1.8990976176
H,0,-4.4248253158,2.1331230244,0.9759031344
H,0,-4.5082919528,1.545016932,-1.6493419679

State=1-A\HF=-1785.9961617

		1			2			3		
		A			A			A		
Frequencies --		7.8429			13.4560			25.7634		
Red. masses --		4.5305			10.2746			9.5711		
Frc consts --		0.0002			0.0011			0.0037		
IR Inten --		0.0048			0.2402			1.8661		
Atom	AN	X	Y	Z	X	Y	Z	X	Y	Z
1	13	0.00	-0.03	0.09	0.09	0.00	-0.14	-0.13	0.09	0.02
2	13	0.00	0.03	0.11	-0.04	0.00	0.24	-0.11	-0.14	0.02
3	13	0.00	0.03	-0.08	-0.04	0.00	0.26	0.10	-0.14	-0.02
4	13	0.01	-0.03	-0.10	0.08	0.00	-0.12	0.12	0.10	-0.03
5	3	0.00	0.04	-0.03	-0.05	-0.01	-0.46	-0.01	0.32	0.00
6	3	-0.02	0.15	0.00	-0.28	-0.02	-0.05	-0.01	0.06	0.00
7	3	0.02	-0.15	0.01	0.29	0.02	0.16	0.00	-0.14	0.00
8	19	0.00	0.00	0.01	-0.02	0.00	0.13	0.00	-0.25	0.01
9	6	0.00	0.04	0.18	-0.05	-0.01	-0.17	-0.17	0.17	0.00
10	6	0.00	0.19	0.01	-0.14	-0.03	-0.14	-0.01	0.16	0.00
11	6	0.00	-0.18	0.09	0.08	0.02	-0.16	-0.07	0.17	0.00
12	1	0.01	0.08	0.36	-0.07	-0.01	-0.20	-0.35	0.18	0.00
13	6	-0.01	0.07	-0.19	-0.07	-0.01	-0.11	0.19	0.15	-0.01
14	1	0.00	0.37	0.02	-0.25	-0.06	-0.14	-0.04	0.16	0.00
15	6	0.00	-0.15	-0.14	0.07	0.02	-0.12	0.15	0.16	-0.01
16	1	0.00	-0.33	0.18	0.18	0.05	-0.18	-0.16	0.18	0.00
17	1	-0.01	0.15	-0.36	-0.12	-0.02	-0.08	0.34	0.15	-0.01
18	1	-0.01	-0.29	-0.26	0.15	0.04	-0.10	0.27	0.16	-0.01
		4			5			6		
		A			A			A		

Frequencies --	35.3839			46.8481			61.4657		
Red. masses --	11.1534			14.2306			10.8401		
Frc consts --	0.0082			0.0184			0.0241		
IR Inten --	6.3795			4.8190			1.9977		
Atom AN	X	Y	Z	X	Y	Z	X	Y	Z
1 13	0.04	0.00	0.00	0.15	-0.04	-0.04	0.20	0.01	0.00
2 13	-0.01	0.00	0.18	0.09	0.28	-0.01	0.18	0.01	-0.04
3 13	-0.01	-0.01	0.19	-0.12	0.28	0.01	0.18	0.01	-0.04
4 13	0.05	0.01	0.01	-0.17	-0.04	0.04	0.19	0.00	0.01
5 3	-0.02	0.01	-0.18	-0.01	-0.35	0.00	0.22	0.00	0.07
6 3	-0.13	-0.01	0.03	-0.01	0.06	0.00	0.23	0.01	0.01
7 3	0.12	0.01	0.14	-0.02	0.30	0.00	0.17	0.01	-0.03
8 19	-0.02	-0.01	-0.40	0.01	-0.36	0.00	-0.21	-0.03	0.01
9 6	0.03	0.00	0.09	-0.16	0.02	0.01	-0.27	0.01	0.01
10 6	0.21	0.00	0.08	0.00	0.02	0.00	-0.26	0.01	0.01
11 6	-0.21	0.01	0.09	-0.07	0.02	0.00	-0.26	0.01	0.01
12 1	0.07	0.00	0.10	-0.33	0.03	0.01	-0.30	0.01	0.01
13 6	0.09	0.00	0.08	0.19	0.01	-0.01	-0.24	0.01	0.01
14 1	0.43	0.00	0.08	-0.01	0.03	0.00	-0.27	0.01	0.01
15 6	-0.18	0.01	0.08	0.15	0.01	0.00	-0.24	0.01	0.01
16 1	-0.39	0.01	0.10	-0.16	0.02	0.01	-0.28	0.01	0.01
17 1	0.17	0.00	0.08	0.35	0.01	-0.01	-0.23	0.01	0.01
18 1	-0.33	0.01	0.09	0.26	0.01	-0.01	-0.23	0.01	0.01

	7			8			9		
	A			A			A		
Frequencies --	104.5530			114.3161			116.0883		
Red. masses --	9.8258			14.3489			8.9904		
Frc consts --	0.0633			0.1105			0.0714		
IR Inten --	0.2026			0.3342			4.4356		
Atom AN	X	Y	Z	X	Y	Z	X	Y	Z
1 13	-0.13	0.00	0.08	-0.05	-0.14	0.28	-0.03	0.02	-0.21
2 13	0.14	0.14	-0.08	-0.01	-0.01	-0.26	-0.06	-0.01	0.09
3 13	-0.14	0.14	0.08	0.01	-0.01	0.27	-0.06	0.01	0.07
4 13	0.13	0.00	-0.08	0.05	-0.15	-0.31	-0.03	-0.01	-0.18
5 3	0.00	0.27	0.00	0.01	0.31	0.06	0.23	0.00	0.87
6 3	0.01	-0.76	0.00	0.00	0.20	0.00	0.06	-0.01	-0.01
7 3	0.01	-0.45	0.00	0.01	0.70	0.00	0.27	-0.03	0.08
8 19	0.00	-0.02	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	-0.01
9 6	-0.01	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.01	0.00	0.00
10 6	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.02	0.00	0.00
11 6	-0.01	-0.01	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
12 1	-0.02	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.01	0.00	0.00
13 6	0.01	-0.01	0.00	0.00	0.00	0.00	0.01	0.00	0.00
14 1	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.03	0.00	0.00

15	6	0.01	-0.01	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
16	1	-0.01	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	-0.01	0.00	0.00
17	1	0.02	-0.01	0.00	0.00	0.00	0.00	0.02	0.00	0.00
18	1	0.02	-0.01	0.00	0.00	0.00	0.00	-0.01	0.00	0.00

	10	11	12
	A	A	A
Frequencies --	143.8336	154.6323	157.5884
Red. masses --	12.2893	9.2300	4.3546
Frc consts --	0.1498	0.1300	0.0637
IR Inten --	0.1431	0.0193	1.5096

Atom	AN	X	Y	Z	X	Y	Z	X	Y	Z
1	13	0.12	0.18	0.18	0.11	0.14	0.08	-0.01	-0.01	-0.01
2	13	0.06	-0.13	0.17	0.15	-0.09	-0.15	-0.02	0.01	0.01
3	13	-0.06	-0.13	-0.17	-0.15	-0.09	0.15	0.01	0.01	-0.02
4	13	-0.13	0.18	-0.19	-0.11	0.14	-0.08	0.01	-0.01	0.01
5	3	0.00	-0.20	0.01	0.00	-0.19	0.00	0.00	0.02	-0.01
6	3	0.01	-0.64	0.00	-0.01	0.33	0.00	0.00	-0.03	0.00
7	3	-0.01	0.53	0.00	0.01	-0.44	0.00	0.00	0.04	0.00
8	19	0.00	0.00	0.00	0.00	0.08	0.00	0.00	0.03	0.13
9	6	-0.02	0.00	0.00	-0.19	-0.05	0.00	0.00	-0.02	-0.08
10	6	0.00	-0.01	0.00	-0.02	-0.06	0.00	0.27	-0.03	-0.08
11	6	-0.01	0.00	0.00	-0.10	-0.05	0.00	-0.27	-0.01	-0.07
12	1	-0.04	0.00	0.00	-0.36	-0.04	0.00	-0.01	-0.02	-0.07
13	6	0.02	-0.01	0.00	0.18	-0.06	0.00	0.17	-0.02	-0.08
14	1	0.00	-0.01	0.00	-0.03	-0.05	0.00	0.51	-0.04	-0.08
15	6	0.02	-0.01	0.00	0.13	-0.06	0.00	-0.17	-0.01	-0.07
16	1	-0.02	0.00	0.00	-0.19	-0.04	0.00	-0.51	0.01	-0.06
17	1	0.04	-0.01	0.00	0.34	-0.06	-0.01	0.32	-0.03	-0.08
18	1	0.03	0.00	0.00	0.24	-0.06	-0.01	-0.31	-0.01	-0.06

	13	14	15
	A	A	A
Frequencies --	157.7447	195.8435	207.3791
Red. masses --	5.1122	13.4060	13.7708
Frc consts --	0.0749	0.3029	0.3489
IR Inten --	2.1224	75.8039	7.1360

Atom	AN	X	Y	Z	X	Y	Z	X	Y	Z
1	13	-0.05	-0.06	-0.04	-0.07	0.00	-0.02	0.00	-0.05	-0.13
2	13	-0.05	0.03	0.06	0.05	0.00	0.02	0.36	-0.09	0.12
3	13	0.05	0.03	-0.05	0.06	0.00	0.02	-0.36	-0.10	-0.11
4	13	0.05	-0.06	0.04	-0.07	0.00	-0.02	0.01	-0.05	0.13
5	3	0.00	0.09	0.00	-0.08	-0.01	0.00	-0.01	0.71	0.00
6	3	0.00	-0.09	0.00	-0.01	0.00	-0.05	-0.02	0.26	0.00
7	3	0.00	0.16	0.00	-0.02	-0.01	0.06	-0.02	0.29	-0.01
8	19	0.00	0.13	-0.04	0.47	-0.02	-0.01	0.01	-0.03	0.00

9	6	-0.28	-0.06	0.03	-0.25	0.01	0.01	0.01	0.00	0.00
10	6	-0.11	-0.07	0.02	-0.25	0.01	0.01	0.00	0.00	0.00
11	6	-0.07	-0.07	0.02	-0.25	0.01	0.01	0.00	0.00	0.00
12	1	-0.52	-0.05	0.03	-0.30	0.01	0.01	0.01	0.00	0.00
13	6	0.21	-0.08	0.02	-0.25	0.01	0.01	-0.01	0.00	0.00
14	1	-0.20	-0.06	0.02	-0.29	0.01	0.01	0.00	0.00	0.00
15	6	0.23	-0.08	0.02	-0.25	0.01	0.01	-0.01	0.00	0.00
16	1	-0.12	-0.06	0.02	-0.30	0.01	0.01	0.00	0.00	0.00
17	1	0.39	-0.08	0.02	-0.29	0.01	0.01	-0.02	0.00	0.00
18	1	0.44	-0.08	0.01	-0.29	0.01	0.01	-0.02	0.00	0.00

	16	17	18
	A	A	A
Frequencies --	218.4352	225.7909	234.7119
Red. masses --	8.1296	11.4437	10.2910
Frc consts --	0.2285	0.3437	0.3340
IR Inten --	1.1733	28.7724	11.5627

Atom	AN	X	Y	Z	X	Y	Z	X	Y	Z
1	13	-0.13	0.07	0.02	0.14	-0.01	0.15	0.14	-0.01	-0.04
2	13	0.01	-0.05	-0.04	-0.21	0.02	-0.14	-0.24	0.01	0.03
3	13	-0.01	0.05	-0.04	-0.21	-0.02	-0.14	-0.24	-0.01	0.03
4	13	-0.14	-0.07	0.02	0.15	0.01	0.15	0.14	0.02	-0.05
5	3	-0.18	0.01	-0.21	0.23	0.00	0.08	0.19	0.00	-0.15
6	3	0.53	0.01	0.16	-0.53	-0.01	0.06	0.68	0.01	0.44
7	3	0.71	0.02	0.22	0.65	0.01	-0.11	-0.31	0.00	-0.14
8	19	-0.02	0.00	0.00	0.07	0.00	-0.01	0.06	0.00	0.00
9	6	0.01	0.00	0.00	-0.03	0.00	0.00	-0.02	0.00	0.00
10	6	0.01	0.00	0.00	-0.03	0.00	0.00	-0.02	0.00	0.00
11	6	0.01	0.00	0.00	-0.02	0.00	0.00	-0.02	0.00	0.00
12	1	0.01	0.00	0.00	-0.03	0.00	0.00	-0.03	0.00	0.00
13	6	0.01	0.00	0.00	-0.03	0.00	0.00	-0.02	0.00	0.00
14	1	0.01	0.00	0.00	-0.03	0.00	0.00	-0.03	0.00	0.00
15	6	0.01	0.00	0.00	-0.02	0.00	0.00	-0.02	0.00	0.00
16	1	0.01	0.00	0.00	-0.02	0.00	0.00	-0.02	0.00	0.00
17	1	0.01	0.00	0.00	-0.03	0.00	0.00	-0.02	0.00	0.00
18	1	0.01	0.00	0.00	-0.02	0.00	0.00	-0.02	0.00	0.00

	19	20	21
	A	A	A
Frequencies --	246.3725	289.6179	326.8512
Red. masses --	13.0012	17.8941	11.6177
Frc consts --	0.4650	0.8843	0.7313
IR Inten --	6.0102	6.7884	5.4693

Atom	AN	X	Y	Z	X	Y	Z	X	Y	Z
1	13	0.36	-0.04	-0.01	0.09	0.51	-0.02	-0.04	-0.04	-0.07
2	13	-0.15	0.00	-0.04	0.00	-0.08	0.01	0.08	0.32	-0.03

3	13	0.14	0.01	0.04	0.00	0.08	0.01	0.09	-0.31	-0.03
4	13	-0.35	-0.05	0.02	0.10	-0.50	-0.01	-0.04	0.03	-0.07
5	3	-0.01	0.77	0.00	-0.44	-0.01	0.12	-0.17	0.00	0.01
6	3	0.00	-0.23	0.00	-0.22	0.00	0.27	-0.22	0.00	0.83
7	3	0.00	-0.24	0.00	-0.16	0.00	-0.31	0.09	0.00	-0.05
8	19	0.00	0.00	0.00	0.01	0.00	0.00	-0.01	0.00	0.00
9	6	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
10	6	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
11	6	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
12	1	0.00	0.00	0.00	-0.01	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
13	6	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
14	1	0.00	0.00	0.00	-0.01	0.00	0.00	0.01	0.00	0.00
15	6	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
16	1	0.00	0.00	0.00	-0.01	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
17	1	0.00	0.00	0.00	-0.01	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
18	1	0.00	0.00	0.00	-0.01	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00

	22	23	24
	A	A	A
Frequencies --	332.8776	348.0658	367.2140
Red. masses --	10.2409	8.9642	8.4655
Frc consts --	0.6686	0.6399	0.6726
IR Inten --	4.3335	15.6230	3.1922

Atom	AN	X	Y	Z	X	Y	Z	X	Y	Z
1	13	-0.05	0.08	0.06	-0.01	0.15	0.00	-0.14	0.05	0.00
2	13	-0.03	0.24	0.09	-0.03	0.15	-0.06	0.06	-0.10	0.04
3	13	-0.02	-0.24	0.10	-0.03	-0.15	-0.06	0.06	0.10	0.03
4	13	-0.05	-0.08	0.06	0.00	-0.15	0.00	-0.14	-0.05	0.00
5	3	0.12	0.00	-0.03	0.47	0.01	-0.12	0.80	0.01	-0.22
6	3	0.28	0.00	-0.58	0.00	0.00	-0.21	-0.16	0.00	0.31
7	3	0.16	0.00	-0.62	-0.19	0.00	0.77	0.01	0.00	-0.34
8	19	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
9	6	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
10	6	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
11	6	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
12	1	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
13	6	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
14	1	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
15	6	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
16	1	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
17	1	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
18	1	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00

	25	26	27
	A	A	A
Frequencies --	628.3718	628.7951	681.9511

Red. masses --		4.7366			4.7234			1.2767		
Frc consts --		1.1019			1.1003			0.3498		
IR Inten --		0.0063			0.0009			2.0030		
Atom	AN	X	Y	Z	X	Y	Z	X	Y	Z
1	13	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
2	13	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
3	13	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
4	13	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
5	3	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
6	3	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
7	3	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
8	19	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
9	6	0.34	-0.02	0.00	-0.12	0.01	0.01	0.09	-0.01	0.00
10	6	-0.35	0.02	0.00	-0.10	0.00	0.00	0.08	0.00	0.00
11	6	-0.21	0.02	0.01	0.30	-0.01	-0.02	-0.02	0.00	0.00
12	1	0.49	-0.03	-0.01	-0.18	0.01	0.00	-0.56	0.04	0.01
13	6	0.23	0.00	0.00	0.29	0.00	-0.01	-0.04	0.00	0.00
14	1	-0.48	0.02	0.00	-0.14	0.01	0.00	-0.51	0.02	-0.01
15	6	-0.01	-0.01	0.00	-0.37	0.01	0.02	-0.10	0.00	0.00
16	1	-0.29	0.01	0.01	0.42	-0.02	-0.02	0.12	-0.01	0.00
17	1	0.32	0.00	0.00	0.41	-0.01	0.00	0.22	0.00	0.00
18	1	-0.02	0.00	0.00	-0.52	0.01	0.02	0.58	-0.01	-0.03

			28			29			30	
			A			A			A	
Frequencies --		682.7627			706.9539			816.2515		
Red. masses --		1.2763			1.0961			1.1683		
Frc consts --		0.3505			0.3228			0.4586		
IR Inten --		0.1139			433.8135			0.0068		
Atom	AN	X	Y	Z	X	Y	Z	X	Y	Z
1	13	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
2	13	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
3	13	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
4	13	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
5	3	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
6	3	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
7	3	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
8	19	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
9	6	-0.05	0.00	0.00	0.04	0.00	0.00	-0.07	0.02	0.00
10	6	0.07	0.00	0.00	0.04	0.00	0.00	0.07	-0.01	0.02
11	6	-0.09	0.00	0.00	0.04	0.00	0.00	0.04	-0.01	-0.01
12	1	0.33	-0.02	0.00	-0.41	0.03	0.01	0.58	-0.02	-0.03
13	6	0.09	0.00	0.00	0.04	0.00	0.00	-0.05	-0.01	-0.01
14	1	-0.41	0.02	0.00	-0.42	0.02	-0.01	-0.60	0.01	0.01
15	6	-0.01	0.00	0.00	0.05	0.00	0.00	0.01	0.00	0.00

16	1	0.60	-0.03	-0.03	-0.45	0.03	0.02	-0.34	-0.01	0.02
17	1	-0.57	0.00	0.01	-0.46	0.00	0.00	0.41	-0.01	-0.03
18	1	0.05	0.00	0.00	-0.48	0.01	0.02	-0.04	0.03	0.02

	31	32	33
	A	A	A
Frequencies --	819.2339	854.9139	855.2713
Red. masses --	1.1700	4.2955	4.3016
Frc consts --	0.4626	1.8497	1.8539
IR Inten --	0.0148	0.0002	0.0002

Atom	AN	X	Y	Z	X	Y	Z	X	Y	Z
1	13	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
2	13	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
3	13	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
4	13	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
5	3	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
6	3	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
7	3	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
8	19	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
9	6	-0.03	0.01	0.00	-0.01	-0.07	-0.09	0.03	0.31	-0.09
10	6	-0.02	0.00	0.00	0.01	0.10	-0.22	-0.01	0.05	0.24
11	6	0.06	-0.01	-0.02	-0.02	-0.16	-0.08	-0.03	-0.10	-0.27
12	1	0.23	0.00	0.03	0.03	0.04	0.39	-0.12	0.34	-0.01
13	6	0.06	0.01	0.01	-0.01	0.29	0.15	0.00	-0.09	0.07
14	1	0.15	-0.04	-0.01	-0.11	-0.26	-0.25	0.09	-0.30	0.21
15	6	-0.07	-0.01	0.02	0.02	-0.16	0.25	0.01	-0.17	0.05
16	1	-0.53	0.03	0.00	0.06	0.22	-0.31	0.11	-0.31	-0.16
17	1	-0.48	0.03	-0.01	0.15	0.32	0.07	-0.02	0.10	-0.37
18	1	0.63	-0.02	-0.01	-0.13	-0.32	0.11	-0.05	0.17	0.34

	34	35	36
	A	A	A
Frequencies --	1019.8966	1020.2737	1066.5063
Red. masses --	1.4421	1.4424	1.2469
Frc consts --	0.8838	0.8847	0.8356
IR Inten --	25.8770	26.0268	0.0028

Atom	AN	X	Y	Z	X	Y	Z	X	Y	Z
1	13	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
2	13	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
3	13	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
4	13	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
5	3	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
6	3	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
7	3	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
8	19	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
9	6	0.00	-0.10	0.03	0.00	0.03	0.06	0.00	0.01	0.08

10	6	0.00	0.06	0.02	0.00	0.02	-0.10	0.00	-0.08	0.01
11	6	0.00	0.03	-0.07	0.00	-0.07	-0.07	0.00	0.06	-0.01
12	1	0.00	-0.09	0.10	0.02	0.15	0.59	0.01	0.12	0.59
13	6	0.00	-0.07	-0.06	0.00	-0.07	0.03	0.00	-0.01	-0.05
14	1	0.02	0.60	0.08	0.00	0.11	-0.10	-0.03	-0.57	-0.04
15	6	0.00	-0.02	0.09	0.00	0.08	-0.03	0.00	0.01	-0.03
16	1	0.01	0.44	-0.32	-0.01	-0.28	0.05	0.02	0.37	-0.19
17	1	0.00	0.02	-0.30	0.00	-0.26	0.47	0.01	0.10	-0.31
18	1	0.02	0.26	0.34	0.02	0.38	0.23	-0.02	-0.02	-0.06

	37	38	39
	A	A	A
Frequencies --	1067.0384	1141.8053	1282.4228
Red. masses --	1.2478	5.8865	1.2808
Frc consts --	0.8370	4.5216	1.2411
IR Inten --	0.0014	2.2170	0.0001

Atom	AN	X	Y	Z	X	Y	Z	X	Y	Z
1	13	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
2	13	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
3	13	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
4	13	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
5	3	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
6	3	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
7	3	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
8	19	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
9	6	0.00	0.04	0.01	-0.01	-0.29	0.07	0.00	0.02	0.07
10	6	0.00	0.03	0.03	0.01	-0.03	0.30	0.00	0.07	0.01
11	6	0.00	0.05	-0.05	-0.01	-0.15	-0.26	0.00	-0.06	0.04
12	1	0.02	0.06	0.13	-0.03	-0.32	0.08	-0.01	-0.10	-0.43
13	6	0.00	-0.04	0.06	0.01	0.27	0.12	0.00	0.03	-0.06
14	1	-0.01	0.24	0.05	-0.01	-0.03	0.33	-0.02	-0.44	-0.04
15	6	0.00	-0.07	-0.06	0.00	0.20	-0.22	0.00	-0.05	-0.05
16	1	0.00	0.39	-0.26	-0.03	-0.17	-0.29	0.01	0.38	-0.23
17	1	0.01	-0.23	0.49	0.00	0.31	0.13	0.00	-0.18	0.41
18	1	-0.02	-0.47	-0.41	-0.02	0.22	-0.25	0.02	0.33	0.29

	40	41	42
	A	A	A
Frequencies --	1378.1309	1378.9394	1464.5714
Red. masses --	4.8963	4.9322	2.5602
Frc consts --	5.4790	5.5256	3.2355
IR Inten --	0.0055	0.0028	4.9073

Atom	AN	X	Y	Z	X	Y	Z	X	Y	Z
1	13	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
2	13	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
3	13	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00

4	13	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
5	3	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
6	3	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
7	3	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
8	19	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
9	6	-0.01	-0.08	0.20	0.02	0.14	0.28	-0.01	-0.12	0.06
10	6	0.01	0.05	-0.14	-0.01	-0.34	-0.05	0.01	0.19	0.04
11	6	0.01	0.30	-0.11	-0.02	0.05	-0.19	0.00	0.12	-0.14
12	1	0.01	-0.18	-0.21	-0.02	-0.02	-0.43	0.00	-0.18	-0.06
13	6	0.00	0.01	0.26	-0.01	0.19	-0.20	0.00	-0.08	-0.13
14	1	-0.03	-0.03	-0.15	0.02	0.48	0.03	-0.02	-0.55	-0.03
15	6	-0.01	-0.27	-0.20	0.02	-0.04	0.15	0.01	0.04	0.16
16	1	-0.02	-0.35	0.28	0.01	-0.23	-0.03	-0.01	-0.47	0.19
17	1	0.02	0.23	-0.25	0.02	-0.05	0.37	-0.01	-0.23	0.17
18	1	0.01	0.33	0.34	-0.03	-0.17	0.04	-0.02	-0.38	-0.18

	43	44	45
	A	A	A
Frequencies --	1464.7580	3148.5180	3150.0621
Red. masses --	2.5589	1.0844	1.0845
Frc consts --	3.2347	6.3336	6.3402
IR Inten --	4.9624	0.1338	0.1157

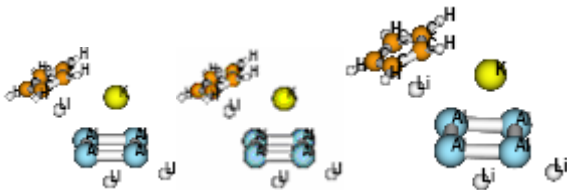
Atom	AN	X	Y	Z	X	Y	Z	X	Y	Z
1	13	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
2	13	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
3	13	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
4	13	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
5	3	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
6	3	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
7	3	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
8	19	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
9	6	0.01	0.06	0.18	0.00	-0.05	0.01	0.00	0.02	0.00
10	6	0.00	0.04	-0.13	0.00	0.01	-0.05	0.00	0.00	-0.01
11	6	-0.01	-0.14	-0.05	0.00	0.01	0.02	0.00	-0.02	-0.04
12	1	-0.02	-0.09	-0.54	0.04	0.57	-0.13	-0.02	-0.25	0.05
13	6	0.00	-0.12	0.14	0.00	0.03	0.01	0.00	0.04	0.02
14	1	-0.01	-0.06	-0.17	-0.01	-0.06	0.63	0.00	-0.01	0.17
15	6	0.00	0.17	0.02	0.00	0.00	0.00	0.00	-0.03	0.04
16	1	0.00	0.15	-0.26	-0.02	-0.16	-0.27	0.04	0.27	0.47
17	1	-0.01	0.14	-0.49	-0.01	-0.35	-0.15	-0.01	-0.45	-0.19
18	1	-0.01	-0.22	-0.35	0.00	0.03	-0.03	-0.01	0.40	-0.46

	46	47	48
	A	A	A
Frequencies --	3170.3530	3170.7260	3188.9997
Red. masses --	1.0951	1.0951	1.1041

Frc consts	--	6.4851			6.4866			6.6158		
IR Inten	--	66.3610			65.8893			5.5303		
Atom	AN	X	Y	Z	X	Y	Z	X	Y	Z
1	13	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
2	13	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
3	13	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
4	13	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
5	3	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
6	3	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
7	3	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
8	19	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
9	6	0.00	-0.02	0.00	0.00	-0.05	0.01	0.00	-0.04	0.01
10	6	0.00	0.00	0.06	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.04
11	6	0.00	0.02	0.03	0.00	-0.02	-0.03	0.00	-0.02	-0.04
12	1	0.02	0.26	-0.05	0.04	0.56	-0.13	0.03	0.41	-0.09
13	6	0.00	0.02	0.00	0.00	-0.05	-0.02	0.00	0.04	0.02
14	1	0.01	0.06	-0.62	0.00	-0.01	0.02	0.01	0.04	-0.41
15	6	0.00	-0.03	0.03	0.00	-0.02	0.02	0.00	0.03	-0.03
16	1	-0.03	-0.24	-0.39	0.03	0.21	0.37	0.03	0.23	0.39
17	1	0.00	-0.19	-0.08	0.01	0.55	0.24	-0.01	-0.42	-0.18
18	1	-0.01	0.35	-0.39	-0.01	0.22	-0.26	0.01	-0.32	0.36

$CpKAl_4Li_3^- \rightarrow CpK + Al_4Li_3^-$ **-22.3144261**

$CpKAl_4Li_3^- \rightarrow Cp^- + Al_4Li_3K$ **-47.88732073**



Charge = -1 Multiplicity = 1

Al,0,2.7623995434,-1.3887419811,0.8603122136
Al,0,1.1292249773,0.6268621975,1.7005054877
Al,0,1.1997979036,1.6812947625,-0.5452723613
Al,0,2.835162606,-0.2934106795,-1.4744918894
Li,0,-1.5698159923,1.0354146333,0.4367031543
Li,0,5.0812043708,-1.2120913296,-0.4101799444
Li,0,3.6296326879,1.3114758403,0.728052159
K,0,-0.2646138413,-1.6772448006,-0.7945450131
C,0,-3.2176935277,-0.5837231237,0.4101995115
C,0,-3.5227249521,0.4251041572,1.3561659104
C,0,-3.1772113229,0.0181418728,-0.8744208807
H,0,-3.0967367167,-1.6381864366,0.6380689377
C,0,-3.6750449396,1.6473007995,0.657134846

H,0,-3.6189655789,0.2831969548,2.4252809627
C,0,-3.4573726198,1.3977254469,-0.7197942564
H,0,-3.0195123211,-0.4850090622,-1.8233209463
H,0,-3.9104690852,2.6078223093,1.09964331
H,0,-3.4950377333,2.1300792074,-1.5164487645

State=1-A\HF=-1786.010369

		1			2			3		
		A			A			A		
Frequencies --		22.8886			30.2831			49.9593		
Red. masses --		4.0749			13.2785			9.8203		
Frc consts --		0.0013			0.0072			0.0144		
IR Inten --		0.2667			0.9212			0.3448		
Atom	AN	X	Y	Z	X	Y	Z	X	Y	Z
1	13	-0.01	0.06	-0.04	0.16	-0.05	0.13	0.17	0.02	0.01
2	13	0.00	0.06	0.05	0.06	-0.10	-0.12	-0.06	-0.21	0.00
3	13	0.00	-0.06	0.05	-0.06	0.10	-0.12	-0.06	-0.21	0.00
4	13	0.01	-0.06	-0.04	-0.16	0.05	0.13	0.17	0.02	-0.01
5	3	0.00	0.00	-0.02	0.00	0.00	-0.03	-0.07	-0.08	0.00
6	3	0.00	0.00	-0.05	0.00	0.00	0.42	0.20	0.52	0.00
7	3	0.00	0.00	0.08	0.00	0.00	-0.01	-0.17	0.12	0.00
8	19	0.00	0.00	-0.05	0.00	0.00	-0.37	0.09	-0.06	0.00
9	6	0.03	-0.12	0.18	-0.07	-0.04	0.19	-0.22	0.10	0.00
10	6	0.05	-0.19	-0.05	-0.11	-0.06	0.17	-0.10	0.14	0.00
11	6	-0.03	0.12	0.18	0.07	0.04	0.19	-0.22	0.10	0.00
12	1	0.04	-0.23	0.32	-0.15	-0.08	0.21	-0.27	0.07	0.00
13	6	0.00	0.00	-0.19	0.00	0.00	0.16	-0.03	0.17	0.00
14	1	0.09	-0.36	-0.11	-0.22	-0.12	0.16	-0.08	0.15	0.00
15	6	-0.05	0.19	-0.05	0.11	0.06	0.17	-0.10	0.14	0.00
16	1	-0.03	0.23	0.32	0.15	0.08	0.21	-0.27	0.07	0.00
17	1	0.00	0.00	-0.37	0.00	0.00	0.14	0.06	0.21	0.00
18	1	-0.09	0.36	-0.11	0.22	0.12	0.16	-0.07	0.16	0.00

		4			5			6		
		A			A			A		
Frequencies --		68.7461			78.1109			88.3710		
Red. masses --		10.5059			14.3515			6.4868		
Frc consts --		0.0293			0.0516			0.0298		
IR Inten --		0.6026			6.6348			0.1196		
Atom	AN	X	Y	Z	X	Y	Z	X	Y	Z
1	13	0.09	0.13	-0.05	-0.16	0.09	-0.01	0.05	0.07	-0.02
2	13	0.17	0.16	-0.15	-0.14	0.05	0.00	-0.11	-0.09	0.14
3	13	-0.17	-0.16	-0.15	-0.14	0.05	0.00	0.11	0.09	0.14
4	13	-0.09	-0.13	-0.05	-0.16	0.09	0.01	-0.05	-0.07	-0.02
5	3	0.00	0.00	-0.28	0.17	-0.11	0.00	0.00	0.00	-0.35

6	3	0.00	0.00	0.14	-0.20	-0.16	0.00	0.00	-0.01	0.07
7	3	0.00	0.00	0.37	-0.12	0.05	0.00	0.00	0.00	-0.27
8	19	0.00	0.00	0.18	0.21	-0.38	0.00	0.00	0.00	0.02
9	6	-0.12	-0.02	0.00	0.04	0.09	0.00	-0.14	-0.04	-0.07
10	6	-0.19	-0.03	0.05	0.17	0.15	0.00	-0.23	-0.06	-0.04
11	6	0.12	0.02	0.00	0.04	0.09	0.00	0.14	0.04	-0.07
12	1	-0.21	-0.03	-0.03	-0.03	0.07	0.00	-0.25	-0.07	-0.08
13	6	0.00	0.00	0.09	0.25	0.18	0.00	0.00	0.00	-0.02
14	1	-0.37	-0.05	0.07	0.21	0.17	0.00	-0.43	-0.12	-0.04
15	6	0.19	0.03	0.05	0.17	0.15	0.00	0.22	0.06	-0.04
16	1	0.21	0.03	-0.03	-0.03	0.07	0.00	0.24	0.07	-0.08
17	1	0.00	0.00	0.14	0.38	0.23	0.00	0.00	0.00	0.00
18	1	0.37	0.05	0.07	0.21	0.17	0.00	0.42	0.12	-0.04

	7	8	9
	A	A	A
Frequencies --	90.6674	95.1606	125.4123
Red. masses --	8.9296	11.4089	7.2690
Frc consts --	0.0432	0.0609	0.0674
IR Inten --	10.2197	1.5128	6.5068

Atom	AN	X	Y	Z	X	Y	Z	X	Y	Z
1	13	0.06	0.05	-0.01	-0.25	-0.13	0.20	0.02	0.01	0.01
2	13	0.07	0.07	0.00	0.04	0.16	-0.01	0.13	0.14	0.00
3	13	0.07	0.07	-0.01	-0.04	-0.16	-0.01	0.13	0.14	0.00
4	13	0.06	0.05	0.01	0.25	0.13	0.20	0.02	0.01	-0.01
5	3	-0.18	-0.05	0.01	0.00	0.00	-0.27	0.07	-0.19	0.00
6	3	-0.05	-0.56	0.00	0.00	0.00	-0.39	0.09	0.25	0.00
7	3	0.17	-0.08	0.01	0.00	0.00	-0.06	0.14	0.03	0.00
8	19	0.22	-0.03	0.00	0.00	0.00	-0.10	-0.15	-0.14	0.00
9	6	-0.22	0.00	0.00	-0.11	-0.04	-0.04	-0.24	-0.13	0.00
10	6	-0.23	0.00	0.00	-0.18	-0.06	-0.02	0.01	-0.03	0.00
11	6	-0.23	0.00	0.00	0.11	0.04	-0.04	-0.24	-0.13	0.00
12	1	-0.21	0.00	0.01	-0.21	-0.07	-0.04	-0.42	-0.20	0.01
13	6	-0.23	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.15	0.03	0.00
14	1	-0.23	0.00	0.00	-0.35	-0.11	-0.01	0.06	-0.01	0.00
15	6	-0.24	0.00	0.00	0.18	0.06	-0.02	0.01	-0.03	0.00
16	1	-0.22	0.00	0.00	0.21	0.07	-0.04	-0.42	-0.20	-0.01
17	1	-0.24	-0.01	0.00	0.00	0.00	0.01	0.35	0.12	0.00
18	1	-0.25	-0.01	0.00	0.35	0.11	-0.01	0.06	-0.01	0.00

	10	11	12
	A	A	A
Frequencies --	129.0906	135.5754	143.7814
Red. masses --	6.7883	12.5683	16.4123
Frc consts --	0.0667	0.1361	0.1999
IR Inten --	0.6282	0.7158	2.0611

Atom	AN	X	Y	Z	X	Y	Z	X	Y	Z
1	13	0.06	0.12	0.00	0.07	0.17	0.16	-0.13	0.29	0.15
2	13	-0.08	-0.09	0.00	-0.17	0.21	-0.13	-0.19	-0.22	-0.17
3	13	-0.08	-0.09	0.00	0.17	-0.21	-0.13	0.19	0.21	-0.17
4	13	0.06	0.12	0.01	-0.07	-0.17	0.16	0.15	-0.27	0.15
5	3	0.10	-0.20	0.00	0.00	0.00	0.10	0.00	0.01	0.01
6	3	-0.07	-0.46	0.00	0.00	0.00	0.13	0.00	-0.02	-0.29
7	3	-0.05	0.02	0.00	0.00	0.00	-0.75	0.00	0.01	0.66
8	19	-0.07	0.14	0.00	0.00	0.00	0.03	-0.02	-0.02	-0.02
9	6	-0.12	-0.11	0.00	0.05	0.02	0.01	0.01	0.01	-0.01
10	6	0.12	-0.01	0.00	0.08	0.03	0.01	-0.01	0.00	-0.01
11	6	-0.12	-0.11	0.00	-0.05	-0.02	0.01	0.01	0.01	-0.01
12	1	-0.27	-0.16	0.01	0.10	0.04	0.01	0.02	0.01	-0.01
13	6	0.26	0.05	0.00	0.00	0.00	0.01	-0.01	0.00	-0.01
14	1	0.18	0.01	0.00	0.17	0.06	0.01	-0.01	0.00	-0.01
15	6	0.12	-0.01	0.00	-0.08	-0.03	0.01	0.00	0.00	-0.01
16	1	-0.27	-0.16	-0.01	-0.10	-0.04	0.01	0.02	0.01	-0.01
17	1	0.46	0.13	0.00	0.00	0.00	0.00	-0.03	-0.01	-0.01
18	1	0.18	0.01	0.00	-0.17	-0.06	0.01	-0.01	0.00	-0.01

	13	14	15
	A	A	A
Frequencies --	143.9474	205.5225	222.8556
Red. masses --	11.7375	12.1838	18.6865
Frc consts --	0.1433	0.3032	0.5468
IR Inten --	12.9430	4.3827	7.6371

Atom	AN	X	Y	Z	X	Y	Z	X	Y	Z
1	13	-0.17	-0.17	0.00	0.07	0.16	0.08	0.27	-0.21	0.09
2	13	-0.03	0.04	-0.01	0.28	-0.13	0.05	-0.29	0.28	-0.05
3	13	-0.01	0.07	-0.01	-0.28	0.13	0.05	-0.29	0.28	0.05
4	13	-0.15	-0.20	0.01	-0.07	-0.16	0.08	0.27	-0.22	-0.09
5	3	0.05	-0.21	0.00	0.00	0.00	-0.05	-0.04	-0.06	0.00
6	3	-0.04	0.32	-0.01	0.00	0.00	-0.70	0.40	-0.23	0.00
7	3	-0.03	-0.13	0.03	0.00	0.00	-0.46	-0.40	-0.15	0.00
8	19	0.27	0.24	0.00	0.00	0.00	0.00	-0.03	-0.03	0.00
9	6	-0.17	-0.10	0.00	0.03	0.01	0.02	0.03	0.02	0.00
10	6	0.06	-0.01	0.00	0.05	0.02	0.02	0.03	0.01	0.00
11	6	-0.17	-0.10	0.00	-0.03	-0.01	0.02	0.03	0.02	0.00
12	1	-0.31	-0.16	0.01	0.05	0.02	0.02	0.05	0.02	0.00
13	6	0.20	0.05	0.00	0.00	0.00	0.02	0.03	0.01	0.00
14	1	0.11	0.02	0.00	0.09	0.04	0.02	0.04	0.02	0.00
15	6	0.06	-0.01	0.00	-0.05	-0.02	0.02	0.03	0.01	0.00
16	1	-0.31	-0.16	-0.01	-0.05	-0.02	0.02	0.05	0.02	0.00
17	1	0.39	0.13	0.00	0.00	0.00	0.02	0.04	0.01	0.00
18	1	0.11	0.02	0.00	-0.09	-0.04	0.02	0.04	0.02	0.00

		16			17			18		
		A			A			A		
Frequencies --		244.4565			246.7766			283.2116		
Red. masses --		12.3853			7.8380			19.0756		
Frc consts --		0.4361			0.2812			0.9015		
IR Inten --		7.3733			4.6245			5.9925		
Atom	AN	X	Y	Z	X	Y	Z	X	Y	Z
1	13	-0.30	0.14	-0.06	-0.02	-0.07	0.05	-0.11	0.05	0.53
2	13	0.15	-0.08	0.00	0.11	0.00	-0.02	-0.02	-0.06	-0.08
3	13	-0.14	0.07	0.00	0.11	0.00	0.02	-0.02	-0.06	0.08
4	13	0.29	-0.14	-0.06	-0.03	-0.07	-0.05	-0.11	0.05	-0.53
5	3	0.00	0.00	-0.07	0.01	0.04	0.00	0.02	0.04	0.00
6	3	0.00	0.00	0.77	-0.04	-0.19	-0.01	0.43	-0.08	0.00
7	3	-0.01	0.01	-0.34	-0.60	0.75	0.00	0.44	0.10	0.00
8	19	0.00	0.00	-0.01	0.01	0.00	0.00	0.02	0.01	0.00
9	6	0.02	0.01	0.01	-0.02	-0.01	0.00	-0.01	0.00	0.00
10	6	0.03	0.01	0.01	-0.01	-0.01	0.00	-0.01	0.00	0.00
11	6	-0.02	-0.01	0.01	-0.02	-0.01	0.00	-0.01	0.00	0.00
12	1	0.03	0.01	0.01	-0.03	-0.02	0.00	0.00	0.00	0.00
13	6	0.00	0.00	0.01	0.00	0.00	0.00	-0.01	0.00	0.00
14	1	0.05	0.02	0.01	-0.01	-0.01	0.00	-0.01	-0.01	0.00
15	6	-0.03	-0.01	0.01	-0.01	-0.01	0.00	-0.01	0.00	0.00
16	1	-0.04	-0.01	0.01	-0.03	-0.02	0.00	0.00	0.00	0.00
17	1	0.00	0.00	0.02	0.01	0.00	0.00	-0.01	-0.01	0.00
18	1	-0.06	-0.02	0.01	-0.01	-0.01	0.00	-0.01	0.00	0.00

		19			20			21		
		A			A			A		
Frequencies --		298.7143			310.1768			333.8116		
Red. masses --		6.1138			6.6508			8.4959		
Frc consts --		0.3214			0.3770			0.5578		
IR Inten --		0.0003			21.3092			14.8434		
Atom	AN	X	Y	Z	X	Y	Z	X	Y	Z
1	13	-0.01	0.02	0.00	0.01	0.00	-0.01	-0.02	-0.07	-0.11
2	13	0.03	-0.01	-0.01	-0.02	-0.01	-0.02	-0.10	0.00	0.10
3	13	-0.03	0.01	-0.01	-0.02	-0.01	0.02	-0.11	0.00	-0.10
4	13	0.01	-0.02	0.00	0.01	0.00	0.01	-0.02	-0.07	0.11
5	3	0.00	0.00	0.78	-0.03	0.89	0.00	-0.04	0.05	0.00
6	3	0.00	0.00	0.01	-0.01	0.00	0.00	0.34	-0.09	0.00
7	3	0.00	0.00	-0.06	-0.03	-0.06	0.00	0.63	0.64	0.00
8	19	0.00	0.00	0.01	0.03	-0.03	0.00	0.00	0.00	0.00
9	6	-0.12	-0.04	-0.08	-0.11	-0.11	0.01	0.00	-0.01	0.00
10	6	-0.16	-0.07	-0.07	0.05	-0.05	0.00	0.01	0.00	0.00
11	6	0.12	0.04	-0.08	-0.11	-0.11	-0.01	0.00	-0.01	0.00
12	1	-0.17	-0.06	-0.07	-0.19	-0.14	0.01	-0.01	-0.01	0.00

13	6	0.00	0.00	-0.08	0.11	-0.01	0.00	0.01	0.00	0.00
14	1	-0.27	-0.11	-0.07	0.03	-0.06	-0.01	0.01	0.00	0.00
15	6	0.16	0.07	-0.07	0.05	-0.05	0.00	0.01	0.00	0.00
16	1	0.17	0.06	-0.07	-0.19	-0.14	-0.01	-0.01	-0.01	0.00
17	1	0.00	0.00	-0.09	0.13	0.00	0.00	0.02	0.00	0.00
18	1	0.27	0.11	-0.07	0.03	-0.06	0.01	0.01	0.00	0.00

	22	23	24
	A	A	A
Frequencies --	346.6690	364.8170	463.2235
Red. masses --	19.6327	8.7600	5.8822
Frc consts --	1.3901	0.6869	0.7437
IR Inten --	9.1322	1.5824	140.7079

Atom	AN	X	Y	Z	X	Y	Z	X	Y	Z
1	13	0.09	-0.03	0.17	-0.10	0.06	-0.05	0.00	0.00	-0.01
2	13	0.00	0.02	0.53	0.05	-0.01	0.16	-0.02	0.00	0.01
3	13	0.00	0.02	-0.53	0.05	-0.01	-0.16	-0.02	0.00	-0.01
4	13	0.09	-0.03	-0.17	-0.10	0.06	0.05	0.00	0.00	0.01
5	3	-0.02	0.07	0.00	0.01	0.02	0.00	0.86	0.06	0.00
6	3	-0.59	0.09	0.00	0.83	-0.13	0.00	0.00	0.00	0.00
7	3	-0.06	-0.02	0.00	-0.37	-0.26	0.00	0.00	0.01	0.00
8	19	0.00	0.00	0.00	0.00	0.01	0.00	0.00	0.01	0.00
9	6	-0.01	-0.01	0.00	0.00	0.00	0.00	-0.03	0.01	0.00
10	6	0.01	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	-0.09	-0.01	0.01
11	6	-0.01	-0.01	0.00	0.00	0.00	0.00	-0.03	0.01	0.00
12	1	-0.01	-0.01	0.00	-0.01	0.00	0.00	-0.13	-0.03	0.00
13	6	0.01	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	-0.10	-0.03	0.00
14	1	0.01	0.00	0.00	-0.01	0.00	0.00	-0.22	-0.06	0.01
15	6	0.01	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	-0.09	-0.01	-0.01
16	1	-0.01	-0.01	0.00	-0.01	0.00	0.00	-0.13	-0.03	0.00
17	1	0.02	0.00	0.00	-0.01	0.00	0.00	-0.26	-0.09	0.00
18	1	0.01	0.00	0.00	-0.01	0.00	0.00	-0.22	-0.06	-0.01

	25	26	27
	A	A	A
Frequencies --	627.2523	633.8574	716.2723
Red. masses --	5.0672	4.2537	1.2563
Frc consts --	1.1746	1.0069	0.3798
IR Inten --	0.0240	0.0234	5.4801

Atom	AN	X	Y	Z	X	Y	Z	X	Y	Z
1	13	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
2	13	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
3	13	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
4	13	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
5	3	0.00	0.00	0.03	0.01	-0.02	0.00	0.00	0.00	0.01
6	3	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00

7	3	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
8	19	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
9	6	0.35	0.13	-0.01	-0.10	-0.04	0.01	0.05	0.01	-0.01
10	6	-0.20	-0.08	0.01	0.25	0.11	-0.01	0.09	0.04	0.00
11	6	-0.35	-0.13	-0.01	-0.10	-0.04	-0.01	-0.05	-0.01	-0.01
12	1	0.35	0.13	-0.02	-0.16	-0.06	0.01	-0.45	-0.17	0.02
13	6	0.00	0.00	-0.01	-0.31	-0.15	0.00	0.00	0.00	0.00
14	1	-0.39	-0.15	0.01	0.38	0.17	-0.01	-0.48	-0.18	0.00
15	6	0.20	0.08	0.01	0.25	0.11	0.01	-0.09	-0.04	0.00
16	1	-0.35	-0.13	-0.02	-0.16	-0.06	-0.01	0.45	0.17	0.02
17	1	0.00	0.00	-0.03	-0.50	-0.22	0.00	0.00	0.00	0.00
18	1	0.39	0.15	0.01	0.38	0.17	0.01	0.48	0.18	0.00

	28	29	30
	A	A	A
Frequencies --	721.3179	745.0348	836.9200
Red. masses --	1.2461	1.1436	1.1914
Frc consts --	0.3820	0.3740	0.4917
IR Inten --	105.2091	424.3254	0.2637

Atom	AN	X	Y	Z	X	Y	Z	X	Y	Z
1	13	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
2	13	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
3	13	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
4	13	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
5	3	-0.02	0.01	0.00	-0.04	-0.02	0.00	0.00	0.00	0.00
6	3	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
7	3	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
8	19	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
9	6	0.08	0.03	0.00	0.01	0.01	0.00	-0.06	0.01	0.03
10	6	-0.01	-0.01	0.00	0.05	0.02	0.00	0.05	0.03	-0.02
11	6	0.08	0.03	0.00	0.01	0.01	0.00	0.06	-0.01	0.03
12	1	-0.60	-0.24	0.05	-0.22	-0.08	0.02	0.48	0.24	-0.03
13	6	-0.06	-0.03	0.00	0.07	0.03	0.00	0.00	0.00	-0.01
14	1	0.02	0.02	0.00	-0.45	-0.18	0.00	-0.39	-0.22	-0.04
15	6	-0.01	-0.01	0.00	0.05	0.02	0.00	-0.05	-0.03	-0.02
16	1	-0.60	-0.24	-0.05	-0.22	-0.08	-0.02	-0.48	-0.24	-0.03
17	1	0.34	0.14	0.00	-0.59	-0.24	0.00	0.00	0.00	0.05
18	1	0.02	0.02	0.00	-0.45	-0.18	0.00	0.39	0.22	-0.04

	31	32	33
	A	A	A
Frequencies --	857.5983	860.5646	864.1680
Red. masses --	1.1999	4.2583	4.0094
Frc consts --	0.5200	1.8580	1.7641
IR Inten --	0.2172	0.9539	0.0072

Atom	AN	X	Y	Z	X	Y	Z	X	Y	Z

1	13	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
2	13	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
3	13	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
4	13	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
5	3	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
6	3	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
7	3	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
8	19	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
9	6	0.02	0.00	0.00	0.05	-0.13	0.02	-0.05	0.21	0.20
10	6	-0.06	-0.03	0.02	0.03	-0.01	0.27	-0.08	0.12	-0.15
11	6	0.02	0.00	0.00	0.05	-0.13	-0.02	0.05	-0.21	0.20
12	1	-0.16	-0.04	-0.03	-0.07	0.13	-0.37	-0.34	0.17	0.12
13	6	0.07	0.05	0.00	-0.16	0.28	0.00	0.00	0.00	-0.11
14	1	0.48	0.17	0.01	0.00	-0.31	0.18	0.23	-0.12	-0.26
15	6	-0.06	-0.03	-0.02	0.03	-0.01	-0.27	0.08	-0.12	-0.15
16	1	-0.16	-0.05	0.03	-0.07	0.13	0.37	0.34	-0.17	0.12
17	1	-0.60	-0.22	0.00	0.03	0.36	0.00	0.00	0.00	0.37
18	1	0.48	0.17	-0.01	0.00	-0.31	-0.18	-0.23	0.12	-0.26

	34	35	36
	A	A	A
Frequencies --	1023.6300	1026.8940	1072.6423
Red. masses --	1.4533	1.4324	1.2484
Frc consts --	0.8972	0.8899	0.8463
IR Inten --	21.6601	14.4653	2.4253

Atom	AN	X	Y	Z	X	Y	Z	X	Y	Z
1	13	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
2	13	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
3	13	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
4	13	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
5	3	-0.01	0.01	0.00	0.00	0.00	-0.01	0.00	0.00	0.00
6	3	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
7	3	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
8	19	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
9	6	0.02	-0.04	-0.09	-0.03	0.08	0.00	0.02	-0.05	0.06
10	6	-0.02	0.04	0.04	0.02	-0.05	0.09	-0.02	0.04	0.05
11	6	0.02	-0.04	0.09	0.03	-0.08	0.00	0.02	-0.05	-0.06
12	1	-0.08	0.15	-0.39	-0.18	0.31	-0.36	0.15	-0.31	0.44
13	6	0.04	-0.10	0.00	0.00	0.00	-0.06	0.00	0.02	0.00
14	1	-0.20	0.47	0.19	0.10	-0.19	0.04	-0.14	0.37	0.16
15	6	-0.02	0.04	-0.04	-0.02	0.05	0.09	-0.02	0.04	-0.05
16	1	-0.08	0.15	0.39	0.18	-0.31	-0.36	0.15	-0.31	-0.44
17	1	0.05	-0.11	0.00	0.00	0.00	-0.59	-0.02	0.01	-0.01
18	1	-0.20	0.47	-0.19	-0.10	0.20	0.04	-0.13	0.36	-0.16

	37	38	39

		A			A			A		
Frequencies --		1072.8933			1144.1347			1286.3350		
Red. masses --		1.2395			5.8330			1.2798		
Frc consts --		0.8406			4.4988			1.2477		
IR Inten --		0.2023			4.1583			0.0078		
Atom	AN	X	Y	Z	X	Y	Z	X	Y	Z
1	13	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
2	13	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
3	13	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
4	13	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
5	3	0.00	0.00	0.00	-0.01	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
6	3	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
7	3	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
8	19	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
9	6	0.01	-0.01	-0.04	-0.09	0.22	0.17	0.02	-0.04	0.06
10	6	0.02	-0.07	-0.01	0.03	-0.09	0.28	0.02	-0.06	-0.02
11	6	-0.01	0.00	-0.04	-0.09	0.22	-0.17	-0.02	0.04	0.06
12	1	-0.07	0.06	-0.16	-0.09	0.29	0.15	-0.11	0.24	-0.35
13	6	0.00	0.00	0.09	0.11	-0.28	0.00	0.00	0.00	-0.07
14	1	0.19	-0.43	-0.14	0.07	-0.09	0.31	-0.16	0.39	0.13
15	6	-0.02	0.07	-0.01	0.03	-0.09	-0.28	-0.02	0.06	-0.02
16	1	0.07	-0.07	-0.17	-0.09	0.29	-0.15	0.11	-0.24	-0.35
17	1	0.00	0.00	0.64	0.15	-0.30	0.00	0.00	0.00	0.44
18	1	-0.20	0.44	-0.14	0.07	-0.09	-0.31	0.16	-0.39	0.13

		40			41			42		
		A			A			A		
Frequencies --		1378.0093			1385.3431			1468.3776		
Red. masses --		4.8191			4.9563			2.5812		
Frc consts --		5.3916			5.6043			3.2791		
IR Inten --		0.0603			0.5726			0.1237		
Atom	AN	X	Y	Z	X	Y	Z	X	Y	Z
1	13	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
2	13	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
3	13	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
4	13	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
5	3	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.01
6	3	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
7	3	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
8	19	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
9	6	-0.05	0.17	0.00	0.07	-0.15	0.30	0.06	-0.14	0.08
10	6	0.09	-0.23	-0.16	-0.10	0.21	-0.06	-0.04	0.09	-0.11
11	6	0.05	-0.17	0.00	0.07	-0.15	-0.30	-0.06	0.14	0.08
12	1	-0.05	0.01	0.21	-0.14	0.29	-0.35	-0.08	0.17	-0.41
13	6	0.00	0.00	0.33	0.07	-0.13	0.00	0.00	0.00	0.20

14	1	-0.15	0.39	0.05	0.08	-0.18	-0.20	0.05	-0.11	-0.21
15	6	-0.09	0.23	-0.16	-0.10	0.21	0.06	0.04	-0.08	-0.11
16	1	0.05	-0.01	0.21	-0.14	0.30	0.35	0.08	-0.18	-0.41
17	1	0.00	0.00	-0.44	0.05	-0.14	0.00	0.00	0.00	-0.58
18	1	0.15	-0.39	0.05	0.08	-0.18	0.20	-0.04	0.09	-0.20

	43	44	45
	A	A	A
Frequencies --	1469.0437	3150.5531	3169.1014
Red. masses --	2.5324	1.0864	1.0935
Frc consts --	3.2200	6.3534	6.4708
IR Inten --	2.7442	4.7909	17.6838

Atom	AN	X	Y	Z	X	Y	Z	X	Y	Z
1	13	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
2	13	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
3	13	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
4	13	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
5	3	0.00	0.01	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
6	3	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
7	3	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
8	19	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
9	6	0.01	-0.02	-0.15	0.02	-0.05	-0.03	-0.01	0.04	0.04
10	6	-0.06	0.15	0.10	0.00	0.00	0.01	0.00	0.00	-0.02
11	6	0.01	-0.02	0.15	-0.02	0.05	-0.03	-0.01	0.04	-0.04
12	1	0.12	-0.28	0.19	-0.18	0.53	0.41	0.17	-0.49	-0.39
13	6	0.05	-0.13	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	-0.01	0.00
14	1	0.20	-0.49	-0.11	-0.01	0.03	-0.12	0.03	-0.07	0.24
15	6	-0.06	0.16	-0.10	0.00	0.00	0.01	0.00	0.00	0.02
16	1	0.12	-0.27	-0.18	0.18	-0.53	0.41	0.17	-0.49	0.39
17	1	0.06	-0.16	0.01	0.00	0.00	0.00	-0.05	0.13	0.00
18	1	0.20	-0.49	0.12	0.01	-0.03	-0.12	0.03	-0.07	-0.24

	46	47	48
	A	A	A
Frequencies --	3185.3923	3201.9508	3213.1862
Red. masses --	1.0901	1.0946	1.1026
Frc consts --	6.5168	6.6117	6.7074
IR Inten --	16.6181	20.1178	7.7691

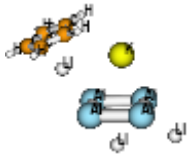
Atom	AN	X	Y	Z	X	Y	Z	X	Y	Z
1	13	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
2	13	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
3	13	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
4	13	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
5	3	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
6	3	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
7	3	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00

8	19	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
9	6	0.00	-0.01	-0.01	0.00	-0.01	0.00	0.00	-0.01	-0.01
10	6	0.00	0.01	-0.03	-0.01	0.02	-0.06	-0.01	0.01	-0.05
11	6	0.00	-0.01	0.01	0.00	0.01	0.00	0.00	-0.01	0.01
12	1	-0.05	0.16	0.12	-0.03	0.09	0.07	-0.04	0.12	0.09
13	6	0.03	-0.07	0.00	0.00	0.00	0.00	-0.02	0.05	0.00
14	1	0.04	-0.10	0.31	0.08	-0.20	0.66	0.06	-0.16	0.55
15	6	0.00	0.01	0.03	0.01	-0.02	-0.06	-0.01	0.01	0.05
16	1	-0.05	0.16	-0.12	0.03	-0.09	0.07	-0.04	0.12	-0.09
17	1	-0.32	0.77	0.00	0.00	0.00	-0.01	0.20	-0.49	0.00
18	1	0.04	-0.10	-0.31	-0.08	0.20	0.66	0.06	-0.16	-0.55

$CpKAl_4Li_3^- \rightarrow CpLi + Al_4Li_2K^-$ **-24.8133572**

$CpKAl_4Li_3^- \rightarrow Cp^- + Al_4Li_3K$ **-58.79331033**

CpKAl4Li3-C1-f-f-508-slop-B36311+gx.frq+22.6 △E=2.23kcal same



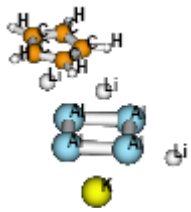
State=1-A\HF=-1786.0103688

D1=2.72712

D2=2.58015

D3=2.72661

D4=2.48176



Charge = -1 Multiplicity = 1

Al,0,-0.7371772174,-1.9588182143,-1.3510940236

Al,0,0.3519398605,0.5185378387,-1.2956661874

Al,0,0.3287957623,0.4143040616,1.2897637207

Al,0,-0.740489631,-2.0621702804,1.1367785004

Li,0,2.1920867966,1.8437516524,0.0611522646

Li,0,-3.4825115267,-1.8709162833,-0.118774459

Li,0,-2.1220582144,0.2819092897,-0.0400609064

K,0,2.5558841018,-1.9946153542,-0.0989229927

C,0,-4.9610422274,-0.5246896073,-1.2063766991

C,0,-5.580256862,-1.7009573229,-0.7337264247

C,0,-4.5155526132,0.2175211124,-0.0791143292

H,0,-4.843993909,-0.2371292315,-2.2434055887
C,0,-5.5226274947,-1.6911686125,0.6875039654
H,0,-6.0212908319,-2.476195089,-1.3490728534
C,0,-4.8703863341,-0.5068481872,1.0911561558
H,0,-4.1341215482,1.2373003894,-0.1045875668
H,0,-5.9111180707,-2.4577497786,1.3472124222
H,0,-4.6743048363,-0.2034530863,2.1116761246

State=1-A\HF=-1786.0084593

		1			2			3		
		A			A			A		
Frequencies --		4.4694			36.2801			46.0855		
Red. masses --		4.0045			9.7537			12.9848		
Frc consts --		0.0000			0.0076			0.0162		
IR Inten --		0.0108			2.1063			4.7286		
Atom	AN	X	Y	Z	X	Y	Z	X	Y	Z
1	13	0.01	0.04	-0.05	-0.07	-0.01	0.20	-0.01	0.22	-0.01
2	13	0.02	0.05	0.05	-0.09	0.01	0.10	0.09	0.19	0.02
3	13	-0.04	-0.05	0.05	0.09	-0.01	0.10	0.09	0.18	-0.01
4	13	-0.01	-0.05	-0.05	0.07	0.01	0.20	-0.02	0.22	0.01
5	3	-0.01	0.00	0.15	0.00	0.00	-0.03	0.47	-0.22	0.01
6	3	0.00	0.00	-0.03	0.00	-0.01	0.17	0.07	0.03	0.00
7	3	0.00	0.00	-0.04	0.00	-0.01	0.26	0.01	0.12	-0.01
8	19	0.00	0.00	-0.01	0.00	0.00	-0.27	-0.17	-0.26	-0.01
9	6	-0.10	-0.16	-0.06	0.16	-0.11	-0.14	-0.05	-0.17	-0.01
10	6	-0.06	-0.09	0.17	0.08	-0.06	-0.11	0.06	-0.22	0.01
11	6	0.00	-0.01	-0.21	0.01	0.00	-0.16	-0.12	-0.11	-0.02
12	1	-0.19	-0.31	-0.10	0.31	-0.22	-0.15	-0.07	-0.17	-0.01
13	6	0.07	0.11	0.15	-0.11	0.08	-0.11	0.06	-0.20	0.01
14	1	-0.11	-0.17	0.32	0.16	-0.12	-0.09	0.14	-0.27	0.02
15	6	0.10	0.17	-0.08	-0.15	0.12	-0.14	-0.05	-0.13	-0.01
16	1	0.00	-0.02	-0.39	0.02	-0.01	-0.22	-0.20	-0.08	-0.03
17	1	0.14	0.21	0.29	-0.20	0.15	-0.09	0.13	-0.23	0.02
18	1	0.19	0.31	-0.14	-0.30	0.22	-0.15	-0.08	-0.10	-0.01

		4			5			6		
		A			A			A		
Frequencies --		58.8193			71.9263			80.7006		
Red. masses --		12.2333			5.6972			9.7544		
Frc consts --		0.0249			0.0174			0.0374		
IR Inten --		0.2262			2.3393			3.4052		
Atom	AN	X	Y	Z	X	Y	Z	X	Y	Z
1	13	0.00	-0.02	-0.15	0.06	-0.09	0.08	-0.02	0.02	0.01
2	13	-0.30	0.03	0.03	-0.02	-0.07	0.06	0.13	-0.06	0.01
3	13	0.29	-0.02	0.03	-0.01	0.08	0.06	0.14	-0.04	0.01

4	13	-0.01	0.02	-0.15	-0.06	0.08	0.08	-0.05	0.05	0.00
5	3	0.02	-0.01	-0.35	-0.02	0.01	-0.04	0.36	-0.29	0.00
6	3	0.00	-0.01	-0.08	0.01	0.00	-0.41	-0.21	0.05	-0.05
7	3	-0.01	-0.01	0.75	-0.01	-0.01	0.15	0.01	-0.02	0.01
8	19	0.00	0.00	0.17	-0.02	-0.01	-0.09	0.23	0.11	-0.01
9	6	0.01	-0.04	-0.04	-0.19	0.10	-0.03	-0.27	-0.02	0.00
10	6	0.00	-0.02	0.00	-0.10	0.06	-0.02	-0.27	-0.01	0.01
11	6	0.00	0.00	-0.08	0.01	0.01	-0.05	-0.22	-0.03	-0.01
12	1	0.02	-0.09	-0.05	-0.39	0.20	-0.03	-0.30	-0.01	-0.01
13	6	0.01	0.03	0.00	0.17	-0.06	-0.02	-0.24	-0.02	0.00
14	1	-0.01	-0.04	0.03	-0.22	0.11	0.00	-0.30	0.00	0.01
15	6	0.01	0.04	-0.05	0.23	-0.09	-0.04	-0.21	-0.03	-0.01
16	1	0.02	-0.01	-0.13	0.00	0.01	-0.04	-0.20	-0.04	-0.02
17	1	0.01	0.05	0.03	0.30	-0.13	-0.01	-0.23	-0.02	0.01
18	1	-0.01	0.09	-0.06	0.42	-0.19	-0.05	-0.18	-0.04	-0.01

	7	8	9
	A	A	A
Frequencies --	99.0139	100.4268	111.5602
Red. masses --	15.0690	9.1015	9.3534
Frc consts --	0.0870	0.0541	0.0686
IR Inten --	1.6037	16.6556	6.2492

Atom	AN	X	Y	Z	X	Y	Z	X	Y	Z
1	13	-0.27	0.28	0.18	0.08	-0.01	-0.03	0.22	-0.05	-0.01
2	13	0.07	0.07	-0.18	0.17	-0.06	0.03	-0.10	0.16	0.01
3	13	0.05	-0.10	-0.17	0.18	-0.01	0.04	-0.10	0.16	-0.01
4	13	0.29	-0.24	0.18	-0.01	0.09	-0.04	0.24	-0.05	0.00
5	3	-0.15	0.18	-0.05	-0.55	0.65	0.00	0.05	0.05	0.00
6	3	-0.03	0.04	-0.27	-0.07	0.10	0.04	-0.18	-0.20	0.00
7	3	0.03	0.04	0.22	0.12	0.09	-0.03	-0.03	-0.30	-0.01
8	19	0.00	-0.03	0.12	-0.02	-0.11	-0.02	0.03	-0.13	0.00
9	6	-0.19	0.05	-0.06	-0.10	-0.04	0.01	-0.06	0.02	0.00
10	6	-0.12	0.02	-0.05	-0.09	-0.04	0.01	-0.26	0.12	0.00
11	6	-0.06	0.00	-0.08	-0.11	-0.02	0.01	0.08	-0.06	0.00
12	1	-0.31	0.11	-0.06	-0.08	-0.05	0.01	-0.03	0.00	0.00
13	6	0.06	-0.06	-0.05	-0.12	-0.02	0.01	-0.24	0.11	0.00
14	1	-0.19	0.05	-0.04	-0.07	-0.05	0.01	-0.41	0.21	0.00
15	6	0.10	-0.07	-0.07	-0.14	-0.01	0.01	-0.04	0.00	0.00
16	1	-0.06	0.00	-0.08	-0.10	-0.03	0.00	0.23	-0.12	0.00
17	1	0.16	-0.10	-0.05	-0.12	-0.02	0.01	-0.38	0.18	0.00
18	1	0.21	-0.12	-0.07	-0.15	0.00	0.01	0.02	-0.03	0.00

	10	11	12
	A	A	A
Frequencies --	128.7418	132.0989	135.8462
Red. masses --	23.6702	10.1469	12.2023

Frc consts --		0.2311			0.1043			0.1327		
IR Inten --		0.1015			0.0183			5.7494		
Atom	AN	X	Y	Z	X	Y	Z	X	Y	Z
1	13	0.38	0.00	0.22	0.15	0.04	0.00	0.00	0.04	0.01
2	13	-0.20	0.38	-0.21	0.19	-0.04	-0.15	-0.21	0.04	-0.01
3	13	0.24	-0.37	-0.21	-0.19	0.04	-0.15	-0.18	0.01	0.00
4	13	-0.37	-0.01	0.22	-0.15	-0.03	0.00	-0.03	0.04	0.01
5	3	0.00	0.02	0.16	-0.01	0.00	0.26	-0.19	0.05	0.00
6	3	-0.01	-0.01	-0.05	0.00	-0.01	0.01	0.11	0.15	0.00
7	3	0.02	-0.03	-0.30	-0.01	-0.01	0.82	-0.17	0.25	-0.02
8	19	-0.03	0.02	0.00	0.01	0.00	-0.05	0.35	-0.23	0.00
9	6	-0.04	0.02	0.01	0.07	-0.04	0.03	-0.06	0.07	0.00
10	6	-0.04	0.02	0.01	0.03	-0.02	0.03	0.15	-0.05	0.00
11	6	0.02	-0.01	0.01	0.01	-0.01	0.03	-0.20	0.15	0.00
12	1	-0.08	0.04	0.01	0.14	-0.08	0.03	-0.11	0.09	0.00
13	6	0.01	-0.01	0.01	-0.04	0.03	0.04	0.14	-0.04	0.00
14	1	-0.08	0.04	0.01	0.05	-0.03	0.04	0.30	-0.13	0.00
15	6	0.04	-0.03	0.01	-0.06	0.04	0.03	-0.08	0.08	0.00
16	1	0.03	-0.02	0.02	0.02	-0.01	0.00	-0.38	0.21	0.01
17	1	0.03	-0.02	0.01	-0.09	0.05	0.04	0.28	-0.12	0.00
18	1	0.10	-0.06	0.01	-0.13	0.07	0.03	-0.14	0.11	0.00

			13			14			15	
			A			A			A	
Frequencies --		154.6163			189.4811			227.7990		
Red. masses --		7.3246			13.2898			8.7897		
Frc consts --		0.1032			0.2811			0.2687		
IR Inten --		6.8323			4.1303			9.2178		
Atom	AN	X	Y	Z	X	Y	Z	X	Y	Z
1	13	-0.19	0.12	0.00	-0.20	-0.31	-0.04	0.12	0.14	0.04
2	13	0.00	0.02	0.00	-0.03	0.13	-0.09	-0.10	-0.15	-0.08
3	13	0.01	0.02	0.01	0.03	-0.12	-0.09	-0.09	-0.14	0.07
4	13	-0.18	0.12	0.00	0.19	0.30	-0.03	0.12	0.15	-0.03
5	3	-0.12	0.10	0.00	-0.01	-0.01	0.81	-0.14	-0.26	0.02
6	3	-0.08	-0.23	0.01	0.00	0.00	0.00	0.04	0.24	0.00
7	3	0.00	-0.23	-0.02	0.00	0.00	0.14	0.10	0.55	0.00
8	19	0.14	-0.05	0.00	0.00	0.00	0.02	-0.03	0.01	0.00
9	6	0.14	-0.07	0.00	-0.03	0.02	-0.01	0.03	-0.08	0.00
10	6	-0.09	0.05	0.00	-0.01	0.01	-0.01	-0.15	0.02	0.00
11	6	0.29	-0.16	0.00	-0.01	0.01	-0.02	0.18	-0.16	0.00
12	1	0.20	-0.10	0.00	-0.05	0.03	-0.01	0.08	-0.11	0.00
13	6	-0.08	0.04	0.00	0.02	-0.01	-0.01	-0.14	0.02	0.00
14	1	-0.25	0.14	0.00	-0.02	0.01	-0.01	-0.26	0.08	0.01
15	6	0.17	-0.09	0.00	0.03	-0.01	-0.01	0.05	-0.09	0.00
16	1	0.47	-0.22	0.00	-0.01	0.01	-0.02	0.25	-0.18	-0.01

17	1	-0.23	0.12	0.00	0.05	-0.02	-0.01	-0.24	0.07	0.00	
18	1	0.25	-0.13	0.00	0.04	-0.02	-0.01	0.11	-0.13	0.00	
			16			17			18		
			A			A			A		
Frequencies --			233.2757			249.9835			276.1123		
Red. masses --			9.6908			13.6876			15.9626		
Frc consts --			0.3107			0.5040			0.7170		
IR Inten --			28.8412			13.2981			9.4295		
Atom	AN	X	Y	Z	X	Y	Z	X	Y	Z	
1	13	-0.11	-0.21	-0.02	0.04	0.14	0.00	0.04	0.04	-0.10	
2	13	0.00	0.16	0.03	-0.22	-0.27	-0.07	-0.02	-0.11	0.45	
3	13	-0.01	0.14	-0.02	0.23	0.30	-0.07	-0.01	-0.10	-0.45	
4	13	-0.10	-0.21	0.02	-0.06	-0.18	0.00	0.03	0.04	0.10	
5	3	0.19	0.17	-0.03	0.00	0.00	0.79	0.26	0.29	0.01	
6	3	0.02	0.44	0.00	0.00	0.01	0.01	0.06	-0.21	0.01	
7	3	0.32	0.50	0.02	0.01	0.01	-0.18	-0.40	0.36	0.00	
8	19	0.04	-0.01	0.00	0.00	0.00	-0.01	-0.01	0.01	0.00	
9	6	0.03	-0.08	0.00	0.01	0.00	0.00	0.02	-0.01	0.00	
10	6	-0.09	-0.01	0.00	0.00	0.00	0.00	-0.05	0.03	0.00	
11	6	0.14	-0.14	0.00	0.00	0.00	0.00	0.06	-0.04	0.00	
12	1	0.07	-0.11	-0.01	0.01	-0.01	0.00	0.02	-0.01	0.00	
13	6	-0.09	-0.01	0.00	0.00	0.00	0.00	-0.05	0.03	0.00	
14	1	-0.14	0.01	0.01	0.01	0.00	0.00	-0.12	0.07	0.00	
15	6	0.04	-0.08	0.00	0.00	0.00	0.00	0.03	-0.02	0.00	
16	1	0.21	-0.16	-0.01	0.00	0.00	0.00	0.01	-0.01	0.00	
17	1	-0.13	0.01	0.00	-0.01	0.00	0.00	-0.11	0.06	0.00	
18	1	0.10	-0.12	0.00	0.00	0.00	0.00	0.04	-0.03	0.00	
			19			20			21		
			A			A			A		
Frequencies --			293.7765			310.4389			337.1422		
Red. masses --			5.7819			7.9549			23.8922		
Frc consts --			0.2940			0.4517			1.6000		
IR Inten --			0.0280			18.3361			12.1411		
Atom	AN	X	Y	Z	X	Y	Z	X	Y	Z	
1	13	0.02	0.01	-0.01	0.01	0.07	-0.04	-0.02	-0.04	0.62	
2	13	0.01	0.00	-0.01	-0.07	-0.04	0.13	0.04	0.07	0.19	
3	13	0.00	0.01	0.00	-0.07	-0.04	-0.13	0.04	0.07	-0.19	
4	13	-0.02	-0.01	-0.01	0.01	0.06	0.04	-0.01	-0.03	-0.62	
5	3	0.00	0.00	-0.01	-0.05	-0.05	0.00	-0.23	-0.23	-0.01	
6	3	0.00	0.00	0.74	-0.07	0.60	0.01	-0.03	0.14	-0.01	
7	3	0.00	0.01	0.08	0.48	-0.54	0.00	-0.13	-0.06	0.00	
8	19	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	
9	6	-0.18	0.09	-0.07	-0.02	-0.01	0.00	0.02	-0.01	0.00	
10	6	-0.09	0.05	-0.08	0.02	-0.04	0.00	0.01	0.00	0.00	

11	6	-0.02	0.01	-0.09	0.00	-0.01	0.00	0.03	-0.02	0.00
12	1	-0.30	0.15	-0.07	0.00	-0.02	0.00	0.04	-0.02	0.00
13	6	0.10	-0.06	-0.08	0.02	-0.03	0.00	0.01	0.00	0.00
14	1	-0.15	0.09	-0.08	0.10	-0.08	0.00	0.02	-0.01	0.00
15	6	0.17	-0.09	-0.08	-0.01	-0.01	0.00	0.02	-0.01	0.00
16	1	-0.01	0.01	-0.07	0.11	-0.06	0.00	0.03	-0.02	0.00
17	1	0.17	-0.10	-0.08	0.10	-0.08	-0.01	0.02	-0.01	0.00
18	1	0.29	-0.15	-0.08	0.01	-0.02	0.00	0.04	-0.02	0.00

	22	23	24
	A	A	A
Frequencies --	355.7362	381.3757	476.1274
Red. masses --	8.6410	7.2712	5.9510
Frc consts --	0.6443	0.6231	0.7949
IR Inten --	63.9777	178.9516	80.9744

Atom	AN	X	Y	Z	X	Y	Z	X	Y	Z
1	13	0.00	0.03	0.11	-0.01	0.02	0.04	-0.02	0.00	0.01
2	13	-0.08	-0.11	-0.10	-0.06	-0.02	0.04	0.00	0.00	0.00
3	13	-0.08	-0.11	0.10	-0.06	-0.02	-0.04	0.00	0.00	0.00
4	13	0.01	0.03	-0.11	-0.01	0.02	-0.04	-0.02	0.00	-0.01
5	3	0.66	0.67	0.02	0.06	0.05	0.00	0.00	0.01	0.00
6	3	-0.04	0.12	0.00	0.04	-0.55	0.00	0.86	0.02	0.00
7	3	-0.06	-0.12	0.00	0.77	0.17	0.00	-0.01	-0.15	0.00
8	19	-0.01	-0.01	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
9	6	0.01	0.00	0.00	-0.05	0.04	0.01	-0.09	0.01	0.00
10	6	0.00	0.00	0.00	0.02	-0.01	0.00	-0.10	0.03	0.01
11	6	0.01	-0.01	0.00	-0.10	0.07	0.00	0.03	-0.03	0.00
12	1	0.01	-0.01	0.00	-0.09	0.07	0.01	-0.20	0.06	0.00
13	6	0.00	0.00	0.00	0.02	0.00	0.00	-0.10	0.03	-0.01
14	1	0.02	-0.01	0.00	-0.03	0.02	-0.01	-0.23	0.10	0.01
15	6	0.01	0.00	0.00	-0.05	0.04	-0.01	-0.07	0.00	0.00
16	1	0.02	-0.01	0.00	-0.03	0.04	0.00	-0.09	0.01	0.00
17	1	0.01	-0.01	0.00	-0.02	0.02	0.01	-0.23	0.09	-0.01
18	1	0.01	-0.01	0.00	-0.08	0.07	-0.01	-0.17	0.05	0.01

	25	26	27
	A	A	A
Frequencies --	624.8922	634.8773	732.7510
Red. masses --	5.0800	4.2378	1.2718
Frc consts --	1.1688	1.0064	0.4023
IR Inten --	26.0086	0.0391	7.3673

Atom	AN	X	Y	Z	X	Y	Z	X	Y	Z
1	13	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
2	13	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
3	13	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
4	13	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00

5	3	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
6	3	-0.07	-0.04	0.01	-0.01	-0.01	-0.02	0.00	0.00	-0.01
7	3	-0.02	0.01	0.00	0.00	0.00	0.01	0.00	0.00	0.00
8	19	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
9	6	-0.24	0.12	0.01	-0.18	0.10	0.01	-0.08	0.05	0.00
10	6	0.09	-0.04	-0.02	0.29	-0.17	-0.01	-0.04	0.03	0.01
11	6	0.38	-0.17	-0.01	0.02	-0.01	-0.01	-0.01	0.00	0.00
12	1	-0.43	0.22	0.02	-0.31	0.17	0.02	0.49	-0.28	-0.02
13	6	0.13	-0.06	0.01	-0.27	0.17	0.00	0.06	-0.04	0.00
14	1	0.16	-0.07	-0.03	0.43	-0.26	-0.01	0.30	-0.16	0.00
15	6	-0.27	0.14	-0.01	0.16	-0.08	0.01	0.08	-0.04	-0.01
16	1	0.17	-0.09	-0.01	0.02	-0.01	0.03	0.07	-0.02	0.06
17	1	0.23	-0.11	0.02	-0.41	0.25	0.01	-0.41	0.22	0.01
18	1	-0.45	0.23	0.00	0.27	-0.15	0.01	-0.49	0.28	-0.01

	28	29	30
	A	A	A
Frequencies --	739.3049	760.6998	850.7604
Red. masses --	1.2456	1.1401	1.4113
Frc consts --	0.4011	0.3887	0.6018
IR Inten --	7.2495	520.6686	1.0193

Atom	AN	X	Y	Z	X	Y	Z	X	Y	Z
1	13	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
2	13	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
3	13	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
4	13	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
5	3	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
6	3	-0.01	0.02	0.00	-0.04	0.02	0.00	0.00	0.00	0.00
7	3	-0.02	0.01	0.00	0.02	-0.01	0.00	0.01	-0.01	0.00
8	19	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
9	6	-0.01	0.01	0.00	0.05	-0.03	0.01	-0.05	0.02	0.07
10	6	0.08	-0.05	0.00	0.01	-0.01	0.00	0.01	-0.04	0.01
11	6	-0.06	0.01	0.00	0.04	0.00	0.00	0.09	0.08	-0.01
12	1	-0.09	0.07	0.01	-0.38	0.19	0.01	0.40	-0.36	0.03
13	6	0.07	-0.04	-0.01	0.01	-0.01	0.00	0.01	-0.05	0.01
14	1	-0.55	0.30	0.01	-0.25	0.14	0.00	-0.19	0.15	-0.11
15	6	-0.03	0.02	0.00	0.05	-0.04	-0.01	-0.06	0.01	-0.08
16	1	0.50	-0.20	-0.02	-0.62	0.24	0.02	-0.40	0.27	0.02
17	1	-0.47	0.25	0.00	-0.26	0.15	0.01	-0.18	0.15	0.11
18	1	0.02	0.01	0.00	-0.39	0.20	-0.01	0.41	-0.36	-0.04

	31	32	33
	A	A	A
Frequencies --	861.3562	861.8659	865.1209
Red. masses --	4.3720	1.1962	2.5600
Frc consts --	1.9112	0.5235	1.1289

IR Inten --		0.1570			0.7007			4.3926		
Atom	AN	X	Y	Z	X	Y	Z	X	Y	Z
1	13	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
2	13	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
3	13	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
4	13	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
5	3	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
6	3	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.01	0.00	0.00
7	3	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	-0.02	0.01	0.00
8	19	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
9	6	0.06	0.12	-0.18	-0.05	0.03	0.00	0.04	-0.01	0.18
10	6	0.14	0.21	0.20	0.06	-0.04	-0.01	-0.06	-0.08	0.03
11	6	-0.01	-0.02	-0.11	0.00	-0.01	0.00	0.05	0.20	-0.01
12	1	-0.14	-0.19	-0.28	0.37	-0.18	0.00	-0.35	0.01	0.15
13	6	-0.12	-0.18	0.23	-0.06	0.05	0.00	-0.08	-0.08	-0.01
14	1	0.08	0.32	0.09	-0.52	0.27	0.02	0.15	0.00	-0.23
15	6	-0.07	-0.13	-0.14	0.04	-0.02	0.01	0.04	-0.04	-0.19
16	1	0.04	0.00	0.42	-0.03	0.00	-0.01	0.55	0.01	-0.03
17	1	-0.07	-0.32	0.10	0.50	-0.26	-0.02	0.26	-0.04	0.22
18	1	0.11	0.21	-0.29	-0.34	0.18	0.02	-0.44	0.05	-0.13

	34	35	36
	A	A	A
Frequencies --	1021.0181	1022.0491	1070.2520
Red. masses --	1.4503	1.4269	1.2456
Frc consts --	0.8908	0.8782	0.8406
IR Inten --	29.2376	15.1700	4.4946

Atom	AN	X	Y	Z	X	Y	Z	X	Y	Z
1	13	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
2	13	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
3	13	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
4	13	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
5	3	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
6	3	0.01	0.01	0.00	0.00	0.00	0.01	0.00	0.00	0.00
7	3	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
8	19	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
9	6	0.02	0.04	-0.01	0.00	-0.02	-0.10	0.04	0.07	-0.02
10	6	-0.04	-0.08	-0.07	-0.02	-0.03	0.05	-0.01	0.00	0.04
11	6	-0.04	-0.08	0.05	0.03	0.06	0.06	0.00	0.00	-0.06
12	1	0.24	0.41	0.10	-0.14	-0.18	-0.16	0.25	0.45	0.09
13	6	0.01	0.01	0.07	0.04	0.08	-0.06	0.01	0.01	0.04
14	1	-0.04	-0.04	-0.12	-0.15	-0.27	0.47	-0.06	-0.15	0.28
15	6	0.00	0.02	-0.10	-0.03	-0.04	-0.04	-0.04	-0.08	-0.01
16	1	-0.06	-0.05	0.45	0.10	0.07	0.62	-0.02	-0.02	-0.48
17	1	0.17	0.29	0.46	0.10	0.13	0.02	0.08	0.17	0.25

18	1	0.20	0.29	-0.23	-0.18	-0.32	0.08	-0.25	-0.44	0.15

	37	38	39
	A	A	A
Frequencies --	1073.7967	1142.4500	1284.3806
Red. masses --	1.2589	5.4960	1.2836
Frc consts --	0.8552	4.2264	1.2476
IR Inten --	1.0046	6.6077	0.0134

Atom	AN	X	Y	Z	X	Y	Z	X	Y	Z
1	13	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
2	13	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
3	13	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
4	13	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
5	3	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
6	3	0.00	0.00	0.00	-0.01	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
7	3	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
8	19	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
9	6	0.02	0.04	0.05	-0.03	-0.06	0.26	0.03	0.06	0.01
10	6	-0.02	-0.04	0.07	0.12	0.21	0.16	0.02	0.03	-0.06
11	6	0.01	0.00	0.00	-0.14	-0.26	0.02	0.00	0.00	0.08
12	1	0.21	0.31	0.14	-0.05	-0.20	0.26	-0.21	-0.39	-0.12
13	6	-0.02	-0.05	-0.06	0.10	0.20	-0.19	-0.02	-0.04	-0.05
14	1	-0.15	-0.27	0.48	0.19	0.30	0.06	-0.11	-0.21	0.37
15	6	0.01	0.04	-0.06	-0.05	-0.08	-0.25	-0.03	-0.06	0.02
16	1	-0.06	0.03	0.00	-0.15	-0.30	0.02	-0.02	-0.02	-0.42
17	1	-0.18	-0.31	-0.44	0.18	0.29	-0.10	0.13	0.24	0.34
18	1	0.20	0.29	-0.18	-0.07	-0.22	-0.24	0.20	0.37	-0.17

	40	41	42
	A	A	A
Frequencies --	1380.2313	1384.3023	1464.2826
Red. masses --	4.6974	4.9653	2.4584
Frc consts --	5.2724	5.6060	3.1056
IR Inten --	0.9225	0.1177	7.9201

Atom	AN	X	Y	Z	X	Y	Z	X	Y	Z
1	13	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
2	13	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
3	13	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
4	13	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
5	3	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
6	3	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
7	3	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
8	19	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
9	6	0.09	0.20	-0.08	-0.13	-0.21	-0.17	-0.08	-0.15	-0.08
10	6	-0.06	-0.13	0.29	0.09	0.13	0.00	0.02	0.03	0.14
11	6	-0.03	-0.12	0.01	0.01	0.02	0.37	0.06	0.11	-0.02

12	1	-0.09	-0.20	-0.21	0.19	0.35	-0.01	0.26	0.48	0.10
13	6	-0.09	-0.16	-0.27	-0.09	-0.13	0.02	0.00	0.01	-0.15
14	1	0.13	0.25	-0.37	0.04	0.09	0.10	0.13	0.25	-0.19
15	6	0.10	0.21	0.06	0.11	0.19	-0.20	-0.07	-0.13	0.11
16	1	-0.18	-0.07	0.01	-0.02	-0.02	-0.54	0.09	0.13	0.01
17	1	0.16	0.28	0.35	-0.03	-0.08	0.11	0.15	0.28	0.19
18	1	-0.08	-0.19	0.23	-0.18	-0.34	0.03	0.24	0.46	-0.15

	43	44	45
	A	A	A
Frequencies --	1470.3230	3125.4436	3179.9032
Red. masses --	2.6791	1.0904	1.0868
Frc consts --	3.4125	6.2756	6.4749
IR Inten --	0.0376	4.9767	4.0532

Atom	AN	X	Y	Z	X	Y	Z	X	Y	Z
1	13	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
2	13	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
3	13	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
4	13	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
5	3	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
6	3	0.00	0.00	0.01	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
7	3	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
8	19	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
9	6	0.04	0.10	-0.11	0.00	0.00	-0.01	0.00	0.00	0.02
10	6	-0.08	-0.15	0.10	0.00	0.00	0.00	-0.02	-0.04	-0.03
11	6	0.01	0.01	0.17	-0.03	-0.08	0.00	0.00	0.00	0.00
12	1	-0.06	-0.11	-0.20	-0.01	-0.03	0.11	0.02	0.05	-0.23
13	6	0.09	0.16	0.07	0.00	0.00	0.00	0.02	0.04	-0.03
14	1	0.09	0.16	-0.47	0.00	0.00	0.00	0.28	0.51	0.37
15	6	-0.06	-0.12	-0.08	0.00	0.00	0.01	0.00	0.01	0.02
16	1	-0.02	-0.02	-0.49	0.34	0.92	-0.06	0.00	0.00	0.00
17	1	-0.11	-0.17	-0.43	0.00	0.00	0.00	-0.23	-0.44	0.40
18	1	0.07	0.13	-0.22	-0.02	-0.04	-0.10	-0.04	-0.07	-0.21

	46	47	48
	A	A	A
Frequencies --	3193.9072	3207.2306	3214.5477
Red. masses --	1.0924	1.0956	1.1027
Frc consts --	6.5655	6.6400	6.7136
IR Inten --	26.3779	14.4617	9.5277

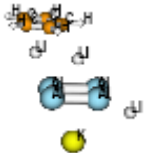
Atom	AN	X	Y	Z	X	Y	Z	X	Y	Z
1	13	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
2	13	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
3	13	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
4	13	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
5	3	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00

6	3	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
7	3	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
8	19	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
9	6	0.00	0.01	-0.03	0.01	0.01	-0.06	0.01	0.01	-0.05
10	6	0.02	0.03	0.03	-0.01	-0.02	-0.01	-0.02	-0.03	-0.02
11	6	0.00	0.01	0.00	0.00	0.00	0.00	0.01	0.01	0.00
12	1	-0.04	-0.08	0.37	-0.07	-0.16	0.65	-0.06	-0.13	0.56
13	6	0.02	0.03	-0.03	0.01	0.02	-0.01	-0.01	-0.03	0.02
14	1	-0.23	-0.40	-0.30	0.09	0.15	0.11	0.17	0.30	0.22
15	6	0.01	0.01	0.04	-0.01	-0.02	-0.05	0.01	0.02	0.05
16	1	-0.03	-0.09	0.01	0.00	0.00	-0.01	-0.04	-0.11	0.01
17	1	-0.21	-0.40	0.38	-0.09	-0.17	0.15	0.15	0.28	-0.26
18	1	-0.07	-0.13	-0.40	0.12	0.21	0.62	-0.10	-0.18	-0.52

$CpKAl_4Li_3^- \rightarrow CpLi + Al_4Li_2K^-$ **-24.5708247**

$CpKAl_4Li_3^- \rightarrow Cp^- + Al_4Li_3K$ **-57.59495544**

CpKAl4Li3-C1-f-f-502-slop-B36311+gx.frq+11.8 △E=3.43kcal same



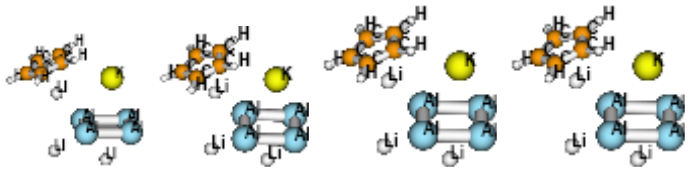
State=1-A\HF=-1786.008455

D1=2.70340

D2=2.58721

D3=2.70549

D4=2.49034



Charge = -1 Multiplicity = 1

Al,0,1.004537634,1.3596673601,-1.2360537055

Al,0,3.0438171678,-0.4309888266,-1.3190537648

Al,0,3.082694972,-0.5540109654,1.1808873979

Al,0,1.0429634465,1.2304958916,1.337563467

Li,0,0.6832601395,3.5801285811,0.170557139

Li,0,3.3995901957,1.9938611132,0.0478141534

Li,0,-1.6590206033,0.8380600509,0.0680717084

K,0,0.2076142998,-2.0653483837,-0.1032254886

C,0,-2.9412376913,-0.9448257892,0.7041230173

C,0,-3.4939229513,0.2568053034,1.209458587

C,0,-2.958733998,-0.8730909274,-0.7134940256

H,0,-2.6163920343,-1.7859809772,1.3083412462

C,0,-3.8553478585,1.0686698682,0.1065831104
H,0,-3.6123408631,0.5088865512,2.2557901899
C,0,-3.5221865272,0.3727807799,-1.0811495222
H,0,-2.6495835128,-1.6484077787,-1.407344704
H,0,-4.3059286118,2.0525880048,0.1620456861
H,0,-3.6655135761,0.7292238694,-2.0934682697

State=1-A\HF=-1786.0122572

		1			2			3		
		A			A			A		
Frequencies --		29.9270			33.1728			54.7280		
Red. masses --		3.9124			14.5259			10.2635		
Frc consts --		0.0021			0.0094			0.0181		
IR Inten --		0.0043			3.4240			1.2775		
Atom	AN	X	Y	Z	X	Y	Z	X	Y	Z
1	13	0.00	0.05	-0.03	0.09	0.11	-0.09	-0.05	0.17	0.00
2	13	0.00	0.05	0.03	0.19	0.03	0.19	0.16	-0.07	0.00
3	13	0.00	-0.05	0.03	-0.19	-0.03	0.19	0.16	-0.07	0.00
4	13	0.00	-0.05	-0.03	-0.09	-0.11	-0.09	-0.05	0.17	0.00
5	3	0.00	0.00	-0.12	0.00	0.00	-0.32	-0.33	0.21	0.00
6	3	0.00	0.00	-0.06	0.00	0.00	0.09	-0.15	-0.13	0.00
7	3	0.00	0.00	0.04	0.00	0.00	-0.04	-0.06	0.09	0.00
8	19	0.00	0.00	0.05	0.00	0.00	-0.38	0.20	0.09	0.00
9	6	0.03	0.12	-0.18	0.07	-0.03	0.17	-0.24	-0.11	0.00
10	6	0.04	0.19	0.04	0.12	-0.05	0.17	-0.11	-0.17	0.00
11	6	-0.02	-0.12	-0.18	-0.08	0.03	0.17	-0.24	-0.11	0.00
12	1	0.03	0.23	-0.33	0.16	-0.07	0.17	-0.31	-0.08	-0.01
13	6	0.00	0.00	0.18	0.00	0.00	0.18	-0.03	-0.21	0.00
14	1	0.07	0.36	0.10	0.24	-0.10	0.17	-0.08	-0.19	0.00
15	6	-0.04	-0.19	0.05	-0.13	0.05	0.17	-0.11	-0.17	0.00
16	1	-0.02	-0.24	-0.33	-0.16	0.07	0.17	-0.31	-0.08	0.01
17	1	0.00	0.00	0.37	0.00	0.00	0.18	0.07	-0.25	0.00
18	1	-0.07	-0.36	0.10	-0.24	0.10	0.17	-0.08	-0.19	0.00

		4			5			6		
		A			A			A		
Frequencies --		71.1145			73.2018			85.1029		
Red. masses --		12.3447			18.6286			5.2352		
Frc consts --		0.0368			0.0588			0.0223		
IR Inten --		1.1691			4.2650			0.2600		
Atom	AN	X	Y	Z	X	Y	Z	X	Y	Z
1	13	-0.20	0.21	0.22	0.11	0.13	0.00	-0.06	0.05	0.12
2	13	-0.06	0.08	0.01	0.23	0.05	0.01	0.03	-0.05	-0.02
3	13	0.07	-0.08	0.01	0.23	0.05	-0.01	-0.03	0.05	-0.02
4	13	0.20	-0.21	0.22	0.11	0.13	0.00	0.06	-0.05	0.12

5	3	0.00	0.00	-0.18	0.02	0.12	0.00	0.00	0.00	-0.03
6	3	0.00	0.00	-0.40	0.10	0.04	0.00	0.00	0.00	-0.12
7	3	0.00	0.00	0.23	-0.16	0.04	-0.01	0.00	0.00	-0.38
8	19	0.00	0.00	-0.18	-0.16	-0.49	0.00	0.00	0.00	0.03
9	6	-0.11	0.02	0.00	-0.16	0.12	0.00	0.15	-0.04	-0.08
10	6	-0.17	0.03	-0.06	-0.18	0.13	0.00	0.24	-0.07	-0.03
11	6	0.11	-0.02	0.00	-0.16	0.12	0.00	-0.15	0.04	-0.08
12	1	-0.19	0.03	0.02	-0.16	0.12	0.00	0.26	-0.07	-0.09
13	6	0.00	0.00	-0.10	-0.20	0.13	0.00	0.00	0.00	0.00
14	1	-0.33	0.05	-0.07	-0.19	0.13	0.00	0.45	-0.13	-0.02
15	6	0.17	-0.03	-0.06	-0.19	0.13	0.00	-0.24	0.07	-0.03
16	1	0.19	-0.03	0.02	-0.17	0.12	0.00	-0.26	0.07	-0.09
17	1	0.00	0.00	-0.14	-0.23	0.15	0.00	0.00	0.00	0.03
18	1	0.33	-0.05	-0.07	-0.21	0.14	0.00	-0.45	0.13	-0.02

	7	8	9
	A	A	A
Frequencies --	90.2115	93.1322	123.2527
Red. masses --	15.4791	8.2117	5.5831
Frc consts --	0.0742	0.0420	0.0500
IR Inten --	0.0143	5.6807	0.7439

Atom	AN	X	Y	Z	X	Y	Z	X	Y	Z
1	13	-0.01	0.19	0.03	0.07	-0.10	0.01	-0.11	0.11	0.00
2	13	0.28	-0.27	-0.18	0.01	0.02	-0.01	-0.02	0.03	0.00
3	13	-0.28	0.27	-0.18	0.01	0.02	0.01	-0.02	0.03	0.00
4	13	0.01	-0.19	0.03	0.07	-0.10	-0.01	-0.11	0.11	0.00
5	3	0.00	0.00	-0.36	0.55	-0.23	0.00	0.19	0.00	0.00
6	3	0.00	0.00	0.40	0.19	0.11	0.00	-0.08	0.04	0.00
7	3	0.00	0.00	0.19	-0.18	-0.03	0.01	-0.10	-0.25	0.00
8	19	0.00	0.00	0.14	0.15	0.10	0.00	0.10	-0.07	0.00
9	6	-0.08	0.03	0.03	-0.17	0.01	0.00	0.23	-0.14	0.00
10	6	-0.12	0.04	0.01	-0.23	0.04	0.00	-0.03	-0.02	0.00
11	6	0.08	-0.03	0.03	-0.17	0.01	0.00	0.23	-0.14	0.00
12	1	-0.14	0.05	0.03	-0.14	0.00	0.00	0.42	-0.21	0.01
13	6	0.00	0.00	0.00	-0.26	0.05	0.00	-0.19	0.06	0.00
14	1	-0.24	0.08	0.01	-0.26	0.04	0.00	-0.09	0.01	0.00
15	6	0.12	-0.04	0.01	-0.22	0.03	0.00	-0.03	-0.02	0.00
16	1	0.14	-0.05	0.03	-0.13	-0.01	0.01	0.41	-0.21	-0.01
17	1	0.00	0.00	-0.01	-0.31	0.07	0.00	-0.40	0.15	0.00
18	1	0.24	-0.08	0.01	-0.24	0.04	0.00	-0.09	0.01	0.00

	10	11	12
	A	A	A
Frequencies --	128.0097	137.8558	139.8261
Red. masses --	6.9730	13.0970	16.1688
Frc consts --	0.0673	0.1466	0.1863

IR Inten --		5.9226			0.5331			13.8952		
Atom	AN	X	Y	Z	X	Y	Z	X	Y	Z
1	13	-0.15	0.09	0.00	-0.21	-0.12	-0.13	0.05	0.08	0.00
2	13	0.01	-0.08	0.00	0.17	-0.17	0.16	0.21	-0.19	0.01
3	13	0.01	-0.08	0.00	-0.17	0.17	0.16	0.22	-0.19	-0.01
4	13	-0.15	0.10	0.00	0.21	0.11	-0.13	0.05	0.07	0.01
5	3	0.61	-0.21	0.00	-0.01	0.00	0.27	0.25	-0.04	0.00
6	3	-0.03	0.02	-0.01	0.00	0.00	-0.76	-0.04	-0.28	0.01
7	3	0.09	0.17	0.00	0.00	0.00	0.05	-0.06	-0.21	0.00
8	19	-0.02	-0.05	0.00	0.00	0.00	0.04	-0.38	0.28	0.00
9	6	-0.09	0.08	0.00	-0.03	0.01	0.00	0.13	-0.08	0.00
10	6	0.10	0.00	0.00	-0.05	0.02	0.00	-0.06	0.00	0.00
11	6	-0.09	0.08	0.00	0.03	-0.01	0.01	0.13	-0.08	0.00
12	1	-0.22	0.14	-0.01	-0.06	0.02	0.00	0.24	-0.14	0.01
13	6	0.22	-0.06	0.00	0.00	0.00	0.00	-0.18	0.06	0.00
14	1	0.16	-0.03	0.00	-0.10	0.04	0.00	-0.11	0.03	0.00
15	6	0.11	-0.01	0.00	0.05	-0.02	0.00	-0.06	0.01	0.00
16	1	-0.22	0.14	0.00	0.06	-0.03	0.00	0.24	-0.14	-0.01
17	1	0.39	-0.14	0.00	0.00	0.00	0.00	-0.34	0.14	0.00
18	1	0.16	-0.03	0.00	0.09	-0.04	0.00	-0.11	0.03	0.00

	13	14	15
	A	A	A
Frequencies --	142.6784	205.6106	225.8543
Red. masses --	16.0687	12.5116	17.1537
Frc consts --	0.1927	0.3116	0.5155
IR Inten --	2.1020	5.3359	8.0174

Atom	AN	X	Y	Z	X	Y	Z	X	Y	Z
1	13	0.26	-0.10	0.16	-0.20	0.06	-0.07	-0.27	-0.21	0.08
2	13	0.26	0.19	-0.15	0.18	0.23	-0.07	0.30	0.18	-0.06
3	13	-0.26	-0.19	-0.15	-0.18	-0.23	-0.07	0.31	0.18	0.06
4	13	-0.25	0.09	0.16	0.20	-0.07	-0.07	-0.27	-0.21	-0.08
5	3	0.00	0.00	0.12	0.00	0.00	0.69	-0.26	-0.39	0.00
6	3	0.00	0.00	-0.70	0.00	0.00	0.47	0.01	0.51	0.00
7	3	0.00	0.00	0.03	0.00	0.00	0.02	-0.03	0.03	0.00
8	19	0.00	0.00	0.04	0.00	0.00	0.00	-0.05	0.04	0.00
9	6	-0.03	0.01	0.03	0.02	-0.01	-0.02	0.03	-0.01	0.00
10	6	-0.05	0.02	0.02	0.03	-0.01	-0.02	0.03	-0.01	0.00
11	6	0.03	-0.01	0.03	-0.02	0.01	-0.02	0.03	-0.01	0.00
12	1	-0.05	0.02	0.03	0.03	-0.01	-0.02	0.05	-0.02	0.00
13	6	0.00	0.00	0.02	0.00	0.00	-0.02	0.02	-0.01	0.00
14	1	-0.09	0.04	0.02	0.06	-0.03	-0.02	0.03	-0.01	0.00
15	6	0.05	-0.02	0.02	-0.03	0.01	-0.02	0.03	-0.01	0.00
16	1	0.05	-0.02	0.03	-0.03	0.01	-0.02	0.05	-0.02	0.00
17	1	0.00	0.00	0.02	0.00	0.00	-0.02	0.02	-0.01	0.00

18	1	0.09	-0.04	0.02	-0.06	0.03	-0.02	0.03	-0.01	0.00

	16	17	18
	A	A	A
Frequencies --	244.0902	246.3556	288.7882
Red. masses --	12.4257	8.2228	17.8576
Frc consts --	0.4362	0.2940	0.8775
IR Inten --	3.9414	2.9567	4.0991

Atom	AN	X	Y	Z	X	Y	Z	X	Y	Z
1	13	0.18	0.28	-0.07	-0.03	0.06	0.03	0.05	0.10	0.50
2	13	-0.09	-0.12	0.00	-0.04	-0.15	-0.02	-0.06	0.02	-0.09
3	13	0.09	0.11	0.00	-0.04	-0.16	0.02	-0.06	0.02	0.09
4	13	-0.18	-0.28	-0.07	-0.02	0.06	-0.03	0.05	0.10	-0.50
5	3	0.00	0.00	0.80	-0.17	0.13	-0.01	-0.14	-0.46	0.00
6	3	0.01	0.01	-0.28	0.71	0.62	0.00	0.18	-0.42	0.00
7	3	0.00	0.00	0.01	0.01	0.03	0.00	0.01	0.09	0.00
8	19	0.00	0.00	0.00	-0.02	0.01	0.00	0.00	-0.01	0.00
9	6	0.01	0.00	0.00	0.02	-0.02	0.00	0.02	-0.01	0.00
10	6	0.01	-0.01	0.00	-0.01	-0.01	0.00	-0.01	0.00	0.00
11	6	-0.01	0.00	0.00	0.02	-0.02	0.00	0.02	-0.01	0.00
12	1	0.02	-0.01	0.00	0.04	-0.03	0.00	0.03	-0.02	0.00
13	6	0.00	0.00	0.00	-0.02	0.00	0.00	-0.02	0.00	0.00
14	1	0.03	-0.01	0.00	-0.01	0.00	0.00	-0.01	0.00	0.00
15	6	-0.01	0.00	0.00	-0.01	-0.01	0.00	-0.01	0.00	0.00
16	1	-0.01	0.01	0.00	0.04	-0.03	0.00	0.03	-0.02	0.00
17	1	0.00	0.00	0.00	-0.05	0.01	0.00	-0.03	0.01	0.00
18	1	-0.03	0.01	0.00	-0.01	0.00	0.00	-0.01	0.00	0.00

	19	20	21
	A	A	A
Frequencies --	302.3256	319.8581	330.7525
Red. masses --	5.9914	6.5133	14.3764
Frc consts --	0.3226	0.3926	0.9266
IR Inten --	0.0833	8.3737	23.9041

Atom	AN	X	Y	Z	X	Y	Z	X	Y	Z
1	13	0.01	-0.01	0.00	0.01	-0.01	-0.03	-0.09	0.01	-0.03
2	13	0.00	0.00	0.00	-0.01	0.00	0.02	0.02	0.08	0.41
3	13	0.00	0.00	0.00	-0.01	0.00	-0.02	0.02	0.07	-0.41
4	13	-0.01	0.01	0.00	0.01	-0.01	0.03	-0.09	0.01	0.03
5	3	0.00	0.00	-0.04	0.03	-0.05	0.00	-0.12	-0.22	0.00
6	3	0.00	0.00	-0.03	-0.05	0.01	0.00	0.61	-0.45	0.00
7	3	0.00	0.00	0.77	0.12	0.86	0.00	-0.01	-0.03	0.00
8	19	0.00	0.00	0.00	-0.02	-0.02	0.00	0.01	0.01	0.00
9	6	0.12	-0.05	-0.08	0.11	-0.12	0.01	0.00	0.00	0.00
10	6	0.16	-0.08	-0.07	-0.06	-0.05	0.00	0.00	0.00	0.00
11	6	-0.12	0.05	-0.08	0.11	-0.12	-0.01	0.00	0.00	0.00

12	1	0.17	-0.07	-0.08	0.19	-0.15	0.01	0.00	0.00	0.00
13	6	0.00	0.00	-0.08	-0.14	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
14	1	0.27	-0.13	-0.07	-0.05	-0.06	-0.01	0.01	0.00	0.00
15	6	-0.16	0.08	-0.07	-0.06	-0.05	0.00	0.00	0.00	0.00
16	1	-0.17	0.07	-0.08	0.19	-0.15	-0.01	0.00	0.00	0.00
17	1	0.00	0.00	-0.09	-0.17	0.02	0.00	0.00	0.00	0.00
18	1	-0.27	0.13	-0.07	-0.06	-0.06	0.01	0.01	0.00	0.00

	22	23	24
	A	A	A
Frequencies --	338.1983	363.5985	462.8952
Red. masses --	11.3811	8.2217	5.8719
Frc consts --	0.7670	0.6404	0.7413
IR Inten --	6.5043	8.0615	99.8065

Atom	AN	X	Y	Z	X	Y	Z	X	Y	Z
1	13	0.04	-0.06	0.20	-0.10	-0.10	0.07	-0.03	0.00	0.00
2	13	0.01	-0.06	0.25	0.03	0.04	-0.07	0.00	0.01	-0.01
3	13	0.01	-0.06	-0.25	0.03	0.04	0.07	0.00	0.01	0.01
4	13	0.04	-0.06	-0.19	-0.10	-0.10	-0.07	-0.03	0.00	0.00
5	3	0.18	0.44	0.00	0.25	0.80	0.00	0.01	0.03	0.00
6	3	-0.55	0.51	0.00	0.31	-0.37	0.00	0.00	-0.02	0.00
7	3	0.01	-0.02	0.00	-0.05	0.09	0.00	0.86	-0.14	0.00
8	19	0.00	0.00	0.00	-0.01	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
9	6	0.00	0.00	0.00	0.01	-0.01	0.00	-0.03	-0.01	0.00
10	6	0.00	0.00	0.00	0.00	-0.01	0.00	-0.08	0.02	-0.01
11	6	0.00	0.00	0.00	0.01	-0.01	0.00	-0.03	-0.01	0.00
12	1	0.00	0.00	0.00	0.01	-0.01	0.00	-0.14	0.04	0.00
13	6	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	-0.10	0.03	0.00
14	1	0.00	0.00	0.00	0.02	-0.01	0.00	-0.22	0.07	-0.01
15	6	0.00	0.00	0.00	0.00	-0.01	0.00	-0.08	0.02	0.01
16	1	0.00	0.00	0.00	0.01	-0.01	0.00	-0.14	0.04	0.00
17	1	0.00	0.00	0.00	0.03	-0.01	0.00	-0.25	0.10	0.00
18	1	0.00	0.00	0.00	0.02	-0.01	0.00	-0.21	0.07	0.00

	25	26	27
	A	A	A
Frequencies --	628.0779	633.5784	718.0951
Red. masses --	5.0203	4.2981	1.2577
Frc consts --	1.1668	1.0166	0.3821
IR Inten --	0.0108	0.0370	6.3379

Atom	AN	X	Y	Z	X	Y	Z	X	Y	Z
1	13	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
2	13	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
3	13	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
4	13	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
5	3	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00

6	3	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
7	3	0.00	0.00	-0.02	0.01	0.01	0.00	0.00	0.00	-0.01
8	19	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
9	6	0.34	-0.14	0.01	-0.10	0.04	-0.01	0.05	-0.01	0.01
10	6	-0.19	0.08	-0.01	0.25	-0.12	0.01	0.08	-0.04	0.00
11	6	-0.34	0.14	0.01	-0.09	0.04	0.01	-0.05	0.01	0.01
12	1	0.37	-0.15	0.02	-0.16	0.07	-0.01	-0.43	0.19	-0.02
13	6	0.00	0.00	0.01	-0.31	0.16	0.00	0.00	0.00	0.00
14	1	-0.37	0.15	-0.01	0.38	-0.19	0.01	-0.48	0.21	0.00
15	6	0.20	-0.09	-0.01	0.25	-0.12	-0.01	-0.08	0.04	0.00
16	1	-0.37	0.15	0.02	-0.16	0.07	0.01	0.43	-0.19	-0.01
17	1	0.00	0.00	0.03	-0.48	0.23	0.00	0.00	0.00	0.00
18	1	0.37	-0.16	-0.01	0.38	-0.19	-0.01	0.48	-0.21	0.00

	28	29	30
	A	A	A
Frequencies --	723.8181	745.5180	840.3611
Red. masses --	1.2482	1.1418	1.2027
Frc consts --	0.3853	0.3739	0.5004
IR Inten --	72.9489	352.0022	0.2141

Atom	AN	X	Y	Z	X	Y	Z	X	Y	Z
1	13	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
2	13	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
3	13	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
4	13	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
5	3	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
6	3	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
7	3	-0.02	-0.01	0.00	-0.04	0.02	0.00	0.00	0.00	0.00
8	19	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
9	6	0.08	-0.04	0.00	0.01	-0.01	0.00	-0.07	-0.01	-0.03
10	6	-0.02	0.01	0.00	0.05	-0.02	0.00	0.05	-0.03	0.02
11	6	0.08	-0.04	0.00	0.01	-0.01	0.00	0.07	0.01	-0.03
12	1	-0.58	0.26	-0.06	-0.23	0.10	-0.02	0.47	-0.27	0.03
13	6	-0.06	0.03	0.00	0.07	-0.03	0.00	0.00	0.00	0.01
14	1	0.02	-0.02	0.00	-0.43	0.20	0.00	-0.38	0.24	0.04
15	6	-0.01	0.01	0.00	0.05	-0.02	0.00	-0.04	0.03	0.02
16	1	-0.58	0.26	0.05	-0.23	0.10	0.02	-0.47	0.27	0.03
17	1	0.36	-0.16	0.00	-0.58	0.27	0.00	0.00	0.00	-0.05
18	1	0.02	-0.02	0.00	-0.43	0.20	0.00	0.37	-0.24	0.05

	31	32	33
	A	A	A
Frequencies --	857.3731	861.0025	864.5067
Red. masses --	1.1954	4.2992	3.9098
Frc consts --	0.5177	1.8778	1.7216
IR Inten --	0.0548	0.5614	0.0385

Atom	AN	X	Y	Z	X	Y	Z	X	Y	Z
1	13	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
2	13	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
3	13	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
4	13	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
5	3	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
6	3	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
7	3	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
8	19	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
9	6	0.02	0.00	0.00	-0.06	-0.13	0.02	0.05	0.21	0.19
10	6	-0.06	0.03	-0.02	-0.03	-0.01	0.27	0.09	0.12	-0.15
11	6	0.02	0.00	0.00	-0.06	-0.13	-0.02	-0.05	-0.21	0.19
12	1	-0.16	0.06	0.02	0.07	0.13	-0.37	0.36	0.14	0.12
13	6	0.06	-0.06	0.00	0.17	0.28	0.00	0.00	0.00	-0.10
14	1	0.47	-0.19	-0.01	-0.02	-0.31	0.19	-0.24	-0.10	-0.26
15	6	-0.06	0.03	0.02	-0.03	-0.01	-0.27	-0.09	-0.12	-0.15
16	1	-0.17	0.06	-0.02	0.07	0.13	0.37	-0.36	-0.14	0.12
17	1	-0.58	0.24	0.00	-0.01	0.36	0.00	0.00	0.00	0.37
18	1	0.48	-0.19	0.02	-0.02	-0.31	-0.18	0.24	0.10	-0.26

	34	35	36
	A	A	A
Frequencies --	1023.5039	1028.1379	1073.1528
Red. masses --	1.4554	1.4327	1.2383
Frc consts --	0.8983	0.8923	0.8402
IR Inten --	15.8115	14.4896	0.1455

Atom	AN	X	Y	Z	X	Y	Z	X	Y	Z
1	13	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
2	13	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
3	13	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
4	13	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
5	3	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
6	3	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
7	3	0.01	0.01	0.00	0.00	0.00	-0.01	0.00	0.00	0.00
8	19	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
9	6	-0.02	-0.04	-0.09	0.03	0.08	0.00	0.01	0.00	0.04
10	6	0.02	0.04	0.04	-0.02	-0.04	0.09	0.03	0.07	0.00
11	6	-0.02	-0.04	0.09	-0.03	-0.08	0.00	-0.01	0.00	0.04
12	1	0.09	0.15	-0.39	0.19	0.30	-0.35	-0.07	-0.06	0.16
13	6	-0.05	-0.10	0.00	0.00	0.00	-0.07	0.00	0.00	-0.09
14	1	0.22	0.46	0.19	-0.11	-0.18	0.04	0.21	0.42	0.13
15	6	0.02	0.04	-0.04	0.02	0.04	0.09	-0.03	-0.07	0.01
16	1	0.09	0.15	0.39	-0.19	-0.30	-0.35	0.08	0.08	0.19
17	1	-0.05	-0.10	0.00	0.00	0.00	-0.61	0.00	0.00	-0.62
18	1	0.22	0.46	-0.19	0.10	0.18	0.04	-0.22	-0.44	0.14

		37			38			39		
		A			A			A		
Frequencies --		1073.4495			1144.2091			1286.5619		
Red. masses --		1.2488			5.8158			1.2794		
Frc consts --		0.8478			4.4861			1.2478		
IR Inten --		7.7728			1.9988			0.0396		
Atom	AN	X	Y	Z	X	Y	Z	X	Y	Z
1	13	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
2	13	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
3	13	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
4	13	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
5	3	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
6	3	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
7	3	0.00	0.00	0.00	0.01	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
8	19	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
9	6	-0.02	-0.05	0.06	0.10	0.22	0.17	-0.02	-0.04	0.06
10	6	0.02	0.04	0.05	-0.04	-0.08	0.28	-0.03	-0.06	-0.02
11	6	-0.02	-0.05	-0.06	0.10	0.22	-0.17	0.02	0.04	0.06
12	1	-0.17	-0.30	0.44	0.11	0.29	0.14	0.12	0.23	-0.35
13	6	0.00	0.02	0.00	-0.12	-0.27	0.00	0.00	0.00	-0.07
14	1	0.16	0.37	0.17	-0.07	-0.09	0.31	0.17	0.38	0.13
15	6	0.02	0.04	-0.05	-0.04	-0.08	-0.28	0.03	0.06	-0.02
16	1	-0.16	-0.30	-0.43	0.11	0.29	-0.14	-0.12	-0.24	-0.35
17	1	0.02	0.01	-0.02	-0.16	-0.30	0.00	0.00	0.00	0.44
18	1	0.14	0.34	-0.16	-0.07	-0.09	-0.31	-0.17	-0.38	0.13

		40			41			42		
		A			A			A		
Frequencies --		1378.5861			1384.5894			1468.7050		
Red. masses --		4.8239			4.9194			2.5821		
Frc consts --		5.4015			5.5565			3.2816		
IR Inten --		0.0257			1.4532			0.0861		
Atom	AN	X	Y	Z	X	Y	Z	X	Y	Z
1	13	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
2	13	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
3	13	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
4	13	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
5	3	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
6	3	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
7	3	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.01
8	19	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
9	6	0.06	0.17	0.00	-0.07	-0.14	0.29	-0.06	-0.14	0.10
10	6	-0.09	-0.22	-0.17	0.11	0.20	-0.06	0.03	0.07	-0.12
11	6	-0.06	-0.17	-0.01	-0.07	-0.14	-0.29	0.06	0.14	0.07
12	1	0.05	0.01	0.21	0.15	0.29	-0.35	0.10	0.20	-0.43

13	6	0.00	0.00	0.33	-0.07	-0.12	0.00	0.01	0.01	0.20
14	1	0.17	0.39	0.04	-0.09	-0.18	-0.20	-0.03	-0.05	-0.19
15	6	0.09	0.22	-0.17	0.10	0.20	0.06	-0.05	-0.10	-0.10
16	1	-0.05	-0.01	0.21	0.15	0.29	0.35	-0.07	-0.15	-0.39
17	1	0.00	0.00	-0.44	-0.05	-0.14	0.00	0.01	0.01	-0.57
18	1	-0.17	-0.39	0.05	-0.09	-0.18	0.20	0.07	0.15	-0.21

	43	44	45
	A	A	A
Frequencies --	1468.9676	3152.7689	3170.3945
Red. masses --	2.5264	1.0865	1.0929
Frc consts --	3.2120	6.3629	6.4725
IR Inten --	1.1679	4.2880	9.8640

Atom	AN	X	Y	Z	X	Y	Z	X	Y	Z
1	13	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
2	13	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
3	13	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
4	13	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
5	3	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
6	3	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
7	3	0.00	0.01	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
8	19	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
9	6	-0.01	-0.04	-0.14	-0.02	-0.05	-0.03	-0.02	-0.04	-0.04
10	6	0.07	0.16	0.09	0.00	0.00	0.01	0.00	0.00	0.02
11	6	0.00	-0.01	0.16	0.02	0.04	-0.03	-0.02	-0.04	0.04
12	1	-0.12	-0.25	0.14	0.20	0.52	0.41	0.18	0.47	0.38
13	6	-0.06	-0.12	0.02	0.00	0.00	0.00	0.01	0.01	0.00
14	1	-0.22	-0.49	-0.14	0.01	0.03	-0.12	0.03	0.07	-0.25
15	6	0.06	0.14	-0.11	0.00	0.00	0.01	0.00	0.00	-0.02
16	1	-0.14	-0.29	-0.22	-0.20	-0.52	0.41	0.19	0.48	-0.39
17	1	-0.06	-0.15	-0.06	0.00	0.00	0.00	-0.08	-0.17	0.00
18	1	-0.21	-0.47	0.10	-0.01	-0.03	-0.12	0.03	0.07	0.25

	46	47	48
	A	A	A
Frequencies --	3183.4197	3202.0152	3212.5731
Red. masses --	1.0906	1.0946	1.1026
Frc consts --	6.5120	6.6123	6.7047
IR Inten --	14.5481	20.1542	6.1455

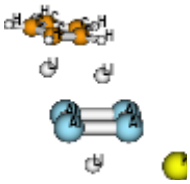
Atom	AN	X	Y	Z	X	Y	Z	X	Y	Z
1	13	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
2	13	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
3	13	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
4	13	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
5	3	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
6	3	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00

7	3	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
8	19	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
9	6	-0.01	-0.02	-0.01	0.00	-0.01	0.00	-0.01	-0.01	-0.01
10	6	0.00	0.01	-0.02	0.01	0.02	-0.06	0.01	0.01	-0.05
11	6	-0.01	-0.02	0.01	0.00	0.01	0.00	-0.01	-0.01	0.01
12	1	0.07	0.18	0.14	0.04	0.10	0.07	0.05	0.13	0.10
13	6	-0.03	-0.07	0.00	0.00	0.00	0.00	0.02	0.04	0.00
14	1	-0.04	-0.08	0.27	-0.09	-0.19	0.66	-0.07	-0.16	0.56
15	6	0.00	0.01	0.02	-0.01	-0.02	-0.06	0.01	0.01	0.05
16	1	0.07	0.18	-0.14	-0.04	-0.10	0.07	0.05	0.13	-0.10
17	1	0.35	0.77	0.00	0.00	0.00	-0.01	-0.21	-0.45	0.00
18	1	-0.04	-0.08	-0.27	0.08	0.20	0.66	-0.07	-0.16	-0.56

$CpKAl_4Li_3^- \rightarrow CpLi + Al_4Li_2K^-$ **-25.9982206**

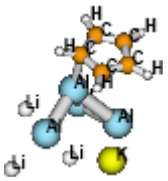
$CpKAl_4Li_3^- \rightarrow Cp^- + Al_4Li_3K$ **-62.05228092**

CpKAl4Li3-C1-f-f-505-slop-B36311+gx.frq+5.9 △E=0.08kcal same

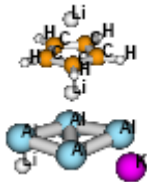


State=1-A\HF=-1786.0137911
D1=2.72268
D2=2.57797
D3=2.73020
D4=2.50564

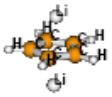
CpKAl4Li3-fusion9876-b36311+gx.frq 36.64583099

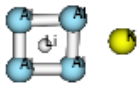


State=1-A\HF=-1785.9555216
CpKAl4Li3-fusion1357-b36311+gx.frq 15.27924099



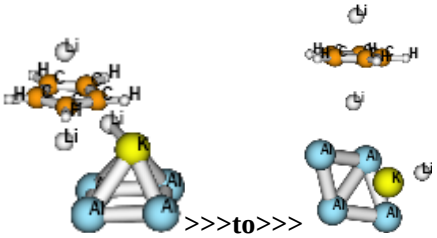
State=1-A\HF=-1785.9895714
CpKAl4Li3-fusion100000-b36311+gx.frq 16.56030265



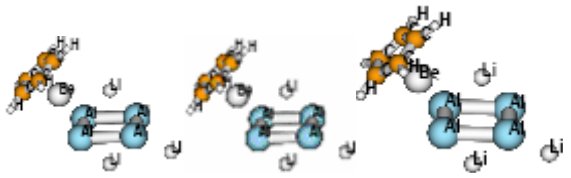


HF=-1785.9875299

CpKAl4Li3-fusion10000-b36311+gx.frq 13.21900016



State=1-A\HF=-1785.9928546



Charge = 0 Multiplicity = 1

Al,0,-2.6029582878,1.0958737287,1.2289525765
Al,0,-0.6595253845,-0.783506047,1.3436934718
Al,0,-0.7028552973,-1.0000882737,-1.1658841549
Al,0,-2.6472379388,0.8765127258,-1.3095676088
Li,0,-4.9342179692,1.0915818641,-0.0081942592
Li,0,-3.0236213911,-1.5199922105,0.1825503666
Li,0,-0.3341717364,1.6736134345,-0.1379868371
Be,0,1.4651524206,-0.251919749,-0.0046920708
C,0,2.9782337357,-0.0039974803,-1.2374272433
C,0,2.9564558622,1.0346870548,-0.2703480665
C,0,3.0398355206,-1.2408266746,-0.5479881483
H,0,2.8905597893,0.1205640374,-2.3066659966
C,0,3.0063440691,0.4389849595,1.0165164606
H,0,2.8830274437,2.0933973296,-0.4791219324
C,0,3.0554109986,-0.9673677171,0.8451916787
H,0,3.0054385559,-2.2207772666,-1.000700422
H,0,2.9447696983,0.9588422576,1.9614419528
H,0,3.037446812,-1.7031352192,1.6355130828

State=1-A\HF=-1200.7511631

		1			2			3		
		A			A			A		
Frequencies --		15.0858			44.3550			51.8368		
Red. masses --		4.3898			7.9365			7.3634		
Frc consts --		0.0006			0.0092			0.0117		
IR Inten --		0.0305			1.6397			0.4523		
Atom	AN	X	Y	Z	X	Y	Z	X	Y	Z
1	13	0.00	-0.05	0.08	0.15	-0.01	-0.05	-0.17	0.02	0.06
2	13	0.00	0.06	0.08	-0.03	0.01	0.19	-0.02	-0.06	-0.02
3	13	0.00	0.06	-0.08	-0.04	0.00	0.19	0.02	-0.07	0.04
4	13	0.00	-0.05	-0.08	0.13	0.00	-0.04	0.19	0.02	-0.06
5	3	0.00	-0.04	0.01	0.11	-0.02	-0.43	0.01	0.37	-0.03
6	3	0.00	0.11	0.00	-0.17	0.01	-0.07	-0.01	-0.07	0.00
7	3	0.00	-0.11	0.00	0.17	0.03	0.12	0.01	-0.56	0.01
8	4	0.00	0.00	0.00	-0.04	0.01	0.16	0.00	-0.14	0.01
9	6	0.04	0.03	0.20	-0.12	0.00	-0.09	-0.18	0.09	0.02
10	6	0.01	0.19	0.02	-0.28	0.00	-0.07	-0.03	0.08	0.00

11	6	0.02	-0.18	0.10	0.07	-0.01	-0.13	-0.08	0.09	0.00
12	1	0.07	0.07	0.37	-0.14	0.00	-0.07	-0.34	0.08	0.04
13	6	-0.03	0.07	-0.18	-0.18	0.00	-0.09	0.15	0.09	-0.03
14	1	0.02	0.38	0.04	-0.42	0.01	-0.04	-0.06	0.08	0.00
15	6	-0.03	-0.16	-0.13	0.04	-0.01	-0.13	0.12	0.09	-0.02
16	1	0.03	-0.34	0.19	0.23	-0.02	-0.14	-0.16	0.09	0.02
17	1	-0.05	0.15	-0.34	-0.26	0.00	-0.07	0.30	0.07	-0.05
18	1	-0.05	-0.29	-0.25	0.16	-0.02	-0.15	0.23	0.09	-0.04

	4	5	6
	A	A	A
Frequencies --	85.4711	101.0146	122.7260
Red. masses --	9.6233	8.0565	6.7223
Frc consts --	0.0414	0.0484	0.0597
IR Inten --	2.7237	7.1909	0.0013

Atom	AN	X	Y	Z	X	Y	Z	X	Y	Z
1	13	0.03	0.04	0.00	-0.06	-0.01	0.18	0.06	0.11	0.07
2	13	0.15	0.24	-0.07	0.03	0.00	-0.02	-0.02	-0.10	0.14
3	13	-0.15	0.24	0.07	0.03	0.00	-0.02	0.02	-0.10	-0.14
4	13	-0.03	0.04	0.00	-0.06	0.01	0.18	-0.05	0.11	-0.07
5	3	0.00	-0.10	0.01	-0.03	0.00	-0.84	0.00	-0.15	0.00
6	3	0.00	-0.65	0.00	-0.08	0.00	0.03	0.00	0.00	0.00
7	3	0.00	-0.10	0.00	-0.16	0.01	-0.05	0.00	0.39	0.00
8	4	0.00	-0.22	0.00	0.02	0.00	-0.15	0.00	-0.27	0.00
9	6	-0.14	-0.10	0.02	0.07	0.00	-0.02	-0.23	0.00	0.04
10	6	-0.02	-0.11	0.00	0.16	0.00	-0.04	-0.03	0.00	0.00
11	6	-0.07	-0.10	0.01	-0.04	0.00	0.00	-0.12	0.01	0.02
12	1	-0.25	-0.11	0.04	0.09	0.00	-0.03	-0.44	-0.01	0.07
13	6	0.13	-0.10	-0.02	0.10	0.00	-0.02	0.21	0.00	-0.03
14	1	-0.03	-0.12	0.00	0.24	0.00	-0.05	-0.04	-0.02	0.00
15	6	0.09	-0.10	-0.01	-0.02	0.00	0.00	0.15	0.01	-0.02
16	1	-0.13	-0.10	0.02	-0.12	0.00	0.01	-0.24	0.00	0.04
17	1	0.23	-0.11	-0.03	0.14	0.00	-0.04	0.40	-0.01	-0.07
18	1	0.17	-0.10	-0.03	-0.09	0.00	0.01	0.29	0.00	-0.05

	7	8	9
	A	A	A
Frequencies --	141.3336	142.8619	155.7644
Red. masses --	8.5098	7.4988	9.8134
Frc consts --	0.1002	0.0902	0.1403
IR Inten --	0.2612	0.6520	2.1079

Atom	AN	X	Y	Z	X	Y	Z	X	Y	Z
1	13	0.08	-0.10	-0.03	0.13	0.02	0.05	0.13	0.17	-0.14
2	13	-0.07	0.10	-0.20	0.13	-0.02	-0.03	0.02	-0.03	0.05
3	13	0.12	0.10	0.18	0.09	-0.01	-0.10	-0.02	-0.03	-0.06
4	13	-0.01	-0.10	0.05	0.16	0.01	0.04	-0.13	0.17	0.14

5	3	0.04	-0.09	0.00	0.16	0.03	-0.02	0.00	-0.50	0.00
6	3	0.04	0.61	0.01	0.20	-0.12	0.06	0.01	0.25	0.00
7	3	0.00	0.06	-0.04	-0.02	-0.01	-0.17	0.00	-0.74	-0.01
8	4	-0.04	-0.21	-0.03	-0.19	0.05	-0.11	0.00	-0.01	0.00
9	6	-0.22	-0.03	0.04	-0.16	0.01	0.03	-0.01	-0.01	0.00
10	6	-0.04	-0.03	0.01	-0.10	0.01	0.02	0.00	-0.01	0.00
11	6	-0.17	-0.03	0.03	-0.30	0.01	0.06	0.00	-0.01	0.00
12	1	-0.37	-0.04	0.06	-0.12	0.01	0.02	-0.02	-0.01	0.01
13	6	0.12	-0.03	-0.02	-0.21	0.01	0.04	0.00	-0.01	0.00
14	1	-0.03	-0.04	0.00	0.00	0.01	0.00	-0.01	0.00	0.00
15	6	0.05	-0.03	-0.01	-0.34	0.01	0.06	0.00	-0.01	0.00
16	1	-0.28	-0.04	0.05	-0.41	0.01	0.07	-0.01	-0.01	0.00
17	1	0.28	-0.04	-0.05	-0.22	0.01	0.03	0.01	-0.01	0.00
18	1	0.13	-0.04	-0.02	-0.47	0.01	0.08	0.00	-0.01	0.00

	10	11	12
	A	A	A
Frequencies --	169.3272	172.5073	210.5589
Red. masses --	21.2037	5.3144	12.5046
Frc consts --	0.3582	0.0932	0.3266
IR Inten --	0.2363	1.5731	3.9883

Atom	AN	X	Y	Z	X	Y	Z	X	Y	Z
1	13	0.05	0.16	0.40	0.04	0.00	-0.03	0.10	-0.05	-0.13
2	13	0.27	-0.15	-0.31	-0.03	-0.01	0.14	0.32	-0.04	0.09
3	13	-0.26	-0.15	0.28	-0.04	0.00	0.15	-0.32	-0.04	-0.09
4	13	-0.05	0.16	-0.39	0.04	0.01	-0.04	-0.10	-0.05	0.13
5	3	0.00	-0.28	-0.01	0.00	-0.01	0.15	0.00	0.69	0.00
6	3	0.02	0.29	0.01	-0.21	0.00	-0.12	0.00	0.42	0.00
7	3	-0.01	-0.01	-0.01	0.04	-0.01	0.07	0.00	0.03	0.00
8	4	0.00	0.12	0.02	-0.03	0.00	-0.23	0.00	-0.01	0.00
9	6	0.07	-0.02	-0.01	0.08	0.00	-0.08	-0.07	-0.04	0.01
10	6	-0.02	-0.02	0.01	0.27	0.00	-0.11	-0.01	-0.05	0.00
11	6	0.05	-0.03	0.00	-0.19	0.00	-0.03	-0.03	-0.04	0.01
12	1	0.15	-0.02	-0.02	0.14	0.00	-0.11	-0.11	-0.04	0.02
13	6	-0.08	-0.02	0.02	0.12	0.00	-0.09	0.07	-0.04	-0.01
14	1	-0.03	-0.02	0.01	0.50	0.00	-0.16	-0.01	-0.05	0.00
15	6	-0.04	-0.03	0.01	-0.17	0.00	-0.03	0.04	-0.04	-0.01
16	1	0.11	-0.02	-0.01	-0.39	0.00	-0.01	-0.07	-0.05	0.01
17	1	-0.17	-0.02	0.04	0.21	0.00	-0.12	0.11	-0.04	-0.02
18	1	-0.08	-0.02	0.02	-0.34	0.00	-0.02	0.08	-0.05	-0.02

	13	14	15
	A	A	A
Frequencies --	231.2191	235.3974	257.8824
Red. masses --	7.5141	15.4070	8.1228
Frc consts --	0.2367	0.5030	0.3183

IR Inten --		5.0492			3.9930			2.5412		
Atom	AN	X	Y	Z	X	Y	Z	X	Y	Z
1	13	0.05	-0.06	0.08	-0.21	0.03	-0.14	-0.02	0.00	0.08
2	13	0.04	0.06	-0.02	0.36	-0.07	0.15	0.04	-0.01	-0.14
3	13	0.04	-0.06	-0.02	0.35	0.07	0.15	0.04	0.01	-0.14
4	13	0.05	0.06	0.08	-0.21	-0.03	-0.14	-0.01	0.00	0.08
5	3	0.10	0.00	0.18	-0.42	0.00	-0.09	0.06	-0.01	0.05
6	3	-0.58	0.00	-0.50	0.11	0.00	-0.46	-0.35	0.00	-0.28
7	3	-0.30	0.00	-0.40	-0.20	0.00	0.19	0.50	0.00	0.67
8	4	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	-0.05	0.01	0.00	0.05
9	6	-0.01	0.00	0.03	-0.07	0.00	0.04	-0.04	0.00	-0.01
10	6	-0.06	0.00	0.04	-0.10	0.00	0.04	-0.02	0.00	-0.01
11	6	0.08	0.00	0.02	-0.04	0.00	0.03	-0.06	0.00	0.00
12	1	-0.02	0.00	0.04	-0.10	0.00	0.04	-0.05	0.00	-0.01
13	6	-0.02	0.00	0.03	-0.08	0.00	0.04	-0.03	0.00	-0.01
14	1	-0.13	0.00	0.06	-0.15	0.00	0.05	-0.02	0.00	-0.01
15	6	0.07	0.00	0.02	-0.04	0.00	0.03	-0.06	0.00	0.00
16	1	0.13	0.00	0.01	-0.05	0.00	0.03	-0.08	0.00	0.00
17	1	-0.04	0.00	0.04	-0.11	0.00	0.04	-0.04	0.00	-0.01
18	1	0.12	0.00	0.01	-0.05	0.00	0.03	-0.08	0.00	0.00

	16	17	18
	A	A	A
Frequencies --	264.4637	292.7380	332.4956
Red. masses --	14.5081	16.1395	15.6884
Frc consts --	0.5979	0.8149	1.0219
IR Inten --	3.2947	18.6613	3.7965

Atom	AN	X	Y	Z	X	Y	Z	X	Y	Z
1	13	0.37	0.00	0.12	0.04	0.46	0.07	-0.05	0.06	-0.06
2	13	-0.18	-0.03	-0.05	0.00	-0.12	-0.01	0.11	0.44	0.00
3	13	0.18	-0.03	0.05	0.00	0.12	-0.01	0.12	-0.44	0.00
4	13	-0.37	0.00	-0.12	0.04	-0.46	0.07	-0.05	-0.06	-0.07
5	3	0.00	0.67	0.00	-0.41	0.00	0.02	-0.19	0.00	-0.02
6	3	0.00	-0.32	0.00	-0.26	0.00	-0.05	-0.36	0.00	0.55
7	3	0.01	-0.26	0.01	0.32	0.00	-0.44	0.26	0.00	-0.07
8	4	0.00	-0.03	0.00	-0.03	0.00	0.07	0.04	0.00	-0.01
9	6	0.02	0.02	0.00	0.01	0.00	0.00	-0.02	0.00	0.00
10	6	0.00	0.02	0.00	0.00	0.00	0.00	-0.01	0.00	0.00
11	6	0.01	0.02	0.00	0.02	0.00	-0.01	-0.04	0.00	0.00
12	1	0.03	0.02	0.00	0.01	0.00	0.00	-0.04	0.00	0.01
13	6	-0.02	0.02	0.00	0.00	0.00	0.00	-0.02	0.00	0.00
14	1	0.00	0.02	0.00	0.01	0.00	0.00	0.01	0.00	-0.01
15	6	-0.01	0.02	0.00	0.02	0.00	-0.01	-0.04	0.00	0.00
16	1	0.01	0.02	-0.01	0.04	0.00	-0.01	-0.08	0.00	0.01
17	1	-0.03	0.02	0.00	0.00	0.00	0.00	-0.03	0.00	0.00

18	1	-0.02	0.02	0.01	0.04	0.00	-0.01	-0.08	0.00	0.01

	19	20	21
	A	A	A
Frequencies --	342.4330	358.7595	382.2970
Red. masses --	8.3115	9.5403	8.5542
Frc consts --	0.5742	0.7235	0.7366
IR Inten --	43.7762	7.7731	79.9396

Atom	AN	X	Y	Z	X	Y	Z	X	Y	Z
1	13	-0.07	-0.01	0.07	-0.07	-0.19	0.00	-0.16	0.10	-0.03
2	13	-0.06	0.14	0.04	0.06	-0.14	0.02	0.04	-0.03	0.04
3	13	-0.06	-0.14	0.04	0.06	0.14	0.02	0.04	0.03	0.04
4	13	-0.06	0.01	0.07	-0.07	0.19	0.00	-0.15	-0.10	-0.03
5	3	0.04	0.00	-0.01	-0.17	0.00	0.01	0.94	0.00	0.00
6	3	0.54	0.00	-0.59	-0.25	0.00	0.29	-0.11	0.00	0.10
7	3	0.44	0.00	-0.26	0.62	0.00	-0.52	0.07	0.00	-0.12
8	4	0.00	0.00	0.09	-0.02	0.00	0.16	0.01	0.00	-0.01
9	6	0.00	0.00	-0.02	-0.01	0.00	-0.02	-0.01	0.00	0.00
10	6	0.02	0.00	-0.02	0.02	0.00	-0.02	-0.01	0.00	0.00
11	6	-0.03	0.00	-0.01	-0.04	0.00	-0.01	-0.01	0.00	0.00
12	1	0.01	0.00	-0.02	0.00	0.00	-0.02	-0.01	0.00	0.00
13	6	0.01	0.00	-0.02	0.00	0.00	-0.02	-0.01	0.00	0.00
14	1	0.08	0.00	-0.03	0.09	0.00	-0.03	0.00	0.00	0.00
15	6	-0.03	0.00	-0.01	-0.04	0.00	-0.01	-0.01	0.00	0.00
16	1	-0.04	0.00	-0.01	-0.04	0.00	-0.01	-0.01	0.00	0.00
17	1	0.02	0.00	-0.02	0.01	0.00	-0.02	-0.01	0.00	0.00
18	1	-0.04	0.00	-0.01	-0.04	0.00	-0.01	-0.01	0.00	0.00

	22	23	24
	A	A	A
Frequencies --	404.4828	413.9282	600.6568
Red. masses --	7.0921	7.8877	4.9121
Frc consts --	0.6836	0.7963	1.0442
IR Inten --	1.9136	24.1999	0.2726

Atom	AN	X	Y	Z	X	Y	Z	X	Y	Z
1	13	0.00	0.00	0.01	0.00	0.01	-0.01	0.00	0.00	0.00
2	13	-0.03	-0.01	0.00	0.03	0.01	-0.03	0.00	0.00	0.00
3	13	0.03	-0.01	0.00	0.03	-0.01	-0.03	0.00	0.00	0.00
4	13	0.00	0.00	-0.01	0.00	-0.02	-0.01	0.00	0.00	0.00
5	3	0.00	0.00	0.00	0.02	0.00	-0.01	0.00	0.00	0.00
6	3	0.00	-0.04	0.00	-0.01	0.00	-0.01	0.00	0.00	0.00
7	3	0.00	-0.01	0.00	-0.26	0.00	0.02	-0.01	0.00	0.00
8	4	0.00	0.75	0.00	0.01	0.00	0.80	-0.08	-0.01	0.05
9	6	-0.20	-0.07	0.03	0.00	-0.01	-0.10	0.29	-0.01	-0.04
10	6	-0.03	-0.11	0.00	0.20	0.00	-0.10	-0.36	0.00	0.05
11	6	-0.08	-0.10	0.03	-0.13	0.01	-0.05	-0.09	0.02	0.01

12	1	-0.31	-0.08	0.04	0.05	-0.01	-0.14	0.47	0.01	-0.06
13	6	0.20	-0.08	-0.02	0.04	0.02	-0.10	0.31	0.01	-0.05
14	1	-0.03	-0.13	0.00	0.26	-0.01	-0.12	-0.38	0.00	0.06
15	6	0.11	-0.09	-0.04	-0.12	-0.01	-0.05	-0.13	-0.01	0.01
16	1	-0.13	-0.12	0.05	-0.13	0.03	-0.06	-0.09	0.04	-0.01
17	1	0.30	-0.09	-0.04	0.10	0.02	-0.14	0.49	0.00	-0.08
18	1	0.17	-0.11	-0.06	-0.11	-0.03	-0.07	-0.15	-0.03	0.00

	25	26	27
	A	A	A
Frequencies --	608.6922	633.1671	833.4392
Red. masses --	4.5899	3.6616	1.2652
Frc consts --	1.0020	0.8649	0.5178
IR Inten --	0.0958	72.9992	16.9920

Atom	AN	X	Y	Z	X	Y	Z	X	Y	Z
1	13	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
2	13	0.00	0.00	0.00	-0.02	-0.01	0.00	0.00	0.00	0.00
3	13	0.00	0.00	0.00	-0.02	0.01	0.00	0.00	0.00	0.00
4	13	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
5	3	0.00	0.00	0.00	-0.01	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
6	3	0.00	0.00	0.00	-0.01	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
7	3	0.00	0.00	0.00	-0.02	0.00	-0.04	0.00	0.00	0.00
8	4	0.00	-0.02	-0.01	0.56	0.00	-0.01	-0.01	-0.01	-0.01
9	6	-0.22	0.02	0.05	0.00	0.01	-0.01	-0.07	0.00	0.01
10	6	0.02	-0.01	0.00	-0.06	0.00	-0.01	0.04	0.00	-0.01
11	6	0.34	0.00	-0.08	-0.06	0.01	0.01	-0.08	0.00	0.02
12	1	-0.30	0.01	0.09	-0.31	-0.01	0.04	0.45	0.02	-0.09
13	6	0.18	0.02	-0.04	0.01	-0.01	-0.02	0.10	-0.01	-0.02
14	1	0.03	-0.03	-0.01	-0.40	0.00	0.06	-0.31	0.02	0.07
15	6	-0.33	0.00	0.08	-0.07	-0.01	0.01	0.02	0.00	-0.01
16	1	0.51	0.01	-0.10	-0.39	0.01	0.05	0.50	0.02	-0.06
17	1	0.26	0.02	-0.08	-0.30	0.01	0.04	-0.62	0.03	0.13
18	1	-0.47	0.02	0.11	-0.40	-0.01	0.05	-0.11	0.02	0.02

	28	29	30
	A	A	A
Frequencies --	834.5969	869.5220	872.2852
Red. masses --	1.2560	1.3610	4.3966
Frc consts --	0.5155	0.6063	1.9710
IR Inten --	17.3519	592.6684	3.6656

Atom	AN	X	Y	Z	X	Y	Z	X	Y	Z
1	13	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
2	13	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
3	13	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
4	13	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
5	3	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00

6	3	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
7	3	0.01	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
8	4	-0.01	0.01	-0.02	-0.14	0.00	0.02	0.02	0.00	0.00
9	6	0.07	0.00	-0.01	0.06	0.02	0.00	0.00	-0.20	0.14
10	6	0.09	0.00	-0.01	0.04	-0.01	0.01	-0.01	-0.12	-0.05
11	6	-0.04	0.00	0.01	0.07	0.02	-0.01	0.08	0.18	0.25
12	1	-0.41	-0.02	0.08	-0.44	-0.01	0.06	0.09	-0.27	-0.23
13	6	-0.01	0.00	0.00	0.05	-0.03	-0.02	-0.03	-0.10	-0.17
14	1	-0.62	-0.01	0.13	-0.36	0.02	0.09	0.04	0.38	0.00
15	6	-0.09	0.00	0.02	0.05	0.01	-0.03	-0.08	0.24	-0.17
16	1	0.26	0.00	-0.03	-0.47	-0.03	0.09	-0.07	0.10	0.32
17	1	0.11	-0.01	-0.02	-0.44	-0.01	0.08	0.04	-0.28	0.22
18	1	0.56	-0.02	-0.07	-0.44	0.05	0.06	0.18	0.08	-0.35

	31	32	33
	A	A	A
Frequencies --	872.8636	914.4981	923.4009
Red. masses --	4.3059	1.1508	1.1706
Frc consts --	1.9329	0.5670	0.5881
IR Inten --	11.8410	0.5838	0.2914

Atom	AN	X	Y	Z	X	Y	Z	X	Y	Z
1	13	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
2	13	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
3	13	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
4	13	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
5	3	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
6	3	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
7	3	-0.01	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
8	4	0.03	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
9	6	0.01	0.25	0.03	-0.06	0.01	0.00	-0.04	0.02	0.01
10	6	0.02	-0.05	0.32	0.06	0.00	0.01	0.00	0.00	0.00
11	6	-0.04	0.07	-0.11	0.03	0.00	-0.01	0.07	-0.01	-0.03
12	1	-0.06	0.19	-0.28	0.49	0.04	-0.14	0.36	0.05	-0.02
13	6	0.00	-0.28	-0.06	-0.06	-0.01	0.00	0.04	0.01	0.00
14	1	0.33	0.00	0.27	-0.57	0.00	0.14	0.00	-0.07	0.00
15	6	-0.06	0.00	-0.17	0.03	0.01	-0.01	-0.07	-0.02	0.03
16	1	0.17	-0.33	0.09	-0.22	-0.06	0.05	-0.60	-0.01	0.04
17	1	-0.05	-0.19	-0.27	0.49	-0.03	-0.15	-0.34	0.05	0.03
18	1	0.19	0.32	0.09	-0.24	0.06	0.07	0.60	-0.03	-0.05

	34	35	36
	A	A	A
Frequencies --	1035.6765	1037.2605	1086.5226
Red. masses --	1.4353	1.4527	1.2295
Frc consts --	0.9071	0.9209	0.8552
IR Inten --	6.2967	7.8768	0.0514

Atom	AN	X	Y	Z	X	Y	Z	X	Y	Z
1	13	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
2	13	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
3	13	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
4	13	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
5	3	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
6	3	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
7	3	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
8	4	0.00	0.02	0.00	0.01	0.00	0.02	0.00	0.00	0.00
9	6	0.00	-0.10	0.02	0.01	0.04	0.05	0.02	-0.01	0.07
10	6	0.00	0.07	0.02	-0.01	0.02	-0.11	0.00	-0.08	-0.01
11	6	-0.02	0.02	-0.07	-0.02	-0.08	-0.06	-0.01	0.03	0.01
12	1	0.00	-0.09	0.10	0.11	0.15	0.56	0.06	0.07	0.47
13	6	-0.01	-0.08	-0.06	0.01	-0.07	0.03	-0.02	0.01	-0.08
14	1	0.02	0.66	0.08	-0.02	0.09	-0.11	-0.01	-0.57	-0.07
15	6	0.02	-0.02	0.08	-0.01	0.08	-0.03	0.02	0.04	0.01
16	1	-0.06	0.40	-0.30	0.00	-0.32	0.07	0.03	0.17	-0.07
17	1	-0.03	-0.01	-0.24	0.10	-0.27	0.48	-0.08	0.20	-0.50
18	1	0.08	0.26	0.34	0.03	0.36	0.21	0.00	0.23	0.18

	37	38	39
	A	A	A
Frequencies --	1088.9616	1150.9980	1292.6172
Red. masses --	1.2302	5.7123	1.2797
Frc consts --	0.8595	4.4587	1.2598
IR Inten --	0.2763	6.6625	0.0005

Atom	AN	X	Y	Z	X	Y	Z	X	Y	Z
1	13	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
2	13	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
3	13	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
4	13	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
5	3	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
6	3	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
7	3	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
8	4	0.00	0.00	0.00	0.02	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
9	6	0.00	0.03	0.05	0.01	-0.28	0.06	0.01	0.01	0.07
10	6	0.02	-0.01	0.02	0.05	-0.03	0.29	0.00	0.07	0.01
11	6	-0.01	0.07	-0.04	-0.05	-0.15	-0.25	0.01	-0.06	0.03
12	1	0.10	0.11	0.39	-0.03	-0.31	0.12	-0.08	-0.09	-0.43
13	6	-0.01	-0.04	0.03	0.02	0.26	0.12	-0.01	0.03	-0.06
14	1	-0.04	-0.05	0.03	0.02	-0.04	0.33	-0.01	-0.43	-0.05
15	6	0.00	-0.05	-0.06	-0.04	0.20	-0.22	-0.01	-0.05	-0.05
16	1	-0.06	0.53	-0.30	-0.10	-0.14	-0.29	-0.04	0.38	-0.22
17	1	0.09	-0.16	0.27	-0.02	0.29	0.17	0.07	-0.18	0.40
18	1	-0.09	-0.41	-0.37	-0.10	0.21	-0.25	0.05	0.33	0.29

		40			41			42		
		A			A			A		
Frequencies --		1386.5256			1390.4061			1474.1810		
Red. masses --		4.9025			5.0213			2.5468		
Frc consts --		5.5530			5.7194			3.2609		
IR Inten --		0.2889			0.0613			3.3774		
Atom	AN	X	Y	Z	X	Y	Z	X	Y	Z
1	13	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
2	13	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
3	13	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
4	13	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
5	3	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
6	3	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
7	3	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
8	4	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	-0.01	0.01
9	6	0.03	-0.08	0.23	-0.06	-0.16	-0.24	0.02	0.13	0.07
10	6	0.00	0.00	-0.16	0.01	0.35	0.03	-0.02	-0.11	-0.11
11	6	-0.02	0.30	-0.13	0.05	0.00	0.17	0.01	-0.18	0.07
12	1	-0.03	-0.19	-0.26	0.08	-0.04	0.38	-0.06	0.07	-0.31
13	6	0.02	0.05	0.23	0.05	-0.20	0.22	0.03	-0.03	0.19
14	1	-0.07	0.04	-0.15	-0.01	-0.48	-0.06	-0.02	0.36	-0.09
15	6	-0.02	-0.27	-0.17	-0.05	0.02	-0.18	-0.02	0.08	-0.11
16	1	0.04	-0.38	0.26	0.00	0.16	0.10	-0.05	0.46	-0.30
17	1	-0.01	0.24	-0.18	-0.08	0.06	-0.39	-0.08	0.27	-0.45
18	1	0.06	0.30	0.34	0.02	0.21	-0.03	-0.01	0.14	-0.10

		43			44			45		
		A			A			A		
Frequencies --		1474.6445			3215.5476			3231.1576		
Red. masses --		2.5602			1.0917			1.0907		
Frc consts --		3.2802			6.6509			6.7092		
IR Inten --		3.3340			1.0665			0.0733		
Atom	AN	X	Y	Z	X	Y	Z	X	Y	Z
1	13	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
2	13	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
3	13	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
4	13	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
5	3	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
6	3	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
7	3	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
8	4	0.00	0.01	0.01	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
9	6	0.03	-0.04	0.18	0.00	-0.02	0.01	0.00	0.03	-0.01
10	6	-0.01	0.15	-0.07	-0.02	0.01	-0.08	0.00	0.00	0.01
11	6	-0.03	-0.02	-0.14	0.00	0.00	0.00	-0.01	-0.02	-0.04
12	1	-0.08	-0.19	-0.45	-0.02	0.24	-0.05	0.03	-0.37	0.07

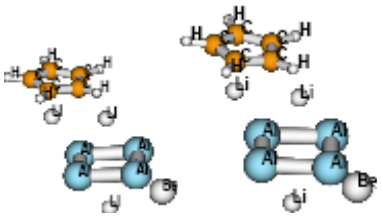
13	6	0.00	-0.14	0.01	0.00	0.02	0.01	0.00	0.04	0.02
14	1	-0.03	-0.40	-0.15	0.18	-0.10	0.89	-0.01	0.01	-0.07
15	6	0.02	0.15	0.12	0.00	0.00	0.00	0.00	-0.03	0.04
16	1	-0.01	-0.21	-0.07	0.00	-0.02	-0.03	0.05	0.26	0.46
17	1	-0.05	-0.05	-0.25	-0.04	-0.27	-0.12	-0.06	-0.45	-0.19
18	1	-0.07	-0.41	-0.38	0.00	0.04	-0.04	-0.04	0.39	-0.42

	46	47	48
	A	A	A
Frequencies --	3238.9470	3243.8998	3253.4297
Red. masses --	1.0960	1.0968	1.1050
Frc consts --	6.7744	6.8000	6.8913
IR Inten --	0.2608	0.0012	0.2322

Atom	AN	X	Y	Z	X	Y	Z	X	Y	Z
1	13	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
2	13	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
3	13	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
4	13	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
5	3	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
6	3	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
7	3	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
8	4	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
9	6	0.00	-0.04	0.00	0.00	-0.06	0.01	0.00	-0.04	0.01
10	6	0.01	0.00	0.03	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.02
11	6	0.01	0.03	0.04	0.00	-0.01	-0.02	-0.01	-0.03	-0.05
12	1	-0.04	0.42	-0.08	-0.06	0.63	-0.12	-0.04	0.44	-0.09
13	6	0.01	0.05	0.02	-0.01	-0.04	-0.02	0.00	0.03	0.01
14	1	-0.07	0.04	-0.33	-0.01	0.00	-0.05	-0.04	0.02	-0.17
15	6	0.00	-0.02	0.01	0.00	-0.03	0.04	0.00	0.04	-0.04
16	1	-0.05	-0.27	-0.47	0.03	0.13	0.24	0.06	0.29	0.51
17	1	-0.07	-0.54	-0.23	0.06	0.41	0.18	-0.04	-0.30	-0.13
18	1	-0.02	0.16	-0.17	-0.04	0.36	-0.41	0.04	-0.37	0.41

$CpBeAl_4Li_3 \rightarrow CpBe^+ + Al_4Li_3^-$ **-162.488314**

$CpBeAl_4Li_3 \rightarrow Cp^- + Al_4Li_3Be^+$ **-157.7569551**



Charge = 0 Multiplicity = 1

Al,0,-0.9896147262,1.2121612476,1.3702570588

Al,0,-2.3805539948,1.352014164,-0.8501083562

Al,0,-2.3848345477,-1.3205640006,-0.8907537741

Al,0,-0.9934516504,-1.2571499378,1.3341883808
Li,0,1.7551157776,-0.0073914089,0.9340238541
Li,0,0.2766626961,0.0002946338,-1.040808636
Li,0,-3.550272102,-0.0215221983,1.5167203581
Be,0,-4.2135231716,0.0200071053,-0.9704810564
C,0,3.337554462,1.1498723861,-0.0573882659
C,0,3.8624036361,-0.0011813404,0.5776726265
C,0,2.5067856052,0.7220022033,-1.124581988
H,0,3.5572218061,2.1783108743,0.1972583219
C,0,3.3408064525,-1.1435823646,-0.0752664946
H,0,4.5525966285,-0.0067127512,1.4119012466
C,0,2.5087780373,-0.701349105,-1.1356524685
H,0,2.0624164432,1.3796438735,-1.8672604974
H,0,3.5626933947,-2.1753166904,0.1636521045
H,0,2.0665900892,-1.3486666362,-1.8887171577

State=1-A\HF=-1200.7246835

		1			2			3		
		A			A			A		
Frequencies --		22.0673			37.3330			51.2467		
Red. masses --		4.1010			9.0111			12.5340		
Frc consts --		0.0012			0.0074			0.0194		
IR Inten --		0.0078			0.7333			2.0546		
Atom	AN	X	Y	Z	X	Y	Z	X	Y	Z
1	13	0.01	-0.05	0.05	-0.16	0.13	0.11	-0.10	0.01	0.29
2	13	-0.01	0.07	0.07	-0.09	-0.04	0.06	0.37	-0.06	0.01
3	13	0.01	0.07	-0.06	0.10	-0.04	-0.06	0.08	-0.11	0.02
4	13	-0.01	-0.05	-0.05	0.17	0.14	-0.10	-0.06	0.03	0.12
5	3	0.00	0.01	0.00	0.00	0.02	0.00	-0.05	0.00	0.00
6	3	0.00	0.01	0.00	0.00	0.69	0.00	-0.09	0.02	0.05
7	3	0.00	-0.04	0.00	0.00	-0.18	-0.01	-0.12	0.07	-0.24
8	4	0.00	0.06	0.00	0.00	-0.16	-0.01	0.29	0.15	-0.41
9	6	-0.11	0.05	-0.16	0.09	-0.11	-0.05	-0.13	0.03	-0.13
10	6	0.00	0.19	0.00	0.00	-0.12	0.00	-0.07	0.04	-0.15
11	6	-0.07	-0.19	-0.10	0.05	-0.11	-0.03	-0.19	0.01	-0.07
12	1	-0.20	0.10	-0.31	0.17	-0.12	-0.11	-0.13	0.03	-0.14
13	6	0.11	0.04	0.16	-0.10	-0.12	0.05	-0.10	0.03	-0.12
14	1	0.00	0.37	0.00	0.00	-0.14	0.00	-0.02	0.05	-0.20
15	6	0.07	-0.19	0.10	-0.06	-0.11	0.03	-0.17	0.01	-0.07
16	1	-0.10	-0.33	-0.21	0.15	-0.11	-0.10	-0.24	0.00	-0.05
17	1	0.20	0.10	0.31	-0.18	-0.12	0.10	-0.07	0.03	-0.13
18	1	0.10	-0.33	0.21	-0.16	-0.11	0.10	-0.20	0.01	-0.04
			4			5			6	
			A			A			A	

Frequencies --		53.2660			81.3044			93.3422		
Red. masses --		18.3681			5.0121			8.1332		
Frc consts --		0.0307			0.0195			0.0418		
IR Inten --		0.4086			0.0006			2.9538		
Atom	AN	X	Y	Z	X	Y	Z	X	Y	Z
1	13	0.02	-0.06	-0.11	0.03	0.02	-0.05	-0.10	0.16	0.04
2	13	-0.25	0.24	0.03	0.01	0.00	-0.07	0.01	0.05	0.02
3	13	0.49	0.21	0.00	-0.01	0.00	0.07	0.00	0.05	-0.01
4	13	-0.11	-0.06	0.34	-0.02	0.02	0.04	0.12	0.16	-0.04
5	3	-0.02	-0.02	0.00	0.00	-0.42	0.00	-0.02	-0.13	-0.01
6	3	-0.05	-0.09	0.03	0.00	0.34	0.00	0.00	-0.59	-0.02
7	3	-0.07	-0.16	-0.13	0.00	0.01	0.00	0.01	-0.61	0.00
8	4	0.16	-0.37	-0.23	0.00	-0.01	0.00	0.00	0.04	0.01
9	6	-0.02	-0.07	-0.06	-0.21	-0.01	0.13	-0.10	-0.04	0.06
10	6	-0.03	-0.09	-0.09	0.00	0.03	0.00	-0.02	-0.04	0.01
11	6	-0.08	-0.03	-0.03	-0.13	-0.05	0.08	-0.06	-0.04	0.03
12	1	0.01	-0.08	-0.05	-0.40	0.01	0.23	-0.18	-0.04	0.12
13	6	-0.09	-0.07	-0.08	0.20	0.00	-0.12	0.07	-0.04	-0.06
14	1	0.00	-0.12	-0.11	0.00	0.06	0.00	-0.03	-0.03	0.02
15	6	-0.12	-0.03	-0.05	0.13	-0.05	-0.08	0.05	-0.04	-0.04
16	1	-0.09	-0.01	-0.01	-0.20	-0.05	0.11	-0.12	-0.03	0.08
17	1	-0.11	-0.08	-0.10	0.39	0.01	-0.23	0.14	-0.03	-0.11
18	1	-0.16	-0.01	-0.04	0.19	-0.05	-0.11	0.13	-0.03	-0.10

		7			8			9		
		A			A			A		
Frequencies --		98.1752			119.6118			137.4204		
Red. masses --		7.0832			14.7388			5.0982		
Frc consts --		0.0402			0.1242			0.0567		
IR Inten --		2.0032			0.0023			6.1799		
Atom	AN	X	Y	Z	X	Y	Z	X	Y	Z
1	13	0.16	-0.01	-0.06	0.20	0.19	0.12	-0.04	-0.01	0.05
2	13	0.08	0.00	0.01	-0.15	-0.16	0.26	-0.04	0.01	0.10
3	13	0.09	0.00	0.01	0.14	-0.15	-0.27	-0.04	-0.01	0.10
4	13	0.15	-0.01	-0.05	-0.20	0.19	-0.12	-0.04	0.00	0.05
5	3	-0.29	0.02	-0.08	0.00	-0.14	0.00	-0.11	0.00	-0.24
6	3	-0.05	0.03	-0.22	0.00	-0.29	-0.01	0.02	0.01	-0.28
7	3	0.20	0.04	0.09	0.00	0.54	0.01	-0.14	0.01	-0.12
8	4	0.07	0.00	0.11	0.00	-0.19	0.00	0.01	0.00	-0.17
9	6	-0.23	0.00	0.07	-0.09	-0.02	0.06	0.03	0.00	0.01
10	6	-0.32	0.00	0.15	0.00	-0.01	0.00	-0.10	0.00	0.11
11	6	-0.08	0.00	-0.04	-0.05	-0.02	0.04	0.23	0.00	-0.15
12	1	-0.26	0.00	0.10	-0.16	-0.01	0.12	-0.02	0.00	0.06
13	6	-0.25	0.00	0.09	0.08	-0.01	-0.06	0.03	0.00	0.01
14	1	-0.44	0.00	0.25	0.00	-0.01	0.00	-0.26	0.00	0.25

15	6	-0.10	0.00	-0.03	0.05	-0.02	-0.04	0.24	0.00	-0.15
16	1	0.02	0.00	-0.10	-0.11	-0.01	0.08	0.40	-0.01	-0.25
17	1	-0.29	0.00	0.13	0.16	-0.01	-0.12	-0.01	0.00	0.05
18	1	0.00	0.00	-0.08	0.11	-0.01	-0.08	0.40	0.01	-0.25

	10	11	12
	A	A	A
Frequencies --	159.5413	174.5717	230.3193
Red. masses --	11.1171	9.9330	17.7800
Frc consts --	0.1667	0.1784	0.5557
IR Inten --	0.2616	0.7689	0.7834

Atom	AN	X	Y	Z	X	Y	Z	X	Y	Z
1	13	-0.27	-0.07	0.12	0.17	-0.02	-0.12	-0.10	-0.10	-0.06
2	13	-0.09	0.06	-0.10	-0.11	0.03	0.18	-0.02	0.49	0.02
3	13	0.09	0.06	0.10	-0.11	-0.04	0.18	-0.02	-0.49	0.01
4	13	0.27	-0.07	-0.12	0.18	0.02	-0.12	-0.10	0.10	-0.06
5	3	0.00	-0.04	0.00	0.06	0.00	0.01	-0.02	0.00	-0.16
6	3	0.00	-0.31	0.00	-0.12	-0.01	-0.02	-0.22	0.00	-0.10
7	3	0.00	0.74	0.02	-0.17	0.01	-0.39	0.34	0.00	0.26
8	4	0.00	-0.06	0.01	0.06	0.01	-0.51	0.42	0.00	0.07
9	6	-0.07	-0.03	0.05	0.00	0.00	0.03	0.04	0.00	0.02
10	6	0.00	-0.03	0.00	0.09	0.00	-0.04	0.06	0.00	0.01
11	6	-0.05	-0.03	0.04	-0.13	0.00	0.14	0.01	0.00	0.05
12	1	-0.14	-0.03	0.10	0.03	0.00	0.01	0.04	0.00	0.02
13	6	0.07	-0.03	-0.06	0.00	0.00	0.03	0.04	0.00	0.02
14	1	0.01	-0.03	-0.01	0.19	0.00	-0.12	0.07	0.00	0.00
15	6	0.04	-0.03	-0.03	-0.13	0.00	0.14	0.01	0.00	0.05
16	1	-0.10	-0.02	0.08	-0.25	0.01	0.22	-0.01	0.00	0.06
17	1	0.14	-0.03	-0.11	0.03	0.00	0.01	0.05	0.00	0.02
18	1	0.10	-0.02	-0.07	-0.25	-0.01	0.22	-0.01	0.00	0.06

	13	14	15
	A	A	A
Frequencies --	242.8688	245.3123	257.7808
Red. masses --	6.5533	23.2212	11.9690
Frc consts --	0.2277	0.8233	0.4686
IR Inten --	7.4673	2.8041	2.5817

Atom	AN	X	Y	Z	X	Y	Z	X	Y	Z
1	13	0.01	-0.01	-0.07	0.27	0.00	0.39	0.14	0.04	0.22
2	13	-0.01	0.07	0.05	-0.13	0.04	-0.38	-0.20	0.04	-0.17
3	13	-0.01	-0.07	0.04	0.16	0.04	0.40	-0.19	-0.03	-0.15
4	13	0.01	0.02	-0.07	-0.28	0.02	-0.42	0.12	-0.05	0.19
5	3	0.08	0.00	0.45	0.00	-0.07	0.01	0.04	0.00	0.04
6	3	0.31	-0.01	0.52	0.01	-0.03	-0.02	-0.08	0.00	0.31
7	3	-0.17	0.00	-0.11	-0.04	-0.26	0.00	0.64	-0.01	-0.04
8	4	0.07	0.00	0.03	0.00	-0.18	0.02	-0.08	0.00	-0.38

9	6	-0.09	0.00	-0.04	0.06	0.02	-0.04	-0.03	0.00	0.00
10	6	-0.16	0.00	0.02	0.00	0.02	0.00	-0.07	0.00	0.04
11	6	0.07	0.00	-0.16	0.03	0.03	-0.03	0.05	0.00	-0.06
12	1	-0.10	0.00	-0.03	0.11	0.02	-0.08	-0.04	0.00	0.01
13	6	-0.09	0.00	-0.04	-0.06	0.02	0.04	-0.03	0.00	0.00
14	1	-0.24	0.00	0.09	0.01	0.02	-0.01	-0.13	0.00	0.09
15	6	0.07	0.00	-0.16	-0.04	0.02	0.03	0.05	0.00	-0.06
16	1	0.17	-0.02	-0.23	0.06	0.02	-0.05	0.10	-0.01	-0.10
17	1	-0.10	0.00	-0.03	-0.11	0.02	0.08	-0.04	0.00	0.02
18	1	0.17	0.02	-0.23	-0.08	0.02	0.06	0.09	0.01	-0.09

	16	17	18
	A	A	A
Frequencies --	287.9749	315.8395	320.7907
Red. masses --	10.4110	6.0862	7.0771
Frc consts --	0.5087	0.3577	0.4291
IR Inten --	5.4739	0.1014	74.9322

Atom	AN	X	Y	Z	X	Y	Z	X	Y	Z
1	13	-0.14	-0.01	-0.14	0.03	-0.01	0.01	0.05	-0.01	-0.03
2	13	0.03	-0.14	0.13	0.00	0.00	-0.02	0.03	-0.02	-0.04
3	13	0.03	0.13	0.13	0.00	0.00	0.02	0.03	0.02	-0.03
4	13	-0.14	0.01	-0.14	-0.03	-0.01	-0.01	0.05	0.01	-0.03
5	3	0.02	0.00	0.11	0.00	0.75	0.01	0.02	0.01	-0.39
6	3	0.02	0.00	0.10	0.00	0.08	0.00	-0.45	-0.01	0.50
7	3	0.60	-0.01	0.51	0.00	-0.04	0.00	-0.39	-0.01	0.41
8	4	0.10	0.01	-0.43	0.00	0.02	0.00	0.04	0.00	-0.12
9	6	0.00	0.00	-0.01	-0.13	-0.08	0.12	0.01	0.00	0.02
10	6	-0.01	0.00	0.00	0.00	-0.08	0.00	-0.03	0.00	0.05
11	6	0.02	0.00	-0.02	-0.12	-0.09	0.09	0.05	0.00	-0.02
12	1	0.00	0.00	-0.01	-0.24	-0.07	0.19	-0.02	0.00	0.05
13	6	0.00	0.00	-0.01	0.13	-0.07	-0.12	0.02	0.00	0.02
14	1	-0.01	0.00	0.00	0.00	-0.09	0.00	-0.11	0.00	0.12
15	6	0.02	0.00	-0.03	0.12	-0.08	-0.09	0.05	0.00	-0.02
16	1	0.03	-0.01	-0.04	-0.14	-0.07	0.11	0.07	-0.02	-0.04
17	1	0.01	0.00	-0.01	0.24	-0.07	-0.19	-0.01	0.00	0.04
18	1	0.03	0.01	-0.04	0.14	-0.07	-0.11	0.07	0.02	-0.04

	19	20	21
	A	A	A
Frequencies --	334.1502	353.4231	380.4725
Red. masses --	7.6319	26.5499	11.3506
Frc consts --	0.5021	1.9539	0.9681
IR Inten --	7.0961	0.2522	5.4489

Atom	AN	X	Y	Z	X	Y	Z	X	Y	Z
1	13	0.06	0.01	0.05	-0.04	0.68	-0.05	0.01	0.02	0.02
2	13	-0.03	0.05	-0.06	0.04	0.12	0.06	0.22	0.13	0.03

3	13	-0.03	-0.04	-0.06	0.04	-0.12	0.06	-0.22	0.13	-0.03
4	13	0.06	-0.01	0.05	-0.04	-0.68	-0.07	-0.01	0.01	-0.02
5	3	0.01	0.00	0.35	-0.03	0.00	-0.02	0.00	0.03	0.00
6	3	0.28	0.00	-0.39	-0.12	0.00	0.04	0.00	-0.02	0.00
7	3	-0.39	-0.01	0.62	-0.02	0.00	0.02	0.00	0.06	0.00
8	4	-0.02	0.01	-0.28	0.01	0.01	-0.02	0.00	-0.93	-0.01
9	6	-0.01	0.00	-0.01	0.02	0.00	0.00	-0.01	0.00	0.00
10	6	0.01	0.00	-0.03	0.02	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
11	6	-0.02	0.00	0.00	0.01	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
12	1	0.01	0.00	-0.03	0.02	0.00	-0.01	-0.02	0.00	0.01
13	6	-0.01	0.00	-0.01	0.02	0.00	0.00	0.01	0.00	0.00
14	1	0.07	0.00	-0.08	0.02	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
15	6	-0.02	0.00	0.00	0.01	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
16	1	-0.03	0.01	0.01	0.01	0.00	0.00	-0.02	0.00	0.02
17	1	0.01	0.00	-0.03	0.02	0.00	-0.01	0.02	0.00	-0.01
18	1	-0.03	-0.01	0.01	0.01	0.00	0.00	0.02	0.00	-0.02

	22	23	24
	A	A	A
Frequencies --	393.1541	474.4325	508.8049
Red. masses --	6.6153	10.3914	5.6247
Frc consts --	0.6025	1.3781	0.8579
IR Inten --	88.8432	1.4283	75.5677

Atom	AN	X	Y	Z	X	Y	Z	X	Y	Z
1	13	-0.01	0.01	0.01	0.00	0.03	0.01	-0.02	0.01	0.00
2	13	-0.02	0.02	0.00	-0.15	-0.13	-0.04	0.00	-0.01	0.00
3	13	-0.02	-0.02	0.00	-0.15	0.13	-0.04	0.00	0.01	0.00
4	13	-0.01	-0.01	0.01	0.00	-0.04	0.01	-0.02	-0.01	0.00
5	3	-0.10	0.00	-0.56	-0.07	0.00	0.03	0.81	0.00	-0.14
6	3	0.71	0.00	0.20	0.02	0.00	-0.05	0.01	0.00	-0.14
7	3	-0.01	0.00	0.07	-0.10	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
8	4	0.01	0.00	-0.05	0.93	0.00	0.18	0.04	0.00	0.02
9	6	-0.01	0.00	0.01	0.01	0.00	0.00	-0.11	0.01	0.05
10	6	0.00	0.00	-0.02	0.01	0.00	-0.01	-0.09	0.00	0.05
11	6	-0.08	0.01	0.06	0.00	0.00	0.01	-0.01	0.00	-0.02
12	1	-0.07	0.00	0.05	0.02	0.00	-0.01	-0.24	0.01	0.14
13	6	-0.02	0.00	0.01	0.01	0.00	0.00	-0.11	-0.01	0.05
14	1	-0.04	0.00	0.02	0.03	0.00	-0.02	-0.23	0.00	0.17
15	6	-0.08	-0.01	0.06	0.00	0.00	0.01	-0.01	0.00	-0.02
16	1	-0.16	0.02	0.11	0.00	0.00	0.01	-0.11	0.01	0.05
17	1	-0.07	0.00	0.05	0.02	0.00	-0.01	-0.24	-0.01	0.14
18	1	-0.16	-0.02	0.11	0.00	0.00	0.01	-0.11	-0.01	0.05

	25	26	27
	A	A	A
Frequencies --	620.7120	635.8765	734.4794

Red. masses --		5.3805			4.0279			1.2329		
Frc consts --		1.2214			0.9596			0.3919		
IR Inten --		0.0219			0.8303			0.7600		
Atom	AN	X	Y	Z	X	Y	Z	X	Y	Z
1	13	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
2	13	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
3	13	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
4	13	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
5	3	0.00	0.05	0.00	0.06	0.00	0.02	0.00	0.01	0.00
6	3	0.00	0.00	0.00	0.01	0.00	-0.02	0.00	0.02	0.00
7	3	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
8	4	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
9	6	-0.18	0.01	0.12	0.19	-0.01	-0.17	0.07	0.00	-0.06
10	6	0.00	-0.02	0.00	-0.26	0.00	0.23	0.00	0.00	0.00
11	6	0.32	-0.01	-0.22	-0.08	0.01	0.06	0.04	-0.01	-0.01
12	1	-0.37	0.01	0.29	0.32	-0.01	-0.27	-0.34	0.01	0.25
13	6	0.18	0.01	-0.12	0.19	0.01	-0.17	-0.06	0.00	0.06
14	1	0.00	-0.03	0.00	-0.42	0.00	0.36	0.00	-0.01	0.00
15	6	-0.32	-0.01	0.22	-0.08	-0.01	0.06	-0.04	-0.01	0.01
16	1	0.22	-0.02	-0.17	-0.16	0.00	0.10	-0.45	0.03	0.32
17	1	0.37	0.01	-0.29	0.32	0.01	-0.27	0.34	0.02	-0.25
18	1	-0.22	-0.02	0.17	-0.17	0.00	0.10	0.46	0.04	-0.32

			28			29			30	
			A			A			A	
Frequencies --		752.7580			774.9380			842.7521		
Red. masses --		1.2528			1.1591			1.3618		
Frc consts --		0.4183			0.4101			0.5699		
IR Inten --		116.4345			275.3691			0.3477		
Atom	AN	X	Y	Z	X	Y	Z	X	Y	Z
1	13	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
2	13	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
3	13	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
4	13	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
5	3	-0.03	0.00	0.00	-0.04	0.00	0.03	0.00	0.00	0.00
6	3	0.00	0.00	0.00	-0.01	0.00	0.00	0.00	-0.01	0.00
7	3	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
8	4	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
9	6	-0.01	0.00	0.01	0.04	0.00	-0.03	0.04	-0.04	-0.05
10	6	-0.04	0.00	0.04	0.06	0.00	-0.05	0.00	-0.02	0.00
11	6	0.07	0.00	-0.06	0.01	0.00	-0.01	-0.07	0.06	-0.03
12	1	0.03	0.00	-0.03	-0.38	0.01	0.32	-0.34	-0.07	0.40
13	6	-0.01	0.00	0.01	0.04	0.00	-0.03	-0.04	-0.04	0.05
14	1	0.26	0.00	-0.21	-0.47	0.00	0.40	0.00	0.09	0.00
15	6	0.07	0.00	-0.06	0.01	0.00	-0.01	0.07	0.06	0.03

16	1	-0.53	0.09	0.38	-0.19	0.02	0.13	0.30	-0.04	-0.34
17	1	0.04	0.00	-0.04	-0.38	-0.02	0.32	0.34	-0.06	-0.40
18	1	-0.52	-0.10	0.38	-0.19	-0.03	0.12	-0.29	-0.05	0.33

	31	32	33
	A	A	A
Frequencies --	861.2321	867.0553	884.6326
Red. masses --	4.1331	2.9587	1.2379
Frc consts --	1.8062	1.3105	0.5708
IR Inten --	3.3629	0.0467	0.2511

Atom	AN	X	Y	Z	X	Y	Z	X	Y	Z
1	13	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
2	13	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
3	13	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
4	13	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
5	3	0.00	0.00	0.00	0.00	-0.01	0.00	0.00	0.00	0.00
6	3	-0.01	0.00	0.00	0.00	-0.02	0.00	0.00	0.00	0.00
7	3	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
8	4	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
9	6	0.00	0.27	0.02	0.12	0.12	0.07	0.05	0.02	-0.04
10	6	-0.19	0.00	-0.25	0.00	0.09	0.00	-0.09	0.00	0.04
11	6	0.10	0.02	0.10	0.07	-0.15	0.15	0.00	0.01	0.02
12	1	0.30	0.18	0.11	-0.33	0.21	0.12	-0.37	0.02	0.33
13	6	0.00	-0.27	0.02	-0.12	0.12	-0.07	0.05	-0.02	-0.04
14	1	-0.35	0.00	-0.13	0.00	-0.29	0.00	0.50	0.00	-0.46
15	6	0.10	-0.02	0.10	-0.07	-0.15	-0.15	0.00	-0.01	0.02
16	1	-0.18	-0.34	-0.05	0.43	-0.14	-0.05	0.10	-0.03	-0.08
17	1	0.31	-0.18	0.11	0.33	0.21	-0.12	-0.36	-0.03	0.33
18	1	-0.19	0.34	-0.04	-0.43	-0.15	0.05	0.10	0.03	-0.08

	34	35	36
	A	A	A
Frequencies --	1025.4025	1030.0541	1076.7688
Red. masses --	1.4773	1.4416	1.2374
Frc consts --	0.9152	0.9012	0.8453
IR Inten --	31.3028	14.4318	0.7326

Atom	AN	X	Y	Z	X	Y	Z	X	Y	Z
1	13	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
2	13	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
3	13	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
4	13	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
5	3	0.01	0.00	0.00	0.00	0.01	0.00	0.00	0.00	0.00
6	3	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
7	3	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
8	4	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
9	6	0.03	-0.04	0.03	-0.03	-0.09	-0.05	0.04	-0.01	0.06

10	6	-0.07	0.00	-0.09	0.00	0.06	0.00	0.00	0.09	0.00
11	6	-0.03	0.10	-0.03	0.05	0.00	0.07	0.01	-0.04	0.00
12	1	0.32	-0.19	0.38	-0.19	-0.03	-0.16	0.32	-0.15	0.35
13	6	0.03	0.04	0.04	0.03	-0.09	0.05	-0.04	-0.01	-0.06
14	1	-0.08	0.01	-0.08	0.00	0.56	0.01	0.00	0.66	0.01
15	6	-0.03	-0.10	-0.03	-0.05	0.01	-0.07	-0.01	-0.03	0.00
16	1	0.14	0.40	0.13	0.28	0.35	0.24	-0.10	-0.15	-0.03
17	1	0.33	0.19	0.39	0.17	-0.04	0.14	-0.31	-0.14	-0.35
18	1	0.13	-0.39	0.11	-0.29	0.36	-0.24	0.10	-0.14	0.02

	37	38	39
	A	A	A
Frequencies --	1078.0728	1140.9247	1288.8608
Red. masses --	1.2471	5.8096	1.2786
Frc consts --	0.8540	4.4557	1.2514
IR Inten --	4.3118	10.8895	0.0162

Atom	AN	X	Y	Z	X	Y	Z	X	Y	Z
1	13	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
2	13	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
3	13	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
4	13	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
5	3	0.00	0.00	0.00	-0.01	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
6	3	0.01	0.00	0.00	0.01	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
7	3	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
8	4	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
9	6	0.03	-0.05	0.04	0.05	0.28	0.08	-0.04	0.02	-0.05
10	6	0.01	0.00	0.02	0.19	0.00	0.23	0.00	0.07	0.00
11	6	-0.03	-0.05	-0.05	-0.15	0.18	-0.18	-0.03	-0.06	-0.04
12	1	0.24	-0.16	0.32	0.07	0.32	0.03	0.26	-0.13	0.33
13	6	0.03	0.04	0.04	0.05	-0.28	0.07	0.04	0.02	0.05
14	1	0.03	-0.01	0.00	0.23	0.00	0.24	0.00	-0.45	0.00
15	6	-0.03	0.06	-0.05	-0.15	-0.18	-0.18	0.03	-0.06	0.04
16	1	-0.24	-0.42	-0.26	-0.15	0.14	-0.26	0.17	0.35	0.20
17	1	0.24	0.16	0.33	0.07	-0.33	0.03	-0.26	-0.13	-0.34
18	1	-0.24	0.43	-0.25	-0.15	-0.14	-0.26	-0.17	0.35	-0.20

	40	41	42
	A	A	A
Frequencies --	1373.9748	1387.5898	1467.8654
Red. masses --	4.4690	4.7269	2.4980
Frc consts --	4.9707	5.3623	3.1712
IR Inten --	0.0140	3.8919	3.4334

Atom	AN	X	Y	Z	X	Y	Z	X	Y	Z
1	13	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
2	13	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
3	13	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00

4	13	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
5	3	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.01	0.00	0.00
6	3	0.00	0.00	0.00	-0.01	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
7	3	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
8	4	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
9	6	0.14	-0.16	0.19	-0.15	-0.06	-0.15	0.10	-0.11	0.13
10	6	0.00	0.31	0.00	0.10	0.00	0.09	-0.09	0.02	-0.11
11	6	-0.08	-0.01	-0.16	0.11	0.29	0.12	0.00	0.14	-0.01
12	1	-0.26	0.06	-0.34	0.11	-0.19	0.11	-0.32	0.10	-0.41
13	6	-0.14	-0.15	-0.19	-0.15	0.06	-0.15	0.11	0.08	0.14
14	1	0.00	-0.41	0.00	0.08	0.00	0.12	-0.10	-0.07	-0.14
15	6	0.08	-0.01	0.16	0.11	-0.29	0.11	-0.02	-0.13	-0.04
16	1	-0.08	0.25	0.06	-0.24	-0.36	-0.26	-0.20	-0.22	-0.24
17	1	0.26	0.05	0.34	0.11	0.19	0.11	-0.34	-0.14	-0.43
18	1	0.08	0.25	-0.05	-0.24	0.37	-0.26	-0.17	0.13	-0.20

	43	44	45
	A	A	A
Frequencies --	1468.5011	3146.8204	3164.0622
Red. masses --	2.5418	1.0875	1.0958
Frc consts --	3.2296	6.3451	6.4637
IR Inten --	0.3874	0.4116	6.4629

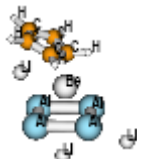
Atom	AN	X	Y	Z	X	Y	Z	X	Y	Z
1	13	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
2	13	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
3	13	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
4	13	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
5	3	0.00	0.01	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
6	3	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
7	3	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
8	4	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
9	6	-0.07	-0.10	-0.08	0.00	-0.01	0.00	0.00	0.01	0.00
10	6	0.01	0.21	0.01	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
11	6	0.09	0.06	0.12	-0.02	0.03	-0.04	0.03	-0.04	0.04
12	1	0.11	-0.22	0.12	0.01	0.08	0.02	-0.02	-0.12	-0.03
13	6	0.04	-0.12	0.05	0.00	-0.01	0.00	0.00	-0.01	0.00
14	1	0.01	-0.59	0.01	0.00	0.00	0.00	0.02	0.00	0.02
15	6	-0.08	0.09	-0.11	0.03	0.03	0.04	0.02	0.04	0.04
16	1	-0.10	-0.38	-0.13	0.28	-0.42	0.47	-0.28	0.43	-0.48
17	1	-0.04	-0.19	-0.03	-0.02	0.08	-0.02	-0.02	0.12	-0.03
18	1	0.15	-0.42	0.18	-0.29	-0.42	-0.50	-0.27	-0.41	-0.47

	46	47	48
	A	A	A
Frequencies --	3199.2906	3214.8126	3224.1122
Red. masses --	1.0895	1.0946	1.1023

Frc consts	--	6.5704			6.6652			6.7512		
IR Inten	--	4.5752			7.2633			5.7907		
Atom	AN	X	Y	Z	X	Y	Z	X	Y	Z
1	13	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
2	13	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
3	13	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
4	13	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
5	3	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
6	3	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
7	3	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
8	4	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
9	6	0.01	0.03	0.01	-0.01	-0.06	-0.01	-0.01	-0.05	-0.01
10	6	-0.05	0.00	-0.06	0.00	0.00	0.00	-0.03	0.00	-0.04
11	6	0.00	0.01	-0.01	0.00	0.00	0.01	0.01	-0.01	0.01
12	1	-0.08	-0.36	-0.09	0.14	0.66	0.16	0.12	0.55	0.13
13	6	0.01	-0.03	0.01	0.01	-0.06	0.01	-0.01	0.05	-0.01
14	1	0.53	0.00	0.64	0.00	-0.01	0.00	0.35	0.00	0.42
15	6	0.00	-0.01	-0.01	0.00	0.00	-0.01	0.00	0.01	0.01
16	1	0.03	-0.05	0.06	-0.03	0.04	-0.06	-0.04	0.06	-0.06
17	1	-0.08	0.36	-0.09	-0.15	0.67	-0.15	0.12	-0.55	0.13
18	1	0.03	0.05	0.06	0.03	0.04	0.06	-0.04	-0.05	-0.06

$CpBeAl_4Li_3 \rightarrow CpLi + Al_4Li_2Be$ **-18.5953655**

$CpBeAl_4Li_3 \rightarrow Cp^- + Al_4Li_3Be^+$ **-141.1407545**



Charge = 0 Multiplicity = 1

Al,0,-2.1203708711,-0.5766668266,1.297072823
Al,0,0.2810798842,-1.8109941505,1.2390745168
Al,0,0.2690895522,-1.7887096135,-1.2615255048
Al,0,-2.1365449197,-0.5533266484,-1.2786724781
Li,0,2.1568128671,-0.0076010021,-0.0107296707
Li,0,-4.4148037255,-0.8830719224,0.0209612183
Li,0,-1.8299472664,-3.1413505312,-0.0117257643
Be,0,-0.2215007624,0.3669191173,-0.0102883175
C,0,0.5188968797,2.0835727653,0.0029059476
C,0,1.3949409819,2.055248932,1.1585474706
C,0,1.3950742414,2.0707811727,-1.1528705632
H,0,-0.4193602109,2.6298385169,0.006500889
C,0,2.7150360827,2.0002103112,0.7205837258
H,0,1.0681516143,2.0897050297,2.1893704335
C,0,2.7151298185,2.0097971939,-0.7156377864

H,0,1.0684237776,2.1189502382,-2.1831525623

H,0,3.5929434359,1.9703906651,1.3554688635

H,0,3.5928933903,1.9879113044,-1.3510661098

State=1-A\HF=-1200.7440927

		1			2			3		
		A			A			A		
Frequencies --		-96.9749			47.9979			64.2679		
Red. masses --		8.0392			4.4696			6.7845		
Frc consts --		0.0445			0.0061			0.0165		
IR Inten --		3.0517			2.3985			0.1312		
Atom	AN	X	Y	Z	X	Y	Z	X	Y	Z
1	13	0.02	-0.08	0.06	0.06	0.02	-0.03	-0.11	0.11	-0.06
2	13	0.05	-0.06	0.09	0.05	0.02	0.10	-0.15	0.05	-0.02
3	13	-0.05	0.05	0.09	-0.04	-0.03	0.10	0.14	-0.05	-0.03
4	13	-0.02	0.08	0.06	-0.06	-0.02	-0.03	0.11	-0.10	-0.07
5	3	0.00	0.02	-0.03	0.00	0.01	-0.05	0.00	-0.01	-0.35
6	3	0.01	0.00	0.07	0.00	0.00	-0.16	0.00	0.00	0.05
7	3	0.00	0.00	-0.06	0.00	0.00	-0.13	0.00	0.00	0.30
8	4	0.00	0.02	-0.77	0.00	0.00	-0.11	0.00	0.00	-0.10
9	6	0.00	-0.01	-0.13	0.00	-0.01	0.18	0.00	0.00	0.08
10	6	0.14	-0.01	-0.05	-0.09	-0.18	0.04	0.15	-0.15	0.08
11	6	-0.15	0.01	-0.05	0.07	0.18	0.05	-0.13	0.15	0.09
12	1	0.00	-0.01	-0.16	0.00	-0.01	0.37	0.00	0.00	0.17
13	6	0.07	0.00	0.07	-0.07	-0.10	-0.16	0.10	-0.10	0.09
14	1	0.26	-0.01	-0.07	-0.16	-0.34	0.10	0.28	-0.30	0.08
15	6	-0.09	0.00	0.07	0.05	0.11	-0.16	-0.08	0.09	0.09
16	1	-0.27	0.01	-0.07	0.15	0.33	0.10	-0.26	0.30	0.10
17	1	0.14	0.01	0.14	-0.12	-0.19	-0.30	0.19	-0.20	0.09
18	1	-0.16	0.00	0.14	0.10	0.21	-0.29	-0.16	0.18	0.09

		4			5			6		
		A			A			A		
Frequencies --		79.5664			81.6088			104.8045		
Red. masses --		6.7317			7.7605			8.2693		
Frc consts --		0.0251			0.0305			0.0535		
IR Inten --		5.4280			8.6368			0.0914		
Atom	AN	X	Y	Z	X	Y	Z	X	Y	Z
1	13	0.12	-0.01	0.00	0.05	0.10	-0.01	-0.13	0.06	0.06
2	13	0.08	-0.03	-0.02	-0.02	0.10	0.00	0.01	0.09	0.05
3	13	0.10	-0.03	0.00	-0.01	0.10	-0.01	0.00	-0.09	0.04
4	13	0.12	-0.02	-0.01	0.05	0.10	0.01	0.15	-0.06	0.05
5	3	-0.09	0.35	0.00	0.01	0.04	0.00	0.00	0.02	-0.14
6	3	-0.05	0.22	0.00	0.58	-0.66	-0.02	0.01	-0.01	0.19
7	3	0.10	-0.02	0.06	-0.08	-0.11	0.03	0.00	0.01	-0.88

8	4	0.14	-0.01	0.02	0.01	0.05	0.01	0.01	0.00	0.11
9	6	-0.03	-0.20	0.00	-0.08	-0.09	0.00	-0.01	-0.01	-0.05
10	6	-0.16	-0.05	0.01	-0.09	-0.09	0.00	0.05	-0.01	-0.02
11	6	-0.17	-0.06	0.00	-0.09	-0.09	0.00	-0.07	0.00	-0.02
12	1	0.02	-0.21	-0.01	-0.14	-0.06	0.00	-0.01	-0.01	-0.07
13	6	-0.29	0.10	0.02	-0.08	-0.10	0.00	0.02	-0.01	0.03
14	1	-0.12	-0.09	0.01	-0.09	-0.08	0.00	0.11	-0.03	-0.03
15	6	-0.29	0.10	0.00	-0.08	-0.10	0.00	-0.06	0.01	0.03
16	1	-0.12	-0.11	0.00	-0.09	-0.09	0.00	-0.13	0.01	-0.03
17	1	-0.37	0.20	0.01	-0.07	-0.10	0.00	0.06	-0.02	0.06
18	1	-0.38	0.19	0.02	-0.07	-0.11	0.00	-0.10	0.02	0.06

	7	8	9
	A	A	A
Frequencies --	124.4535	131.3500	163.8130
Red. masses --	10.0021	7.8930	14.4879
Frc consts --	0.0913	0.0802	0.2291
IR Inten --	0.8571	2.7966	1.6777

Atom	AN	X	Y	Z	X	Y	Z	X	Y	Z
1	13	-0.21	0.09	0.01	0.19	-0.07	0.07	0.03	0.17	0.31
2	13	0.17	-0.16	-0.01	-0.03	0.02	0.07	-0.02	0.13	-0.20
3	13	0.16	-0.16	0.00	0.04	-0.03	0.07	0.01	-0.12	-0.21
4	13	-0.19	0.08	-0.01	-0.19	0.07	0.07	-0.02	-0.18	0.31
5	3	-0.13	-0.03	0.01	-0.01	0.00	-0.51	-0.01	-0.01	0.19
6	3	0.13	-0.37	0.00	0.00	0.00	-0.27	0.00	0.02	-0.72
7	3	0.17	0.38	0.00	0.01	0.01	-0.03	0.00	0.01	-0.02
8	4	-0.02	-0.24	0.00	0.00	-0.02	0.32	0.00	-0.01	-0.25
9	6	0.11	-0.03	0.00	0.00	0.00	-0.17	0.00	0.00	0.03
10	6	0.04	0.06	0.00	0.15	-0.02	-0.10	-0.01	-0.02	0.01
11	6	0.05	0.06	0.00	-0.14	0.03	-0.10	0.02	0.01	0.01
12	1	0.28	-0.09	0.00	0.01	0.00	-0.21	0.01	-0.01	0.05
13	6	-0.07	0.18	0.00	0.10	-0.03	0.00	-0.02	0.00	-0.01
14	1	0.07	0.04	0.00	0.28	-0.06	-0.13	-0.02	-0.03	0.02
15	6	-0.07	0.18	0.00	-0.11	0.04	0.00	0.02	0.00	-0.01
16	1	0.08	0.04	0.00	-0.27	0.06	-0.12	0.03	0.02	0.02
17	1	-0.15	0.27	0.00	0.20	-0.06	0.07	-0.04	0.01	-0.02
18	1	-0.14	0.27	0.01	-0.21	0.08	0.07	0.03	0.00	-0.02

	10	11	12
	A	A	A
Frequencies --	173.4543	188.5080	196.8052
Red. masses --	14.2155	7.3288	12.4854
Frc consts --	0.2520	0.1534	0.2849
IR Inten --	0.0137	0.4660	11.8847

Atom	AN	X	Y	Z	X	Y	Z	X	Y	Z
1	13	-0.13	0.17	0.04	-0.07	0.14	-0.03	0.06	-0.11	0.01

2	13	0.36	-0.19	0.01	0.03	0.00	0.03	0.15	0.34	-0.09
3	13	-0.35	0.19	0.02	-0.01	-0.02	-0.04	-0.19	-0.32	-0.10
4	13	0.13	-0.19	0.03	-0.06	0.14	0.03	-0.03	0.09	0.01
5	3	0.01	0.01	-0.10	-0.05	0.01	0.01	-0.02	-0.03	0.25
6	3	0.01	-0.01	-0.09	-0.03	0.16	0.03	0.00	-0.02	0.49
7	3	0.01	0.01	0.27	-0.30	-0.70	0.01	0.04	0.10	0.25
8	4	0.00	0.03	0.24	0.09	-0.18	0.01	-0.01	-0.02	0.05
9	6	-0.02	0.02	-0.12	0.16	-0.14	-0.01	0.00	-0.01	-0.05
10	6	0.13	-0.09	-0.09	0.12	-0.07	0.00	0.11	-0.12	-0.04
11	6	-0.15	0.10	-0.09	0.10	-0.06	-0.01	-0.10	0.11	-0.04
12	1	-0.03	0.02	-0.10	0.27	-0.18	0.00	0.01	-0.01	0.02
13	6	0.09	-0.07	-0.05	0.01	0.05	0.00	0.06	-0.06	-0.04
14	1	0.24	-0.16	-0.10	0.16	-0.11	-0.01	0.20	-0.22	-0.04
15	6	-0.09	0.06	-0.05	0.00	0.06	0.00	-0.06	0.07	-0.04
16	1	-0.27	0.19	-0.09	0.13	-0.08	-0.01	-0.19	0.20	-0.03
17	1	0.18	-0.14	-0.02	-0.06	0.12	0.00	0.10	-0.12	-0.04
18	1	-0.16	0.11	-0.01	-0.07	0.14	0.00	-0.11	0.13	-0.04

	13	14	15
	A	A	A
Frequencies --	212.8398	223.2996	237.5105
Red. masses --	7.4461	8.2600	6.3363
Frc consts --	0.1987	0.2427	0.2106
IR Inten --	9.7624	29.0457	0.0100

Atom	AN	X	Y	Z	X	Y	Z	X	Y	Z
1	13	0.06	0.05	0.02	-0.08	0.03	0.07	0.02	0.01	-0.01
2	13	-0.19	0.03	0.01	-0.08	-0.10	-0.02	-0.11	-0.07	0.01
3	13	-0.19	0.08	0.01	-0.09	-0.12	0.01	0.11	0.07	0.02
4	13	0.07	0.03	-0.02	-0.08	0.04	-0.06	-0.03	-0.02	-0.02
5	3	-0.14	-0.09	-0.01	0.33	0.70	-0.01	0.01	0.01	0.66
6	3	0.01	0.04	-0.02	0.02	-0.03	-0.01	0.00	0.00	-0.02
7	3	0.07	0.43	0.00	-0.09	0.13	0.01	0.00	0.00	-0.10
8	4	0.08	-0.27	-0.01	0.28	0.31	0.01	0.01	0.01	0.12
9	6	0.23	-0.23	0.00	0.07	-0.06	0.00	0.00	0.00	-0.11
10	6	0.14	-0.13	0.00	0.06	-0.06	0.00	0.15	-0.14	-0.08
11	6	0.15	-0.14	0.00	0.06	-0.06	0.00	-0.15	0.13	-0.08
12	1	0.32	-0.27	-0.01	-0.02	-0.02	0.00	0.00	0.00	-0.04
13	6	-0.02	0.05	0.00	0.08	-0.07	0.00	0.08	-0.07	-0.06
14	1	0.19	-0.18	0.00	0.07	-0.07	0.00	0.27	-0.24	-0.09
15	6	-0.01	0.05	0.00	0.08	-0.07	0.00	-0.08	0.07	-0.06
16	1	0.21	-0.20	0.00	0.08	-0.08	0.00	-0.27	0.23	-0.08
17	1	-0.12	0.17	0.01	0.13	-0.14	0.00	0.15	-0.13	-0.05
18	1	-0.11	0.16	0.00	0.14	-0.14	0.00	-0.15	0.14	-0.04

	16	17	18
	A	A	A

Frequencies --		255.7225			261.7762			298.5613		
Red. masses --		13.8290			14.2402			20.4811		
Frc consts --		0.5328			0.5749			1.0757		
IR Inten --		18.2269			4.0866			15.5130		
Atom	AN	X	Y	Z	X	Y	Z	X	Y	Z
1	13	-0.16	-0.22	0.13	0.28	0.29	0.02	0.11	0.12	0.53
2	13	0.11	0.30	-0.05	-0.01	-0.05	-0.06	-0.01	-0.10	-0.16
3	13	0.09	0.29	0.07	0.02	0.08	-0.05	-0.01	-0.10	0.16
4	13	-0.13	-0.18	-0.14	-0.30	-0.31	0.00	0.10	0.14	-0.52
5	3	0.07	0.21	0.00	0.01	0.04	-0.11	-0.15	-0.41	-0.01
6	3	-0.43	-0.37	-0.05	-0.02	-0.04	0.75	-0.13	-0.04	0.01
7	3	0.13	-0.16	0.01	0.00	-0.01	-0.12	-0.12	-0.17	0.00
8	4	0.07	-0.02	0.00	0.01	0.00	-0.13	0.03	0.08	-0.01
9	6	0.14	-0.14	0.00	0.01	-0.01	0.00	-0.05	0.05	0.00
10	6	0.09	-0.09	0.00	-0.02	0.03	0.00	-0.05	0.04	0.00
11	6	0.09	-0.09	0.00	0.03	-0.04	0.00	-0.05	0.04	0.00
12	1	0.13	-0.14	0.00	0.01	-0.01	-0.02	-0.12	0.07	0.00
13	6	-0.02	0.05	0.00	-0.01	0.02	0.00	-0.02	0.00	0.00
14	1	0.13	-0.13	0.00	-0.04	0.05	0.00	-0.08	0.06	0.00
15	6	-0.02	0.05	0.00	0.02	-0.02	0.00	-0.02	0.00	0.00
16	1	0.13	-0.13	0.00	0.06	-0.07	0.00	-0.07	0.06	0.00
17	1	-0.08	0.11	0.00	-0.02	0.04	0.01	-0.03	0.02	0.01
18	1	-0.08	0.11	0.01	0.03	-0.04	0.01	-0.03	0.02	0.00

		19			20			21		
		A			A			A		
Frequencies --		339.7348			344.6247			370.4072		
Red. masses --		11.1509			11.7754			6.7394		
Frc consts --		0.7583			0.8240			0.5448		
IR Inten --		27.3826			13.9278			18.9420		
Atom	AN	X	Y	Z	X	Y	Z	X	Y	Z
1	13	-0.04	0.05	-0.08	-0.02	0.02	0.12	-0.08	-0.06	0.01
2	13	-0.08	-0.01	-0.29	-0.06	-0.01	0.32	0.00	0.01	0.04
3	13	-0.08	-0.02	0.29	-0.07	0.00	-0.32	0.00	0.01	-0.04
4	13	-0.04	0.04	0.09	-0.02	0.03	-0.12	-0.09	-0.06	-0.01
5	3	-0.03	0.00	0.00	0.04	0.09	0.00	0.15	-0.42	-0.01
6	3	0.11	0.08	0.00	0.04	0.02	0.00	0.37	0.25	0.01
7	3	0.81	-0.33	-0.01	0.80	-0.25	0.00	0.02	0.01	0.00
8	4	0.00	0.03	0.00	0.01	-0.11	0.00	0.14	0.47	0.00
9	6	0.01	0.00	0.00	-0.05	0.04	0.00	0.12	-0.12	0.00
10	6	0.01	0.00	0.00	-0.04	0.03	0.00	0.02	-0.06	0.01
11	6	0.00	0.00	0.00	-0.04	0.03	0.00	0.02	-0.06	-0.01
12	1	-0.03	0.02	0.00	0.00	0.02	0.00	-0.24	0.03	0.00
13	6	0.01	-0.01	0.00	0.00	-0.03	0.00	-0.08	0.09	0.01
14	1	0.01	-0.01	0.00	-0.06	0.05	0.00	0.04	-0.09	0.01

15	6	0.01	-0.01	0.00	0.01	-0.03	0.00	-0.08	0.10	-0.01
16	1	0.01	-0.01	0.00	-0.06	0.05	0.00	0.05	-0.09	-0.01
17	1	0.02	-0.02	0.00	0.04	-0.06	0.00	-0.20	0.23	0.00
18	1	0.02	-0.02	0.00	0.04	-0.06	0.00	-0.20	0.23	0.00

	22	23	24
	A	A	A
Frequencies --	386.2221	466.1046	534.3921
Red. masses --	7.7915	6.0767	5.4681
Frc consts --	0.6848	0.7778	0.9200
IR Inten --	54.6848	46.3235	29.3132

Atom	AN	X	Y	Z	X	Y	Z	X	Y	Z
1	13	-0.07	-0.09	0.09	0.00	0.00	0.01	-0.03	-0.01	-0.02
2	13	0.02	0.05	-0.04	-0.03	0.01	-0.03	-0.01	0.02	0.00
3	13	0.02	0.05	0.04	-0.03	0.01	0.03	-0.01	0.02	0.00
4	13	-0.07	-0.09	-0.09	0.00	0.00	-0.01	-0.03	-0.01	0.02
5	3	-0.12	0.26	0.01	0.77	-0.14	-0.01	-0.26	-0.12	0.00
6	3	0.64	0.44	0.01	0.00	0.01	0.00	-0.01	-0.01	0.00
7	3	-0.11	0.03	0.00	-0.04	0.00	0.00	-0.02	0.02	0.00
8	4	-0.12	-0.34	-0.01	0.04	-0.29	0.00	0.56	-0.05	0.00
9	6	-0.07	0.06	0.00	0.02	-0.06	0.00	0.05	-0.07	0.00
10	6	0.00	0.02	-0.01	-0.11	0.10	0.00	-0.14	0.15	-0.01
11	6	0.00	0.02	0.01	-0.11	0.10	0.00	-0.14	0.15	0.02
12	1	0.21	-0.05	0.00	0.25	-0.14	0.00	0.36	-0.19	0.00
13	6	0.04	-0.05	-0.01	-0.04	0.03	0.00	0.07	-0.10	0.01
14	1	0.00	0.03	-0.01	-0.18	0.17	0.00	-0.25	0.27	-0.01
15	6	0.04	-0.05	0.01	-0.04	0.03	0.01	0.07	-0.10	-0.01
16	1	0.00	0.03	0.01	-0.17	0.17	0.01	-0.25	0.28	0.02
17	1	0.11	-0.12	0.00	-0.11	0.09	-0.01	0.08	-0.10	0.02
18	1	0.11	-0.12	0.00	-0.10	0.09	0.02	0.08	-0.10	-0.02

	25	26	27
	A	A	A
Frequencies --	625.7916	674.8419	723.7558
Red. masses --	3.5266	4.7533	1.4416
Frc consts --	0.8137	1.2754	0.4449
IR Inten --	0.0621	268.4757	1.1068

Atom	AN	X	Y	Z	X	Y	Z	X	Y	Z
1	13	0.00	0.00	0.00	0.01	0.00	0.01	0.00	0.00	0.00
2	13	0.00	0.00	0.00	0.01	-0.01	0.00	0.00	0.00	0.00
3	13	0.00	0.00	0.00	0.01	-0.01	0.00	0.00	0.00	0.00
4	13	0.00	0.00	0.00	0.01	0.00	-0.01	0.00	0.00	0.00
5	3	0.00	0.00	0.04	-0.06	0.08	0.00	-0.01	0.00	0.00
6	3	0.00	0.00	0.00	0.01	0.01	0.00	0.00	0.00	0.00
7	3	0.00	0.00	0.00	0.00	-0.01	0.00	0.01	0.00	0.00
8	4	0.00	0.00	-0.02	-0.30	0.05	0.00	-0.12	0.11	0.00

9	6	0.00	0.00	0.02	0.36	-0.25	-0.01	-0.06	-0.10	0.00
10	6	-0.12	0.13	0.00	-0.13	0.10	0.02	0.00	0.04	0.03
11	6	0.12	-0.13	0.00	-0.13	0.10	-0.02	0.00	0.04	-0.02
12	1	0.00	0.00	-0.15	-0.58	0.13	0.00	0.85	-0.45	-0.01
13	6	0.18	-0.22	-0.01	0.09	-0.03	0.04	0.03	-0.02	-0.01
14	1	-0.22	0.20	0.01	-0.28	0.22	0.03	0.06	0.06	0.01
15	6	-0.18	0.22	0.00	0.09	-0.03	-0.04	0.03	-0.02	0.01
16	1	0.22	-0.20	0.00	-0.28	0.22	-0.02	0.06	0.05	-0.01
17	1	0.34	-0.41	-0.01	0.09	-0.05	0.02	-0.05	0.05	-0.03
18	1	-0.34	0.41	0.00	0.09	-0.05	-0.02	-0.05	0.05	0.03

	28	29	30
	A	A	A
Frequencies --	757.0053	780.6129	853.5039
Red. masses --	1.2760	1.1751	3.3271
Frc consts --	0.4308	0.4219	1.4280
IR Inten --	6.8689	140.6683	3.9216

Atom	AN	X	Y	Z	X	Y	Z	X	Y	Z
1	13	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
2	13	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
3	13	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
4	13	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
5	3	0.00	0.00	0.00	0.01	-0.03	0.00	-0.01	0.00	0.00
6	3	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
7	3	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
8	4	0.00	0.00	0.00	0.01	0.00	0.00	0.05	-0.04	0.00
9	6	0.00	0.00	0.00	0.02	-0.02	0.00	-0.20	-0.16	0.00
10	6	-0.05	0.07	0.02	-0.04	0.03	0.03	0.04	-0.02	0.23
11	6	0.05	-0.06	0.02	-0.04	0.03	-0.03	0.04	-0.02	-0.23
12	1	0.00	0.00	-0.20	0.07	-0.04	0.00	-0.52	-0.05	0.00
13	6	-0.03	0.06	-0.02	-0.03	0.05	0.01	0.08	0.09	0.03
14	1	0.35	-0.45	0.05	0.25	-0.30	0.04	-0.03	0.38	0.16
15	6	0.03	-0.06	-0.02	-0.03	0.05	-0.01	0.08	0.09	-0.03
16	1	-0.35	0.44	0.06	0.26	-0.31	-0.05	-0.03	0.38	-0.15
17	1	0.26	-0.29	-0.03	0.37	-0.44	-0.02	-0.03	-0.11	-0.27
18	1	-0.25	0.28	-0.02	0.37	-0.44	0.01	-0.03	-0.12	0.27

	31	32	33
	A	A	A
Frequencies --	856.0581	894.0234	908.4716
Red. masses --	4.6564	1.3141	1.2488
Frc consts --	2.0105	0.6189	0.6073
IR Inten --	0.3247	0.4185	0.0727

Atom	AN	X	Y	Z	X	Y	Z	X	Y	Z
1	13	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
2	13	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00

3	13	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
4	13	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
5	3	0.00	0.00	0.00	0.00	0.01	0.00	0.00	0.00	0.00
6	3	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
7	3	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
8	4	0.00	0.00	0.00	0.01	-0.02	0.00	0.00	0.00	0.00
9	6	0.00	0.00	0.13	-0.01	0.01	0.00	0.00	0.00	0.00
10	6	0.14	0.07	0.15	-0.06	0.04	0.06	0.04	-0.04	-0.01
11	6	-0.13	-0.08	0.15	-0.06	0.04	-0.06	-0.04	0.04	0.00
12	1	0.00	0.00	-0.27	-0.13	0.06	0.00	0.00	0.00	0.06
13	6	0.19	0.16	-0.22	0.06	-0.03	0.01	-0.06	0.06	0.01
14	1	-0.31	0.01	0.26	0.31	-0.45	0.09	-0.25	0.31	-0.02
15	6	-0.20	-0.15	-0.22	0.06	-0.03	-0.01	0.06	-0.06	0.00
16	1	0.31	-0.02	0.26	0.31	-0.45	-0.10	0.24	-0.31	-0.03
17	1	0.21	0.27	-0.09	-0.27	0.30	-0.04	0.37	-0.44	-0.01
18	1	-0.21	-0.27	-0.10	-0.27	0.29	0.05	-0.37	0.44	0.01

	34	35	36
	A	A	A
Frequencies --	999.9505	1018.7909	1067.4902
Red. masses --	1.5764	1.4858	1.5783
Frc consts --	0.9287	0.9086	1.0596
IR Inten --	30.8439	2.2863	0.9711

Atom	AN	X	Y	Z	X	Y	Z	X	Y	Z
1	13	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
2	13	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
3	13	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
4	13	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
5	3	0.01	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
6	3	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
7	3	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
8	4	0.00	-0.01	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
9	6	-0.09	-0.10	0.00	0.00	0.00	0.12	0.02	0.06	0.00
10	6	0.02	0.05	-0.07	-0.02	0.03	-0.10	0.00	-0.04	0.09
11	6	0.02	0.04	0.07	0.02	-0.03	-0.10	-0.01	-0.03	-0.10
12	1	-0.27	-0.04	0.00	0.00	-0.01	0.83	0.18	0.00	0.00
13	6	-0.01	-0.02	0.09	0.04	0.04	-0.01	-0.01	0.00	0.12
14	1	0.44	0.21	-0.21	0.09	-0.05	-0.11	-0.27	-0.10	0.18
15	6	-0.01	-0.02	-0.09	-0.05	-0.04	-0.01	-0.01	0.00	-0.12
16	1	0.44	0.21	0.21	-0.09	0.05	-0.11	-0.28	-0.10	-0.18
17	1	0.11	0.12	0.36	0.21	0.12	0.23	0.21	0.17	0.51
18	1	0.11	0.13	-0.35	-0.21	-0.12	0.22	0.21	0.18	-0.51

	37	38	39
	A	A	A
Frequencies --	1089.0088	1127.8488	1279.9532

Red. masses --		1.2018			2.4394			1.3309		
Frc consts --		0.8397			1.8283			1.2847		
IR Inten --		5.6782			1.9761			0.2471		
Atom	AN	X	Y	Z	X	Y	Z	X	Y	Z
1	13	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
2	13	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
3	13	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
4	13	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
5	3	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
6	3	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
7	3	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
8	4	0.00	0.00	0.00	-0.01	0.01	0.00	0.00	0.00	0.00
9	6	0.00	0.00	-0.04	0.13	0.12	0.00	0.00	0.00	0.13
10	6	-0.05	-0.06	-0.04	0.04	0.03	0.11	-0.03	-0.04	-0.01
11	6	0.05	0.06	-0.03	0.04	0.03	-0.11	0.03	0.04	-0.01
12	1	0.00	0.00	-0.29	0.17	0.12	0.00	0.00	0.01	-0.52
13	6	0.01	0.02	0.03	-0.11	-0.11	0.10	-0.03	-0.02	-0.05
14	1	-0.40	-0.32	0.10	0.34	0.34	0.00	0.31	0.28	-0.16
15	6	-0.01	-0.02	0.03	-0.12	-0.10	-0.10	0.03	0.02	-0.05
16	1	0.40	0.32	0.10	0.34	0.34	0.01	-0.31	-0.28	-0.16
17	1	0.18	0.16	0.34	-0.30	-0.24	-0.18	0.16	0.16	0.32
18	1	-0.18	-0.17	0.34	-0.30	-0.24	0.18	-0.16	-0.16	0.31

			40			41			42	
			A			A			A	
Frequencies --		1351.9557			1395.2052			1446.3909		
Red. masses --		3.0620			4.3329			2.2322		
Frc consts --		3.2974			4.9694			2.7514		
IR Inten --		0.9037			2.1966			2.7313		
Atom	AN	X	Y	Z	X	Y	Z	X	Y	Z
1	13	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
2	13	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
3	13	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
4	13	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
5	3	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
6	3	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
7	3	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
8	4	0.00	0.00	0.00	0.00	-0.01	0.00	-0.01	0.00	0.00
9	6	0.00	0.00	0.29	0.00	0.08	0.00	-0.07	-0.08	0.00
10	6	0.12	0.08	-0.16	-0.13	-0.14	-0.11	0.13	0.12	-0.06
11	6	-0.12	-0.08	-0.16	-0.13	-0.15	0.11	0.13	0.12	0.06
12	1	0.00	0.01	-0.56	0.27	-0.02	0.00	-0.15	-0.07	0.00
13	6	-0.04	-0.02	0.06	0.13	0.12	0.26	-0.03	-0.03	0.12
14	1	-0.25	-0.23	-0.02	0.02	0.06	-0.21	-0.39	-0.37	0.16
15	6	0.04	0.02	0.06	0.13	0.12	-0.26	-0.04	-0.03	-0.12

16	1	0.25	0.23	-0.01	0.03	0.05	0.21	-0.40	-0.37	-0.17
17	1	-0.21	-0.15	-0.25	-0.24	-0.18	-0.41	-0.21	-0.19	-0.18
18	1	0.21	0.16	-0.24	-0.24	-0.20	0.41	-0.21	-0.20	0.17

	43	44	45
	A	A	A
Frequencies --	1496.8540	3164.3932	3185.8843
Red. masses --	3.4137	1.0884	1.0882
Frc consts --	4.5064	6.4210	6.5078
IR Inten --	1.3733	21.1883	3.3675

Atom	AN	X	Y	Z	X	Y	Z	X	Y	Z
1	13	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
2	13	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
3	13	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
4	13	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
5	3	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
6	3	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
7	3	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
8	4	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
9	6	0.00	0.00	0.06	-0.03	-0.08	0.00	0.00	0.00	0.00
10	6	-0.14	-0.14	-0.06	0.00	0.00	0.01	0.00	0.00	-0.01
11	6	0.14	0.14	-0.05	0.00	0.00	-0.01	0.00	0.00	-0.01
12	1	0.00	0.00	-0.31	0.35	0.92	0.01	0.00	0.00	0.00
13	6	0.18	0.15	0.10	0.00	0.00	0.00	-0.04	-0.03	0.03
14	1	0.13	0.13	-0.21	-0.03	-0.02	-0.09	0.04	0.03	0.17
15	6	-0.18	-0.15	0.09	0.00	0.00	0.00	0.04	0.03	0.03
16	1	-0.14	-0.12	-0.21	-0.02	-0.03	0.09	-0.03	-0.04	0.16
17	1	-0.13	-0.08	-0.49	-0.01	-0.01	0.01	0.42	0.37	-0.40
18	1	0.12	0.10	-0.49	-0.01	-0.01	-0.01	-0.42	-0.35	-0.40

	46	47	48
	A	A	A
Frequencies --	3199.4632	3221.3632	3225.5793
Red. masses --	1.0932	1.0955	1.1014
Frc consts --	6.5932	6.6979	6.7514
IR Inten --	10.6406	2.7700	1.9415

Atom	AN	X	Y	Z	X	Y	Z	X	Y	Z
1	13	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
2	13	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
3	13	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
4	13	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
5	3	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
6	3	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
7	3	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
8	4	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
9	6	0.00	0.01	0.00	0.00	0.00	0.00	-0.01	-0.01	0.00

10	6	0.00	0.00	0.02	-0.01	-0.01	-0.06	-0.01	-0.01	-0.05
11	6	0.00	0.00	-0.02	0.01	0.01	-0.05	-0.01	-0.02	0.06
12	1	-0.02	-0.07	0.00	0.00	0.01	-0.01	0.05	0.11	0.00
13	6	0.03	0.03	-0.04	0.01	0.01	-0.01	0.02	0.01	-0.01
14	1	-0.06	-0.05	-0.26	0.15	0.15	0.68	0.13	0.13	0.58
15	6	0.04	0.03	0.04	-0.01	-0.01	-0.01	0.02	0.01	0.02
16	1	-0.05	-0.06	0.25	-0.13	-0.15	0.62	0.14	0.16	-0.65
17	1	-0.39	-0.34	0.38	-0.11	-0.10	0.10	-0.16	-0.14	0.15
18	1	-0.40	-0.34	-0.39	0.10	0.08	0.09	-0.17	-0.14	-0.16

$CpBeAl_4Li_3 \rightarrow CpLi + Al_4Li_2Be$

$CpBeAl_4Li_3 \rightarrow Cp^- + Al_4Li_3Be^+$

Charge = 0 Multiplicity = 1

Al,0,1.1830759882,1.1457072848,1.3258027911
Al,0,2.2375799817,-1.2694633931,1.3938461961
Al,0,2.3959910447,-1.5388179421,-1.186983147
Al,0,1.0826253922,1.4851276915,-1.1666922277
Li,0,4.6737838141,-1.4507828141,0.0896472631
Li,0,-1.6059290914,1.1832154871,-0.1158557813
Li,0,-0.2592557204,-1.0182874556,-0.0398357038
Be,0,2.9204305724,0.5138543082,-0.3382189344
C,0,-2.9261475323,-0.1919495371,1.0589042294
C,0,-3.6117045767,0.9611884989,0.6241182009
C,0,-2.5097240519,-0.9152861909,-0.0978483231
H,0,-2.7755016411,-0.4932871994,2.0873473575
C,0,-3.6335619542,0.954753874,-0.7983972499
H,0,-4.0557162363,1.7125441809,1.2647142405
C,0,-2.9611240494,-0.2004619705,-1.2453301158
H,0,-2.1786799595,-1.9544979774,-0.1009601011
H,0,-4.0966806695,1.7017127752,-1.4305093503
H,0,-2.837909092,-0.5069900445,-2.2759211547

State=1-A\HF=-1200.7411881

	1	2	3
	A	A	A
Frequencies --	-14.2620	36.7030	47.9521
Red. masses --	3.9466	8.7952	8.5597
Frc consts --	0.0005	0.0070	0.0116
IR Inten --	0.0681	0.8197	0.1659

Atom AN	X	Y	Z	X	Y	Z	X	Y	Z

1	13	-0.02	0.05	-0.03	-0.01	0.02	0.02	-0.17	-0.09	-0.09
2	13	-0.03	0.03	0.06	0.08	-0.01	-0.02	-0.12	-0.10	-0.09
3	13	0.03	-0.06	0.05	-0.14	0.19	0.00	0.16	0.21	-0.02
4	13	0.02	-0.02	-0.06	0.08	-0.13	-0.04	0.12	-0.02	-0.10
5	3	0.00	-0.02	0.09	-0.02	-0.13	-0.19	0.02	-0.08	0.29
6	3	0.00	0.02	-0.08	0.01	0.02	-0.18	0.02	0.03	-0.21
7	3	0.00	0.01	0.00	-0.03	-0.26	0.81	-0.02	0.00	-0.17
8	4	0.00	-0.01	-0.01	0.08	0.03	0.18	0.06	0.05	0.21
9	6	0.16	-0.10	-0.10	0.02	0.01	-0.06	0.11	0.13	0.14
10	6	0.11	-0.11	0.13	0.03	0.03	-0.04	0.09	0.11	0.10
11	6	0.00	0.05	-0.20	-0.03	-0.01	-0.07	-0.03	-0.03	0.13
12	1	0.29	-0.19	-0.19	0.02	0.01	-0.06	0.21	0.25	0.18
13	6	-0.09	0.03	0.17	-0.02	0.00	-0.04	-0.06	-0.06	0.06
14	1	0.20	-0.21	0.25	0.07	0.04	-0.02	0.18	0.21	0.10
15	6	-0.15	0.13	-0.03	-0.05	-0.01	-0.06	-0.14	-0.15	0.08
16	1	0.00	0.10	-0.38	-0.04	0.00	-0.11	-0.06	-0.06	0.19
17	1	-0.18	0.05	0.34	-0.03	0.00	-0.03	-0.11	-0.12	0.03
18	1	-0.29	0.25	-0.05	-0.07	-0.02	-0.06	-0.26	-0.29	0.06

	4	5	6
	A	A	A
Frequencies --	68.2087	70.7152	87.6582
Red. masses --	6.0529	10.4038	11.7496
Frc consts --	0.0166	0.0307	0.0532
IR Inten --	0.6738	1.3161	4.6185

Atom	AN	X	Y	Z	X	Y	Z	X	Y	Z
1	13	0.12	-0.04	0.08	-0.03	-0.15	-0.06	-0.16	-0.07	-0.13
2	13	0.06	-0.05	-0.02	0.23	0.01	-0.01	-0.15	-0.03	-0.09
3	13	0.04	-0.09	0.00	0.26	-0.02	0.01	0.11	-0.19	-0.07
4	13	-0.05	0.09	0.13	-0.11	-0.20	-0.07	0.01	0.34	0.02
5	3	0.04	0.15	-0.02	0.20	0.47	0.09	-0.01	0.30	0.16
6	3	-0.12	0.12	-0.38	-0.06	-0.05	0.11	0.10	-0.02	0.07
7	3	-0.01	0.07	0.11	-0.04	-0.09	0.13	0.03	-0.26	0.61
8	4	-0.03	0.00	-0.11	-0.04	0.04	-0.01	-0.13	-0.13	-0.07
9	6	0.11	0.16	0.00	-0.22	0.03	0.00	0.03	-0.04	0.03
10	6	0.01	0.07	-0.03	-0.15	0.09	0.02	0.08	-0.01	0.03
11	6	-0.02	0.04	-0.02	-0.19	0.07	0.00	0.06	-0.02	0.03
12	1	0.26	0.30	0.04	-0.28	-0.03	-0.02	-0.03	-0.08	0.02
13	6	-0.19	-0.12	-0.07	-0.08	0.17	0.04	0.13	0.03	0.03
14	1	0.07	0.14	-0.03	-0.15	0.08	0.03	0.07	-0.01	0.02
15	6	-0.21	-0.14	-0.06	-0.11	0.16	0.02	0.13	0.03	0.04
16	1	0.03	0.05	0.02	-0.23	0.06	-0.04	0.04	-0.03	0.01
17	1	-0.31	-0.23	-0.10	-0.02	0.23	0.06	0.17	0.07	0.04
18	1	-0.33	-0.27	-0.08	-0.07	0.21	0.03	0.18	0.06	0.05

	7	8	9

		A			A			A		
Frequencies --		105.4627			121.7175			147.9286		
Red. masses --		7.5478			13.2243			6.2541		
Frc consts --		0.0495			0.1154			0.0806		
IR Inten --		2.8932			1.8630			11.3651		
Atom	AN	X	Y	Z	X	Y	Z	X	Y	Z
1	13	0.17	0.12	-0.02	-0.22	-0.12	-0.10	0.05	0.03	0.04
2	13	-0.06	-0.03	-0.08	0.20	0.13	0.13	0.03	0.16	-0.02
3	13	0.14	0.02	-0.06	-0.04	-0.07	0.06	0.08	0.01	-0.05
4	13	0.12	0.07	-0.03	0.33	0.22	0.02	-0.04	0.07	0.09
5	3	0.03	-0.25	0.26	0.13	-0.07	-0.56	0.00	-0.38	0.16
6	3	-0.21	0.03	0.15	-0.10	-0.04	0.00	0.13	-0.22	-0.08
7	3	-0.04	0.17	0.22	-0.01	0.00	-0.17	-0.01	-0.35	-0.06
8	4	0.12	-0.01	-0.02	0.18	-0.11	0.13	0.03	0.04	-0.11
9	6	-0.19	-0.10	0.01	-0.14	-0.04	0.02	-0.10	-0.06	-0.02
10	6	-0.28	-0.18	-0.01	-0.16	-0.06	0.01	0.07	0.09	0.01
11	6	-0.04	0.03	0.03	-0.11	-0.02	0.02	-0.21	-0.15	-0.04
12	1	-0.22	-0.13	0.00	-0.12	-0.03	0.02	-0.15	-0.09	-0.03
13	6	-0.19	-0.10	0.00	-0.16	-0.06	0.01	0.06	0.09	0.01
14	1	-0.40	-0.28	-0.03	-0.17	-0.07	0.01	0.20	0.20	0.04
15	6	-0.04	0.02	0.03	-0.14	-0.04	0.02	-0.13	-0.07	-0.02
16	1	0.07	0.09	0.02	-0.11	-0.02	0.02	-0.37	-0.24	-0.06
17	1	-0.23	-0.14	0.00	-0.18	-0.08	0.01	0.17	0.19	0.04
18	1	0.05	0.09	0.04	-0.15	-0.04	0.01	-0.19	-0.10	-0.03

		10			11			12		
		A			A			A		
Frequencies --		162.9085			186.7872			226.4029		
Red. masses --		8.3849			18.7633			11.5325		
Frc consts --		0.1311			0.3857			0.3483		
IR Inten --		3.7574			1.7604			5.0627		
Atom	AN	X	Y	Z	X	Y	Z	X	Y	Z
1	13	0.18	0.13	-0.01	-0.18	0.18	0.32	0.07	-0.18	-0.13
2	13	-0.11	-0.18	0.02	-0.14	0.25	-0.15	0.19	0.08	0.07
3	13	-0.08	0.05	0.11	0.02	-0.15	-0.33	-0.30	0.02	-0.11
4	13	0.13	0.06	-0.05	0.27	-0.28	0.14	0.13	0.02	0.00
5	3	0.03	0.55	-0.09	0.03	0.49	0.08	-0.26	0.20	0.79
6	3	0.10	-0.15	-0.02	0.01	0.02	-0.02	-0.01	0.07	0.03
7	3	-0.08	-0.16	-0.12	-0.07	0.11	-0.02	-0.10	0.11	-0.02
8	4	0.07	0.04	0.04	0.14	-0.34	0.04	0.04	-0.01	-0.09
9	6	-0.12	-0.10	-0.02	0.00	-0.01	0.00	0.00	-0.02	-0.01
10	6	0.04	0.03	0.01	0.03	0.01	0.00	0.01	0.00	0.00
11	6	-0.20	-0.17	-0.03	-0.04	-0.05	-0.01	-0.02	-0.03	-0.01
12	1	-0.18	-0.15	-0.03	0.01	-0.01	0.00	-0.01	-0.02	-0.01
13	6	0.05	0.05	0.01	0.01	0.00	0.00	0.01	-0.01	0.00

14	1	0.13	0.11	0.03	0.06	0.03	0.01	0.02	0.00	0.00
15	6	-0.10	-0.08	-0.01	-0.03	-0.04	-0.01	-0.01	-0.02	-0.01
16	1	-0.33	-0.24	-0.05	-0.05	-0.05	0.00	-0.03	-0.04	-0.01
17	1	0.16	0.15	0.04	0.02	0.00	0.00	0.01	-0.01	0.00
18	1	-0.14	-0.10	-0.02	-0.06	-0.06	-0.01	-0.02	-0.03	-0.01

		13			14			15		
		A			A			A		
Frequencies --		233.3409			251.8887			263.6042		
Red. masses --		6.3502			16.2684			21.8030		
Frc consts --		0.2037			0.6082			0.8926		
IR Inten --		3.0926			4.0540			7.1022		
Atom	AN	X	Y	Z	X	Y	Z	X	Y	Z
1	13	-0.01	-0.06	-0.02	-0.16	0.30	0.16	0.08	0.01	-0.18
2	13	-0.01	0.03	-0.03	0.37	-0.29	0.01	-0.13	-0.10	0.61
3	13	0.05	-0.02	0.06	-0.01	-0.04	-0.17	0.19	0.17	-0.47
4	13	-0.02	0.00	0.00	-0.09	0.17	-0.15	-0.07	-0.03	0.12
5	3	0.03	-0.08	-0.10	0.02	-0.13	0.20	-0.26	0.05	-0.28
6	3	-0.05	0.21	0.06	-0.01	-0.02	0.02	-0.02	0.02	0.04
7	3	-0.38	0.58	0.18	0.01	0.18	-0.06	-0.02	0.12	0.11
8	4	0.03	0.06	-0.03	-0.33	-0.29	0.38	0.01	-0.22	-0.08
9	6	-0.01	-0.10	-0.03	-0.02	-0.03	-0.02	0.01	0.00	-0.01
10	6	0.15	0.04	0.00	0.06	0.04	0.00	0.04	0.03	0.00
11	6	-0.14	-0.21	-0.04	-0.08	-0.09	-0.03	-0.03	-0.04	-0.02
12	1	-0.07	-0.15	-0.04	-0.03	-0.04	-0.02	0.02	0.01	-0.01
13	6	0.15	0.04	0.01	0.05	0.03	0.00	0.02	0.01	-0.01
14	1	0.24	0.11	0.02	0.13	0.10	0.02	0.07	0.06	0.00
15	6	0.00	-0.10	-0.02	-0.04	-0.05	-0.02	-0.03	-0.03	-0.01
16	1	-0.16	-0.22	-0.04	-0.11	-0.10	-0.02	-0.03	-0.04	-0.02
17	1	0.25	0.12	0.02	0.10	0.08	0.01	0.02	0.01	-0.01
18	1	-0.05	-0.14	-0.02	-0.08	-0.08	-0.02	-0.06	-0.06	-0.02

		16			17			18		
		A			A			A		
Frequencies --		312.0213			323.6553			326.1238		
Red. masses --		7.4447			6.7550			12.0420		
Frc consts --		0.4270			0.4169			0.7546		
IR Inten --		14.1875			4.4967			1.6047		
Atom	AN	X	Y	Z	X	Y	Z	X	Y	Z
1	13	0.11	-0.06	0.06	-0.01	0.06	-0.15	-0.17	0.22	-0.20
2	13	-0.01	0.09	0.00	0.00	0.00	-0.05	0.10	-0.17	-0.02
3	13	0.05	0.01	0.00	-0.03	-0.02	0.03	-0.02	0.00	0.02
4	13	0.00	0.03	-0.10	-0.02	-0.04	0.12	0.00	-0.09	0.28
5	3	-0.08	0.02	-0.05	0.08	0.00	0.03	0.24	-0.03	0.10
6	3	-0.08	0.49	0.43	0.07	-0.35	0.58	-0.11	0.50	0.02
7	3	-0.31	-0.41	-0.11	0.11	0.15	0.08	-0.30	-0.34	-0.11

8	4	-0.13	-0.13	0.22	0.05	-0.05	0.12	0.23	0.14	-0.29
9	6	0.11	0.05	-0.03	0.12	0.13	-0.04	0.02	-0.03	0.00
10	6	0.04	0.00	-0.04	0.06	0.09	-0.05	0.00	-0.05	0.00
11	6	0.00	-0.02	-0.05	-0.01	0.03	-0.08	0.01	-0.02	0.01
12	1	0.15	0.08	-0.02	0.24	0.23	-0.02	0.00	-0.05	0.00
13	6	-0.03	-0.06	-0.05	-0.08	-0.04	-0.08	0.03	-0.02	0.00
14	1	0.02	-0.02	-0.04	0.14	0.16	-0.04	-0.05	-0.10	0.00
15	6	-0.04	-0.06	-0.05	-0.16	-0.10	-0.09	0.07	0.01	0.01
16	1	-0.09	-0.07	-0.04	0.03	0.05	-0.05	-0.06	-0.06	0.00
17	1	-0.12	-0.14	-0.07	-0.13	-0.08	-0.09	0.00	-0.05	-0.01
18	1	-0.11	-0.12	-0.06	-0.27	-0.18	-0.10	0.09	0.02	0.01

	19	20	21
	A	A	A
Frequencies --	351.1308	365.3242	401.4769
Red. masses --	11.1858	8.0886	6.8144
Frc consts --	0.8126	0.6360	0.6471
IR Inten --	12.9753	98.2285	89.7296

Atom	AN	X	Y	Z	X	Y	Z	X	Y	Z
1	13	-0.13	-0.08	0.28	0.06	-0.05	-0.04	-0.01	-0.01	-0.03
2	13	-0.02	-0.12	0.11	-0.09	0.06	0.05	-0.02	0.00	-0.02
3	13	-0.03	0.05	-0.06	-0.12	0.02	-0.07	-0.02	-0.01	0.02
4	13	0.06	0.06	-0.19	-0.07	0.02	-0.02	0.00	-0.03	0.02
5	3	0.30	-0.04	0.06	0.93	-0.04	0.10	-0.05	0.00	-0.01
6	3	0.02	-0.02	0.42	-0.02	0.05	-0.11	-0.16	0.46	0.09
7	3	0.06	-0.03	0.09	0.01	0.03	-0.01	0.77	0.04	0.02
8	4	0.15	0.31	-0.59	-0.05	-0.17	0.16	-0.02	0.00	0.01
9	6	0.06	0.06	-0.03	-0.02	-0.02	0.01	-0.07	-0.07	-0.03
10	6	0.03	0.04	-0.03	0.00	-0.01	0.01	0.04	0.04	0.01
11	6	-0.02	0.00	-0.05	0.00	-0.01	0.01	-0.12	-0.13	-0.03
12	1	0.09	0.08	-0.02	-0.02	-0.02	0.00	-0.13	-0.12	-0.04
13	6	-0.04	-0.02	-0.04	0.01	0.01	0.01	0.04	0.04	0.01
14	1	0.04	0.05	-0.03	-0.01	-0.01	0.01	0.05	0.04	0.03
15	6	-0.08	-0.06	-0.04	0.02	0.01	0.01	-0.07	-0.07	0.00
16	1	0.00	0.00	-0.04	0.01	0.00	0.01	-0.09	-0.10	-0.02
17	1	-0.07	-0.05	-0.05	0.02	0.01	0.01	0.06	0.05	0.00
18	1	-0.13	-0.09	-0.05	0.03	0.02	0.01	-0.13	-0.11	-0.01

	22	23	24
	A	A	A
Frequencies --	452.1716	515.9333	526.6626
Red. masses --	10.6594	5.7077	9.7052
Frc consts --	1.2841	0.8952	1.5861
IR Inten --	13.0593	64.6064	1.4497

Atom	AN	X	Y	Z	X	Y	Z	X	Y	Z
1	13	-0.01	0.01	-0.01	-0.01	0.00	-0.01	-0.03	-0.01	0.05

2	13	0.02	0.02	-0.03	0.00	0.00	0.00	0.01	0.00	-0.02
3	13	0.03	0.22	0.18	0.00	-0.01	-0.01	-0.01	0.04	0.05
4	13	0.07	-0.02	0.02	0.02	-0.02	0.03	-0.22	0.08	-0.08
5	3	0.00	-0.01	0.00	0.02	-0.02	-0.01	-0.12	0.08	0.03
6	3	0.00	-0.02	0.02	0.77	0.22	0.00	0.28	0.11	-0.03
7	3	-0.01	0.04	0.01	0.01	0.10	0.03	0.02	0.03	-0.01
8	4	-0.36	-0.72	-0.51	-0.19	0.09	0.00	0.77	-0.42	0.02
9	6	0.00	0.00	0.00	-0.09	-0.03	-0.01	-0.04	-0.01	0.00
10	6	0.00	0.00	0.00	-0.08	-0.04	-0.01	-0.03	-0.02	0.00
11	6	0.00	0.00	0.00	0.03	0.04	0.01	0.02	0.02	0.01
12	1	0.01	0.01	0.00	-0.21	-0.12	-0.02	-0.07	-0.04	-0.01
13	6	0.00	0.00	0.00	-0.08	-0.05	0.00	-0.02	-0.01	0.00
14	1	0.01	0.01	0.00	-0.22	-0.16	-0.04	-0.08	-0.06	-0.01
15	6	0.00	0.00	0.00	-0.08	-0.03	0.00	-0.03	-0.01	0.00
16	1	0.02	0.01	0.00	-0.11	-0.04	0.00	-0.06	-0.02	0.00
17	1	0.01	0.01	0.00	-0.21	-0.16	-0.02	-0.08	-0.06	-0.01
18	1	0.00	0.00	0.00	-0.19	-0.12	-0.02	-0.08	-0.05	-0.01

	25	26	27
	A	A	A
Frequencies --	626.1685	634.8307	752.9426
Red. masses --	5.3656	3.9432	1.2681
Frc consts --	1.2395	0.9363	0.4236
IR Inten --	21.7665	0.0848	2.2671

Atom	AN	X	Y	Z	X	Y	Z	X	Y	Z
1	13	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
2	13	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
3	13	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
4	13	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
5	3	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
6	3	-0.12	0.01	0.01	-0.01	0.00	0.03	0.00	0.00	0.01
7	3	-0.06	-0.02	0.00	0.00	0.00	-0.01	0.00	0.00	0.00
8	4	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
9	6	-0.22	-0.17	-0.04	-0.15	-0.13	-0.04	-0.06	-0.06	-0.01
10	6	0.09	0.04	0.03	0.23	0.21	0.05	-0.04	-0.04	-0.02
11	6	0.35	0.25	0.05	0.02	0.01	0.01	0.01	0.00	0.00
12	1	-0.34	-0.28	-0.07	-0.25	-0.20	-0.05	0.43	0.37	0.11
13	6	0.12	0.08	-0.01	-0.22	-0.21	-0.04	0.03	0.04	0.00
14	1	0.18	0.12	0.05	0.39	0.35	0.07	0.29	0.24	0.04
15	6	-0.23	-0.19	-0.02	0.13	0.11	0.01	0.07	0.06	0.02
16	1	0.10	0.11	0.03	0.00	0.02	-0.06	-0.07	-0.02	-0.10
17	1	0.22	0.17	0.01	-0.37	-0.34	-0.07	-0.25	-0.21	-0.05
18	1	-0.38	-0.32	-0.04	0.22	0.18	0.02	-0.45	-0.41	-0.04

	28	29	30
	A	A	A

Frequencies --		759.1769			778.3591			851.1561		
Red. masses --		1.2278			1.1506			1.6827		
Frc consts --		0.4169			0.4107			0.7183		
IR Inten --		5.4767			332.0598			2.0557		
Atom	AN	X	Y	Z	X	Y	Z	X	Y	Z
1	13	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
2	13	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
3	13	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
4	13	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
5	3	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
6	3	0.00	-0.01	0.00	-0.05	-0.03	-0.01	0.00	0.00	0.00
7	3	-0.02	-0.02	-0.01	0.00	0.01	0.00	-0.01	0.00	0.00
8	4	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
9	6	-0.02	-0.04	0.00	0.04	0.04	-0.01	-0.06	0.00	-0.10
10	6	0.05	0.05	0.00	0.03	0.03	0.01	0.00	0.06	0.02
11	6	-0.08	-0.01	0.00	0.03	0.00	0.00	0.11	-0.10	-0.03
12	1	0.02	-0.02	0.00	-0.33	-0.25	-0.08	0.31	0.48	0.07
13	6	0.06	0.05	0.02	0.03	0.02	0.00	0.00	0.06	0.02
14	1	-0.31	-0.26	-0.07	-0.33	-0.30	-0.05	-0.17	-0.26	0.09
15	6	-0.01	-0.02	-0.01	0.04	0.03	0.02	-0.05	-0.05	0.10
16	1	0.66	0.38	0.04	-0.47	-0.26	-0.03	-0.14	-0.24	-0.05
17	1	-0.35	-0.30	-0.04	-0.30	-0.27	-0.07	-0.18	-0.19	-0.19
18	1	-0.05	-0.09	-0.01	-0.31	-0.24	-0.02	0.30	0.46	0.14

		31			32			33		
		A			A			A		
Frequencies --		860.1361			874.6443			886.4019		
Red. masses --		4.1491			2.0728			1.2331		
Frc consts --		1.8086			0.9343			0.5708		
IR Inten --		0.0835			0.2063			0.1361		
Atom	AN	X	Y	Z	X	Y	Z	X	Y	Z
1	13	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
2	13	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
3	13	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
4	13	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
5	3	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
6	3	0.00	0.00	0.00	-0.01	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
7	3	0.00	0.00	0.00	0.02	0.02	0.01	0.00	0.00	0.00
8	4	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
9	6	0.12	-0.12	0.11	-0.04	-0.07	0.15	0.03	0.04	0.00
10	6	0.13	-0.11	-0.25	0.09	-0.05	0.01	-0.07	-0.05	0.00
11	6	0.01	-0.04	0.10	-0.07	0.13	0.04	0.00	0.00	-0.01
12	1	-0.30	-0.02	0.27	0.38	0.18	0.18	-0.27	-0.23	-0.08
13	6	-0.16	0.21	-0.15	0.08	-0.02	-0.04	0.07	0.04	0.02
14	1	0.28	-0.13	-0.13	-0.23	-0.10	-0.19	0.43	0.41	0.09

15	6	-0.10	0.05	0.19	-0.06	0.01	-0.15	-0.03	-0.04	-0.01
16	1	-0.01	0.10	-0.41	-0.51	-0.10	0.00	0.00	0.00	0.02
17	1	-0.26	0.19	-0.05	-0.24	-0.17	0.14	-0.44	-0.41	-0.08
18	1	0.27	-0.13	0.24	0.38	0.24	-0.10	0.25	0.24	0.02

	34	35	36
	A	A	A
Frequencies --	1016.2901	1023.4815	1073.3917
Red. masses --	1.4037	1.4814	1.2524
Frc consts --	0.8542	0.9143	0.8501
IR Inten --	9.1623	31.7624	5.0443

Atom	AN	X	Y	Z	X	Y	Z	X	Y	Z
1	13	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
2	13	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
3	13	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
4	13	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
5	3	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
6	3	0.00	0.00	0.00	0.01	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
7	3	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
8	4	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
9	6	0.01	-0.02	0.09	0.03	-0.03	-0.05	0.05	-0.07	0.00
10	6	-0.05	0.05	0.01	-0.03	0.02	0.10	-0.02	0.03	-0.04
11	6	0.01	0.01	-0.09	-0.07	0.09	0.01	0.00	-0.01	0.05
12	1	-0.05	-0.02	0.11	0.37	-0.30	-0.29	0.37	-0.36	-0.23
13	6	0.05	-0.07	0.01	-0.02	0.04	-0.07	0.01	0.00	-0.03
14	1	-0.24	0.26	-0.24	0.07	-0.16	0.27	-0.16	0.27	-0.28
15	6	-0.01	-0.01	0.07	0.03	-0.06	0.05	-0.05	0.05	0.05
16	1	-0.03	0.18	-0.79	-0.16	0.08	-0.11	0.01	-0.10	0.38
17	1	0.18	-0.11	-0.23	0.10	-0.05	-0.41	0.09	-0.08	-0.28
18	1	-0.06	0.08	0.07	0.39	-0.38	0.11	-0.32	0.36	0.01

	37	38	39
	A	A	A
Frequencies --	1076.8370	1139.7907	1283.8450
Red. masses --	1.2627	5.2232	1.2895
Frc consts --	0.8627	3.9979	1.2522
IR Inten --	0.5449	8.3613	0.0052

Atom	AN	X	Y	Z	X	Y	Z	X	Y	Z
1	13	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
2	13	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
3	13	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
4	13	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
5	3	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
6	3	0.00	0.00	0.00	0.01	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
7	3	0.00	0.00	0.00	-0.01	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
8	4	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00

9	6	-0.01	0.01	0.06	0.07	-0.11	0.22	-0.04	0.05	0.02
10	6	0.03	-0.05	0.06	-0.14	0.13	0.21	-0.03	0.04	-0.05
11	6	-0.01	-0.01	0.00	0.19	-0.21	-0.06	0.00	-0.02	0.09
12	1	-0.22	0.14	0.19	0.14	-0.28	0.15	0.28	-0.28	-0.24
13	6	0.02	-0.01	-0.08	-0.16	0.21	-0.11	0.02	-0.01	-0.06
14	1	0.23	-0.32	0.37	-0.25	0.22	0.13	0.18	-0.27	0.28
15	6	-0.02	0.05	-0.04	0.05	0.01	-0.25	0.04	-0.05	-0.01
16	1	0.08	0.03	0.04	0.21	-0.24	-0.05	-0.02	0.10	-0.40
17	1	0.22	-0.13	-0.57	-0.26	0.26	0.02	-0.15	0.10	0.39
18	1	-0.31	0.29	-0.08	0.13	-0.18	-0.28	-0.29	0.35	-0.06

	40	41	42
	A	A	A
Frequencies --	1376.6208	1381.6981	1462.3718
Red. masses --	4.4035	4.7577	2.4114
Frc consts --	4.9167	5.3515	3.0383
IR Inten --	2.9170	0.0507	4.2261

Atom	AN	X	Y	Z	X	Y	Z	X	Y	Z
1	13	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
2	13	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
3	13	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
4	13	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
5	3	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
6	3	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.01	0.00	0.00
7	3	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
8	4	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
9	6	-0.14	0.20	0.00	0.14	-0.09	-0.23	0.09	-0.08	-0.12
10	6	0.12	-0.19	0.21	-0.09	0.06	0.07	0.00	-0.04	0.16
11	6	0.05	-0.11	-0.05	0.02	-0.10	0.36	-0.07	0.09	0.04
12	1	0.14	-0.17	-0.29	-0.25	0.27	0.05	-0.33	0.35	0.21
13	6	0.08	-0.05	-0.28	0.11	-0.09	-0.02	-0.03	0.06	-0.13
14	1	-0.19	0.29	-0.29	-0.10	0.12	0.04	-0.22	0.29	-0.16
15	6	-0.11	0.14	0.12	-0.17	0.20	-0.14	0.11	-0.14	0.04
16	1	0.25	-0.02	0.01	-0.01	0.14	-0.55	-0.11	0.11	-0.01
17	1	-0.17	0.13	0.39	0.07	-0.10	0.03	-0.18	0.18	0.21
18	1	0.12	-0.23	0.17	0.26	-0.28	-0.08	-0.36	0.43	-0.02

	43	44	45
	A	A	A
Frequencies --	1469.2768	3111.6906	3195.9214
Red. masses --	2.7221	1.0903	1.0877
Frc consts --	3.4623	6.2198	6.5454
IR Inten --	0.2352	5.2612	0.9334

Atom	AN	X	Y	Z	X	Y	Z	X	Y	Z
1	13	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
2	13	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00

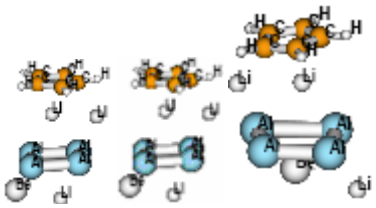
3	13	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
4	13	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
5	3	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
6	3	0.00	0.00	0.01	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
7	3	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
8	4	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
9	6	-0.09	0.13	-0.04	0.00	0.00	0.00	0.00	0.01	-0.02
10	6	0.13	-0.15	0.03	0.00	0.00	0.00	-0.03	0.02	0.04
11	6	0.01	-0.04	0.14	-0.04	0.07	0.02	0.00	0.00	0.00
12	1	0.12	-0.10	-0.25	-0.02	0.04	-0.07	0.06	-0.14	0.26
13	6	-0.12	0.11	0.14	0.00	0.00	0.00	0.03	-0.04	0.02
14	1	-0.13	0.22	-0.40	0.00	0.00	0.00	0.33	-0.28	-0.48
15	6	0.07	-0.07	-0.12	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	-0.03
16	1	-0.01	0.10	-0.43	0.46	-0.84	-0.23	0.00	0.00	0.00
17	1	0.13	-0.04	-0.52	0.00	0.00	0.00	-0.35	0.45	-0.25
18	1	-0.07	0.12	-0.17	-0.01	0.00	0.08	-0.04	0.00	0.31

	46	47	48
	A	A	A
Frequencies --	3206.0530	3215.5376	3224.0100
Red. masses --	1.0921	1.0961	1.1034
Frc consts --	6.6138	6.6774	6.7576
IR Inten --	7.9906	8.6013	5.5979

Atom	AN	X	Y	Z	X	Y	Z	X	Y	Z
1	13	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
2	13	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
3	13	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
4	13	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
5	3	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
6	3	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
7	3	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
8	4	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
9	6	0.01	-0.02	0.04	-0.01	0.03	-0.05	-0.01	0.02	-0.04
10	6	0.02	-0.02	-0.03	0.01	-0.01	-0.02	0.02	-0.02	-0.04
11	6	0.00	-0.01	0.00	0.00	0.00	0.00	-0.01	0.01	0.00
12	1	-0.10	0.23	-0.41	0.14	-0.31	0.55	0.11	-0.23	0.41
13	6	0.02	-0.03	0.02	-0.02	0.02	-0.01	0.03	-0.04	0.02
14	1	-0.25	0.21	0.36	-0.15	0.13	0.21	-0.26	0.22	0.38
15	6	0.00	0.00	-0.05	0.01	0.00	-0.05	-0.01	0.00	0.04
16	1	-0.04	0.07	0.02	0.00	0.00	-0.01	0.04	-0.07	-0.02
17	1	-0.26	0.34	-0.19	0.19	-0.24	0.13	-0.30	0.38	-0.21
18	1	-0.07	0.01	0.54	-0.08	0.01	0.61	0.06	-0.01	-0.46

$CpBeAl_4Li_3 \rightarrow CpLi + Al_4Li_2Be$ **-20.7521157**

$CpBeAl_4Li_3 \rightarrow Cp^- + Al_4Li_3Be^+$ **-143.3333982**



Charge = 0 Multiplicity = 1

Al,0,-1.2755046326,1.8248808936,-1.1349955992
Al,0,-1.8321609789,-1.3017384339,-1.3141864042
Al,0,-1.7960190661,-1.1893465808,1.2882339631
Al,0,-1.3135936194,1.3959986132,1.3523682144
Li,0,-4.0624391925,-1.8660303993,-0.0878779483
Li,0,1.2198993194,2.1348045113,-0.0032479838
Li,0,0.8902717987,-0.4419555496,0.014181396
Be,0,-2.8698973991,0.4721471098,-0.3264407306
C,0,2.7581532162,-1.5081521276,0.0531382172
C,0,2.744770253,-0.7559263049,-1.1455345396
C,0,2.8069477497,-0.6092447729,1.1414374697
H,0,2.7221703004,-2.5876243369,0.1242160961
C,0,2.8174474399,0.6179128776,-0.8023821727
H,0,2.7177503575,-1.1532575208,-2.1514951871
C,0,2.8556800761,0.7099747998,0.6180733974
H,0,2.8353007783,-0.8724411147,2.1903424757
H,0,2.9391885249,1.4282172409,-1.5161418518
H,0,3.0486093103,1.601346376,1.2128185016

State=1-A\HF=-1200.7362676

		1			2			3		
		A			A			A		
Frequencies --		25.9198			45.9178			55.0457		
Red. masses --		4.2248			11.1956			7.9603		
Frc consts --		0.0017			0.0139			0.0142		
IR Inten --		0.1316			2.9233			2.2094		
Atom	AN	X	Y	Z	X	Y	Z	X	Y	Z
1	13	0.03	-0.06	-0.07	-0.07	0.17	0.04	0.21	-0.12	0.02
2	13	0.00	-0.07	0.07	0.36	0.00	0.07	0.03	-0.10	0.06
3	13	0.00	0.06	0.07	0.05	0.12	0.06	-0.23	0.00	0.06
4	13	-0.01	0.06	-0.05	-0.20	0.15	0.03	-0.07	-0.03	0.02
5	3	0.00	0.00	0.09	0.30	-0.24	-0.19	-0.17	0.16	-0.20
6	3	0.00	0.00	0.05	-0.10	-0.07	0.15	0.06	0.05	0.33
7	3	-0.01	0.01	-0.13	-0.04	-0.16	0.10	0.01	0.10	0.18
8	4	0.01	-0.01	-0.02	0.06	-0.08	-0.12	0.05	0.00	-0.11
9	6	-0.02	-0.01	-0.20	-0.01	-0.12	-0.08	-0.01	0.07	-0.08
10	6	0.06	0.18	-0.08	-0.16	-0.11	-0.07	-0.16	0.08	-0.08
11	6	-0.09	-0.18	-0.05	0.04	-0.14	-0.07	0.20	0.06	-0.08

12	1	-0.04	-0.02	-0.37	0.04	-0.13	-0.09	-0.04	0.07	-0.08
13	6	0.05	0.13	0.14	-0.21	-0.11	-0.06	-0.05	0.07	-0.08
14	1	0.13	0.34	-0.15	-0.24	-0.10	-0.07	-0.33	0.08	-0.07
15	6	-0.05	-0.10	0.16	-0.08	-0.13	-0.06	0.17	0.07	-0.09
16	1	-0.17	-0.34	-0.09	0.16	-0.15	-0.08	0.36	0.06	-0.09
17	1	0.13	0.24	0.28	-0.33	-0.10	-0.06	-0.14	0.07	-0.10
18	1	-0.11	-0.19	0.31	-0.06	-0.13	-0.07	0.33	0.05	-0.12

	4	5	6
	A	A	A
Frequencies --	65.8754	70.6694	82.7861
Red. masses --	12.6491	5.9478	6.3038
Frc consts --	0.0323	0.0175	0.0255
IR Inten --	2.7552	1.8971	2.4003

Atom	AN	X	Y	Z	X	Y	Z	X	Y	Z
1	13	0.05	0.36	0.10	0.12	-0.13	0.04	-0.02	-0.03	0.05
2	13	-0.01	-0.38	0.07	0.11	0.07	0.01	-0.01	0.07	0.06
3	13	0.05	-0.01	0.00	0.03	-0.03	0.04	-0.16	0.03	0.06
4	13	-0.05	-0.12	0.04	-0.01	0.00	0.06	-0.12	0.03	0.06
5	3	-0.21	0.33	0.09	0.13	-0.10	-0.06	-0.05	-0.03	-0.12
6	3	0.07	0.08	-0.06	0.06	0.11	0.06	-0.05	-0.09	0.05
7	3	-0.04	0.06	-0.25	-0.12	0.21	-0.28	0.11	-0.18	-0.32
8	4	0.21	-0.04	-0.33	0.02	0.00	0.04	-0.09	0.04	-0.01
9	6	-0.07	0.02	0.03	-0.28	0.02	0.03	0.24	-0.01	0.00
10	6	0.09	-0.03	-0.01	-0.04	-0.04	-0.02	0.34	-0.07	-0.04
11	6	-0.17	0.06	-0.01	-0.30	0.08	-0.02	0.00	0.04	-0.04
12	1	-0.11	0.02	0.07	-0.43	0.03	0.09	0.35	-0.02	0.04
13	6	0.09	-0.02	-0.06	0.10	-0.03	-0.09	0.15	-0.05	-0.09
14	1	0.19	-0.07	0.01	0.03	-0.10	0.00	0.53	-0.11	-0.03
15	6	-0.07	0.04	-0.06	-0.06	0.04	-0.09	-0.06	0.02	-0.09
16	1	-0.30	0.10	0.01	-0.46	0.14	0.00	-0.11	0.08	-0.02
17	1	0.18	-0.05	-0.08	0.26	-0.08	-0.12	0.14	-0.06	-0.11
18	1	-0.08	0.05	-0.07	0.03	0.05	-0.13	-0.18	0.05	-0.10

	7	8	9
	A	A	A
Frequencies --	104.2439	131.6458	143.8316
Red. masses --	9.6544	7.5079	6.5567
Frc consts --	0.0618	0.0767	0.0799
IR Inten --	9.0200	2.4335	1.0499

Atom	AN	X	Y	Z	X	Y	Z	X	Y	Z
1	13	0.11	-0.04	-0.03	-0.03	0.01	-0.08	0.22	-0.08	0.01
2	13	-0.16	-0.01	-0.11	0.06	0.00	0.05	0.02	0.07	0.02
3	13	0.21	0.03	-0.10	-0.01	-0.01	0.05	0.07	-0.08	-0.01
4	13	-0.19	0.08	-0.02	0.27	-0.05	-0.09	-0.10	-0.01	0.07
5	3	0.05	0.00	0.48	-0.08	0.18	-0.22	-0.05	0.24	0.11

6	3	-0.10	-0.02	0.71	-0.18	-0.01	0.46	-0.02	0.02	-0.39
7	3	0.03	-0.04	-0.10	-0.04	-0.14	-0.13	-0.02	-0.13	0.05
8	4	0.01	0.02	-0.03	0.08	0.00	0.13	0.07	0.11	-0.07
9	6	0.05	-0.02	0.04	0.07	0.02	0.03	0.12	0.01	-0.02
10	6	0.02	-0.06	0.01	0.01	-0.01	0.01	-0.02	0.02	-0.01
11	6	0.03	0.02	0.01	-0.10	0.04	0.01	-0.02	0.01	-0.01
12	1	0.09	-0.02	0.08	0.22	0.01	0.05	0.31	0.00	-0.03
13	6	-0.03	-0.05	-0.04	-0.21	0.01	-0.03	-0.26	0.03	0.01
14	1	0.02	-0.10	0.03	0.09	-0.04	0.02	0.03	0.03	-0.01
15	6	-0.02	0.00	-0.05	-0.27	0.04	-0.03	-0.26	0.02	0.01
16	1	0.06	0.05	0.01	-0.10	0.07	0.01	0.03	0.00	-0.01
17	1	-0.14	-0.06	-0.07	-0.38	0.01	-0.04	-0.41	0.05	0.00
18	1	0.05	0.02	-0.08	-0.38	0.07	-0.03	-0.47	0.04	0.04

	10	11	12
	A	A	A
Frequencies --	163.5193	183.4662	227.9619
Red. masses --	10.4590	17.6207	6.7418
Frc consts --	0.1648	0.3495	0.2064
IR Inten --	6.9189	2.4836	44.3937

Atom	AN	X	Y	Z	X	Y	Z	X	Y	Z
1	13	0.15	0.04	0.10	0.15	0.27	-0.20	-0.03	0.01	-0.02
2	13	-0.09	-0.11	-0.12	-0.07	0.24	0.24	-0.01	-0.02	-0.03
3	13	-0.22	0.21	-0.07	-0.07	-0.21	0.19	-0.06	-0.04	0.02
4	13	0.18	-0.02	0.07	-0.09	-0.32	-0.27	-0.01	0.01	-0.01
5	3	0.33	-0.63	0.26	0.29	-0.43	0.23	0.03	-0.02	0.03
6	3	0.07	0.01	-0.07	0.06	0.04	0.10	0.04	0.58	0.02
7	3	-0.06	-0.10	-0.01	-0.02	-0.01	0.00	0.32	0.55	0.04
8	4	0.05	-0.01	-0.09	-0.04	0.30	-0.15	0.01	-0.03	0.06
9	6	0.05	0.03	0.00	-0.02	0.01	0.00	0.11	-0.10	-0.01
10	6	-0.01	0.02	0.00	-0.03	0.01	0.00	0.07	-0.10	-0.01
11	6	-0.03	0.03	0.00	0.02	0.00	0.00	0.04	-0.11	-0.01
12	1	0.16	0.02	0.00	-0.04	0.01	0.00	0.17	-0.10	-0.02
13	6	-0.14	0.03	0.00	0.01	0.01	0.00	-0.08	-0.09	-0.01
14	1	0.03	0.02	0.00	-0.06	0.02	0.00	0.08	-0.10	-0.01
15	6	-0.15	0.03	0.00	0.04	0.01	0.00	-0.12	-0.09	0.00
16	1	-0.01	0.04	0.00	0.05	0.00	0.00	0.03	-0.11	-0.01
17	1	-0.22	0.03	-0.01	0.00	0.01	0.00	-0.17	-0.09	-0.01
18	1	-0.25	0.05	0.01	0.11	0.00	-0.01	-0.19	-0.09	0.02

	13	14	15
	A	A	A
Frequencies --	228.5576	245.7823	258.3024
Red. masses --	10.7033	16.5077	21.8917
Frc consts --	0.3294	0.5875	0.8606
IR Inten --	1.4162	3.6474	10.6125

Atom	AN	X	Y	Z	X	Y	Z	X	Y	Z
1	13	-0.11	-0.03	0.00	-0.05	-0.17	0.17	-0.02	0.00	-0.13
2	13	0.29	0.08	-0.13	0.00	0.08	0.16	0.13	-0.02	0.51
3	13	-0.21	0.01	-0.01	0.19	0.41	-0.08	-0.09	-0.08	-0.63
4	13	0.02	-0.13	-0.04	0.02	-0.37	-0.07	0.06	0.08	0.16
5	3	0.02	0.39	0.79	0.01	0.12	-0.14	-0.24	-0.22	0.22
6	3	-0.09	-0.06	0.02	-0.14	0.05	0.01	-0.05	0.07	0.07
7	3	0.00	-0.03	0.03	0.12	0.20	-0.06	0.03	0.04	0.10
8	4	0.01	-0.06	-0.03	-0.42	0.07	-0.48	-0.05	0.20	0.09
9	6	-0.02	0.00	-0.01	0.02	-0.03	0.01	-0.02	-0.01	-0.01
10	6	0.02	0.01	-0.01	-0.03	-0.03	0.01	0.03	-0.01	-0.02
11	6	-0.02	0.00	-0.01	0.04	-0.03	0.01	-0.04	-0.01	-0.02
12	1	-0.05	0.01	-0.01	0.02	-0.03	0.01	-0.05	-0.01	-0.02
13	6	0.05	0.00	-0.01	-0.05	-0.02	0.02	0.05	-0.01	-0.02
14	1	0.03	0.00	-0.01	-0.07	-0.02	0.01	0.05	-0.01	-0.02
15	6	0.02	0.01	-0.01	0.00	-0.03	0.02	-0.01	0.00	-0.02
16	1	-0.05	0.01	-0.01	0.08	-0.04	0.01	-0.08	-0.01	-0.01
17	1	0.09	0.00	-0.01	-0.09	-0.02	0.02	0.06	-0.01	-0.02
18	1	0.04	0.00	-0.01	0.00	-0.03	0.01	0.02	-0.01	-0.02

	16	17	18
	A	A	A
Frequencies --	294.1730	320.2385	338.7340
Red. masses --	6.0265	18.2064	7.3009
Frc consts --	0.3073	1.1001	0.4936
IR Inten --	0.2555	1.2430	20.8286

Atom	AN	X	Y	Z	X	Y	Z	X	Y	Z
1	13	0.03	0.00	0.02	0.03	-0.02	0.46	-0.05	-0.04	0.01
2	13	-0.02	0.00	-0.01	0.06	0.02	0.06	0.01	0.01	0.01
3	13	0.02	0.04	0.01	-0.01	-0.22	-0.04	0.01	0.06	-0.03
4	13	-0.02	-0.03	-0.03	0.09	0.27	-0.45	-0.05	-0.06	-0.04
5	3	0.03	0.01	-0.05	-0.27	-0.13	0.14	0.00	0.05	-0.02
6	3	-0.08	-0.04	0.06	0.32	-0.08	0.04	0.45	0.62	0.05
7	3	0.03	-0.02	0.72	-0.04	0.05	0.04	-0.31	-0.50	0.02
8	4	0.02	-0.01	0.05	-0.35	-0.07	-0.22	0.03	-0.05	0.13
9	6	-0.02	0.00	-0.08	0.03	0.01	0.00	0.02	0.00	0.00
10	6	0.17	0.00	-0.08	0.02	0.01	-0.01	0.00	0.00	0.00
11	6	-0.20	0.01	-0.07	-0.03	0.01	0.00	-0.01	0.00	0.00
12	1	-0.05	0.00	-0.09	0.08	0.01	0.00	0.09	0.00	0.00
13	6	0.16	-0.01	-0.09	-0.05	0.00	-0.01	0.03	0.00	0.00
14	1	0.30	-0.01	-0.08	0.04	0.00	0.00	0.06	0.01	0.00
15	6	-0.13	0.01	-0.09	-0.08	0.01	-0.01	0.02	0.00	-0.01
16	1	-0.34	0.02	-0.06	-0.04	0.02	0.00	0.03	0.01	0.00
17	1	0.22	-0.01	-0.08	-0.10	0.01	-0.02	0.05	-0.01	-0.01
18	1	-0.14	0.01	-0.07	-0.12	0.01	0.01	0.07	-0.02	0.01

		19			20			21		
		A			A			A		
Frequencies --		349.9145			370.0890			374.4224		
Red. masses --		11.3199			8.0430			7.0763		
Frc consts --		0.8166			0.6491			0.5845		
IR Inten --		10.9898			50.7993			86.7219		
Atom	AN	X	Y	Z	X	Y	Z	X	Y	Z
1	13	-0.07	-0.03	-0.12	-0.04	-0.04	0.07	-0.10	-0.02	-0.08
2	13	0.02	0.05	-0.07	-0.10	-0.06	0.07	-0.02	-0.01	0.02
3	13	0.04	-0.14	0.13	-0.06	-0.11	-0.05	-0.01	-0.01	-0.01
4	13	0.16	0.11	0.23	0.04	0.08	-0.01	-0.01	-0.01	0.08
5	3	-0.25	-0.16	0.09	0.79	0.39	-0.08	0.25	0.15	-0.02
6	3	-0.03	0.26	0.12	-0.25	0.15	0.00	0.73	-0.36	0.13
7	3	-0.09	-0.17	0.15	-0.01	-0.13	-0.01	-0.05	0.24	0.05
8	4	-0.25	0.11	-0.71	-0.05	0.11	-0.16	-0.08	0.02	-0.09
9	6	0.00	-0.01	-0.01	-0.02	-0.01	0.00	0.06	0.03	0.00
10	6	0.02	0.00	-0.01	-0.01	0.00	0.00	0.03	0.01	0.00
11	6	-0.01	-0.01	-0.01	0.01	-0.01	0.00	-0.03	0.02	-0.01
12	1	0.01	-0.01	-0.02	-0.03	-0.01	0.00	0.11	0.03	0.00
13	6	0.05	-0.01	-0.01	0.04	0.00	0.01	-0.09	0.01	-0.02
14	1	0.03	0.00	-0.01	-0.01	0.00	0.00	0.05	0.01	0.00
15	6	0.00	0.00	-0.01	0.04	0.00	0.00	-0.11	0.01	-0.01
16	1	0.01	-0.01	-0.01	0.03	-0.01	0.00	-0.05	0.04	0.00
17	1	0.04	-0.01	-0.01	0.08	-0.01	0.01	-0.20	0.02	-0.04
18	1	0.08	-0.02	-0.02	0.10	-0.01	-0.01	-0.19	0.02	0.02

		22			23			24		
		A			A			A		
Frequencies --		456.2783			479.5525			526.6739		
Red. masses --		10.3820			5.6725			10.2077		
Frc consts --		1.2735			0.7686			1.6682		
IR Inten --		5.8547			108.9758			9.1866		
Atom	AN	X	Y	Z	X	Y	Z	X	Y	Z
1	13	-0.07	-0.05	0.04	-0.01	0.00	-0.01	0.18	0.14	-0.10
2	13	-0.12	0.21	0.12	0.00	-0.02	-0.01	-0.02	0.06	0.04
3	13	-0.03	0.01	-0.03	0.00	0.00	0.01	-0.01	0.00	-0.02
4	13	0.01	0.02	-0.02	-0.01	0.00	0.01	0.03	0.01	0.06
5	3	-0.02	0.00	0.01	0.00	0.00	0.00	0.09	0.16	0.01
6	3	0.03	-0.02	0.02	0.15	0.02	0.01	-0.03	0.02	-0.03
7	3	0.14	-0.02	0.00	0.74	-0.32	-0.03	-0.02	-0.03	-0.01
8	4	0.66	-0.57	-0.35	-0.09	0.05	0.02	-0.56	-0.75	0.09
9	6	-0.02	0.01	0.00	-0.11	0.03	0.00	0.00	0.00	0.00
10	6	-0.02	0.01	0.00	-0.11	0.04	0.00	0.00	0.00	0.00
11	6	-0.02	0.01	0.00	-0.11	0.04	0.01	-0.01	0.00	0.00
12	1	-0.08	0.01	0.00	-0.30	0.04	0.01	0.04	0.00	0.00

13	6	-0.01	0.01	0.00	-0.02	0.03	0.00	-0.01	0.00	0.00
14	1	-0.05	0.01	0.00	-0.26	0.05	0.00	0.03	0.00	0.00
15	6	0.00	0.00	0.00	0.01	0.03	0.00	0.01	0.00	0.00
16	1	-0.06	0.01	0.00	-0.26	0.06	0.02	0.00	0.00	0.00
17	1	-0.03	0.01	0.00	-0.13	0.04	-0.01	0.01	0.00	0.00
18	1	-0.03	0.01	0.00	-0.10	0.04	0.02	-0.03	0.00	0.00

	25	26	27
	A	A	A
Frequencies --	619.0554	633.2379	721.4230
Red. masses --	5.2993	3.7892	1.2188
Frc consts --	1.1965	0.8952	0.3737
IR Inten --	1.2500	0.1451	7.5066

Atom	AN	X	Y	Z	X	Y	Z	X	Y	Z
1	13	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
2	13	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
3	13	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
4	13	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
5	3	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
6	3	0.02	-0.01	0.00	-0.01	-0.01	0.00	0.00	-0.01	-0.02
7	3	0.01	-0.01	-0.05	-0.02	0.04	0.00	0.01	0.00	-0.01
8	4	-0.01	-0.01	0.01	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
9	6	-0.01	0.01	0.02	0.33	0.00	-0.01	0.01	0.00	0.00
10	6	-0.20	0.02	-0.01	-0.26	0.00	0.00	0.09	0.01	-0.01
11	6	0.21	-0.02	-0.01	-0.24	0.00	0.01	-0.08	-0.01	0.00
12	1	-0.01	0.01	0.03	0.57	-0.01	-0.01	-0.03	0.00	0.00
13	6	0.38	-0.04	0.00	0.10	-0.01	0.01	0.01	-0.02	0.01
14	1	-0.48	0.03	0.00	-0.42	0.00	0.00	-0.34	0.03	-0.01
15	6	-0.40	0.04	0.02	0.08	-0.01	-0.01	-0.05	0.02	0.02
16	1	0.51	-0.03	-0.02	-0.41	0.00	0.02	0.35	-0.04	-0.02
17	1	0.27	-0.01	0.01	0.21	-0.03	0.00	-0.42	0.03	-0.01
18	1	-0.20	0.01	0.02	0.18	-0.04	0.00	0.74	-0.08	-0.09

	28	29	30
	A	A	A
Frequencies --	738.8130	771.5500	835.4381
Red. masses --	1.2474	1.1649	1.2918
Frc consts --	0.4012	0.4086	0.5312
IR Inten --	105.1336	261.0345	2.3573

Atom	AN	X	Y	Z	X	Y	Z	X	Y	Z
1	13	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
2	13	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
3	13	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
4	13	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
5	3	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
6	3	-0.01	0.01	0.00	-0.01	0.01	0.00	0.00	0.00	-0.01

7	3	-0.02	0.01	0.00	-0.05	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
8	4	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
9	6	-0.04	-0.01	0.00	0.08	0.00	0.00	0.00	0.00	-0.01
10	6	0.01	0.00	0.01	0.06	0.00	0.00	-0.07	-0.01	-0.03
11	6	-0.04	0.00	0.00	0.06	-0.01	0.00	0.07	0.00	-0.03
12	1	0.23	-0.02	0.00	-0.64	0.02	0.01	0.03	0.00	0.07
13	6	0.11	0.00	0.00	0.01	0.00	-0.01	0.04	-0.06	0.04
14	1	-0.12	0.01	0.01	-0.51	0.01	0.00	0.55	0.07	-0.07
15	6	0.08	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	-0.03	0.06	0.04
16	1	0.13	0.00	-0.01	-0.51	0.01	0.02	-0.55	-0.07	-0.03
17	1	-0.77	0.06	-0.09	-0.17	0.02	-0.02	-0.45	-0.05	-0.04
18	1	-0.53	0.05	0.12	-0.13	0.02	0.02	0.37	0.05	-0.06

	31	32	33
	A	A	A
Frequencies --	860.6144	865.5162	885.6963
Red. masses --	4.3258	3.5377	1.2438
Frc consts --	1.8877	1.5614	0.5749
IR Inten --	3.0555	0.2147	0.2624

Atom	AN	X	Y	Z	X	Y	Z	X	Y	Z
1	13	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
2	13	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
3	13	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
4	13	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
5	3	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
6	3	-0.01	0.01	0.00	-0.01	0.00	-0.02	0.00	0.00	0.00
7	3	-0.01	0.00	0.00	0.00	0.00	-0.01	0.00	0.00	0.00
8	4	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
9	6	0.01	0.33	-0.02	0.00	-0.01	0.10	-0.10	0.02	0.00
10	6	-0.02	-0.03	-0.27	-0.04	0.16	0.14	0.07	0.00	-0.02
11	6	0.00	-0.01	0.28	0.04	-0.14	0.14	0.07	0.00	0.01
12	1	-0.11	0.33	-0.04	0.01	-0.04	-0.33	0.70	0.00	-0.02
13	6	0.01	-0.14	-0.02	0.04	0.18	-0.19	-0.02	-0.01	-0.01
14	1	0.11	-0.30	-0.16	0.30	-0.11	0.24	-0.48	-0.01	0.00
15	6	0.01	-0.15	0.02	-0.05	-0.19	-0.16	-0.01	-0.01	0.01
16	1	0.10	-0.27	0.21	-0.27	0.17	0.23	-0.48	0.00	0.03
17	1	-0.12	0.19	0.33	-0.29	0.24	-0.17	0.12	-0.01	0.02
18	1	-0.09	0.13	-0.36	0.29	-0.28	-0.14	0.10	-0.01	-0.02

	34	35	36
	A	A	A
Frequencies --	1025.3746	1031.1389	1076.9870
Red. masses --	1.4866	1.4386	1.2367
Frc consts --	0.9209	0.9012	0.8451
IR Inten --	14.8548	12.6754	0.3220

Atom	AN	X	Y	Z	X	Y	Z	X	Y	Z

1	13	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
2	13	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
3	13	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
4	13	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
5	3	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
6	3	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
7	3	0.00	-0.01	0.00	0.00	0.00	0.01	0.00	0.00	0.00
8	4	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
9	6	0.00	0.11	-0.02	0.00	0.02	0.06	0.00	0.00	0.09
10	6	0.00	-0.03	0.05	-0.01	-0.06	-0.08	0.01	0.06	-0.02
11	6	0.00	-0.05	-0.02	0.01	0.05	-0.09	-0.01	-0.07	-0.01
12	1	-0.02	0.11	-0.09	0.01	0.05	0.52	0.02	0.04	0.68
13	6	-0.01	0.02	-0.10	0.01	0.09	-0.02	-0.01	0.02	-0.04
14	1	0.01	-0.45	0.22	0.04	-0.31	0.01	-0.02	0.42	-0.16
15	6	0.00	0.06	0.10	-0.01	-0.08	0.03	0.01	-0.01	-0.03
16	1	0.00	-0.54	-0.14	-0.04	0.19	-0.06	0.01	-0.50	-0.12
17	1	0.03	-0.25	-0.42	-0.05	0.35	0.26	0.05	-0.06	-0.11
18	1	0.02	-0.10	0.35	0.10	-0.39	0.44	-0.07	0.09	-0.15

	37	38	39
	A	A	A
Frequencies --	1078.4701	1141.9461	1290.5017
Red. masses --	1.2506	5.7419	1.2777
Frc consts --	0.8570	4.4116	1.2537
IR Inten --	2.3306	6.5827	0.0108

Atom	AN	X	Y	Z	X	Y	Z	X	Y	Z
1	13	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
2	13	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
3	13	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
4	13	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
5	3	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
6	3	0.01	0.00	0.00	-0.01	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
7	3	0.00	0.00	0.00	0.01	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
8	4	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
9	6	0.00	-0.02	0.00	0.01	0.30	-0.02	0.00	0.00	-0.07
10	6	0.00	-0.05	0.05	0.02	0.11	0.27	0.00	0.06	-0.03
11	6	0.00	-0.04	-0.04	0.00	0.07	-0.28	-0.01	-0.07	-0.02
12	1	0.02	-0.02	-0.02	-0.02	0.34	0.02	0.01	0.03	0.44
13	6	0.01	0.07	0.05	0.00	-0.22	0.19	0.01	0.05	0.05
14	1	-0.02	-0.43	0.20	-0.02	0.11	0.32	-0.02	-0.41	0.16
15	6	0.00	0.05	-0.06	-0.01	-0.25	-0.16	0.00	-0.04	0.06
16	1	-0.03	-0.38	-0.13	-0.05	-0.01	-0.34	0.03	0.43	0.10
17	1	-0.01	0.39	0.41	-0.06	-0.30	0.14	-0.01	-0.29	-0.33
18	1	-0.03	0.31	-0.42	-0.05	-0.31	-0.12	-0.02	0.24	-0.36

	40	41	42

		A			A			A		
Frequencies --		1373.6374			1386.9481			1468.1274		
Red. masses --		4.4383			4.6345			2.4902		
Frc consts --		4.9341			5.2525			3.1624		
IR Inten --		0.5060			4.5161			0.7594		
Atom	AN	X	Y	Z	X	Y	Z	X	Y	Z
1	13	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
2	13	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
3	13	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
4	13	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
5	3	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
6	3	0.00	0.00	0.00	0.00	-0.01	0.00	0.00	0.00	0.00
7	3	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
8	4	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
9	6	0.01	0.02	0.30	-0.01	0.13	0.00	0.00	-0.10	0.15
10	6	0.01	0.23	-0.16	0.01	-0.20	-0.06	0.00	0.06	-0.15
11	6	-0.02	-0.23	-0.14	0.01	-0.21	0.07	0.01	0.18	-0.01
12	1	-0.01	-0.03	-0.38	0.00	0.14	0.00	-0.02	-0.15	-0.38
13	6	-0.04	-0.19	0.00	0.00	0.16	0.28	0.01	0.09	0.14
14	1	-0.02	-0.44	0.10	-0.02	0.10	-0.18	-0.02	-0.34	-0.02
15	6	0.04	0.17	-0.02	-0.01	0.15	-0.30	-0.01	-0.12	-0.04
16	1	0.03	0.42	0.02	0.00	0.17	0.18	-0.02	-0.48	-0.19
17	1	0.09	0.04	0.28	0.01	-0.39	-0.33	-0.02	-0.38	-0.38
18	1	-0.10	0.03	0.25	0.03	-0.35	0.41	-0.01	-0.09	-0.13

		43			44			45		
		A			A			A		
Frequencies --		1470.0300			3131.1525			3161.0535		
Red. masses --		2.5577			1.0889			1.0944		
Frc consts --		3.2565			6.2897			6.4430		
IR Inten --		0.7748			3.4861			4.5311		
Atom	AN	X	Y	Z	X	Y	Z	X	Y	Z
1	13	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
2	13	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
3	13	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
4	13	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
5	3	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
6	3	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
7	3	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
8	4	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
9	6	0.00	-0.11	-0.16	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
10	6	0.01	0.18	0.01	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.01
11	6	0.01	0.07	0.15	0.00	0.00	-0.01	0.00	0.00	0.00
12	1	0.00	-0.09	0.45	0.00	0.00	0.00	0.00	0.01	0.00
13	6	-0.01	-0.12	0.04	0.00	-0.02	0.02	0.01	0.06	-0.06

14	1	0.00	-0.42	0.26	0.00	0.01	0.02	0.00	-0.05	-0.14
15	6	0.00	0.08	-0.15	0.01	0.07	0.04	0.00	0.02	0.02
16	1	-0.02	-0.28	0.09	0.00	-0.02	0.09	0.00	-0.01	0.06
17	1	0.00	-0.02	0.19	0.04	0.24	-0.21	-0.11	-0.69	0.62
18	1	0.01	-0.31	0.42	-0.17	-0.77	-0.51	-0.06	-0.25	-0.18

	46	47	48
	A	A	A
Frequencies --	3202.9043	3217.6120	3227.1399
Red. masses --	1.0893	1.0945	1.1023
Frc consts --	6.5839	6.6764	6.7636
IR Inten --	1.8059	5.1898	2.7359

Atom	AN	X	Y	Z	X	Y	Z	X	Y	Z
1	13	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
2	13	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
3	13	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
4	13	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
5	3	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
6	3	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
7	3	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
8	4	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
9	6	0.00	-0.07	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	-0.05	0.00
10	6	0.00	0.01	0.03	0.00	-0.02	-0.06	0.00	-0.02	-0.05
11	6	0.00	0.01	-0.03	0.00	0.02	-0.06	0.00	-0.01	0.05
12	1	0.02	0.82	-0.05	0.00	0.03	-0.01	0.02	0.57	-0.04
13	6	0.00	-0.01	0.01	0.00	0.01	0.00	0.00	0.01	-0.01
14	1	-0.01	-0.15	-0.37	0.02	0.26	0.66	0.01	0.20	0.51
15	6	0.00	0.00	0.00	0.00	-0.01	0.00	0.00	0.01	0.00
16	1	0.01	-0.10	0.38	0.02	-0.17	0.66	-0.02	0.14	-0.58
17	1	0.01	0.06	-0.05	-0.01	-0.07	0.05	-0.01	-0.07	0.06
18	1	0.01	0.04	0.03	0.01	0.04	0.03	-0.01	-0.06	-0.04

$CpBeAl_4Li_3 \rightarrow CpLi + Al_4Li_2Be$ **-25.8644983**

$CpBeAl_4Li_3 \rightarrow Cp^- + Al_4Li_3Be^+$ **-148.4098873**

Charge = 0 Multiplicity = 1

Al,0,-0.1960046026,1.9394409092,1.2683875525

Al,0,2.0578848558,0.6118285354,1.2740221804

Al,0,1.9747787082,0.6521989767,-1.3831131829

Al,0,-0.2788830524,1.9722585188,-1.2154590416

Li,0,-2.3795774518,0.5507395408,0.0891542091

Li,0,-0.400689713,-0.9333243187,-0.0399071358

Li,0,1.9008972658,3.3590000798,-0.0359771716

Be,0,3.6469659997,1.5595578708,-0.0931059427
C,0,-0.8138781359,-2.931550543,0.6588068554
C,0,-1.8571486593,-2.1586064423,1.207897165
C,0,-0.9332230089,-2.8985075888,-0.7573269611
H,0,-0.0595429984,-3.4666527697,1.2213151621
C,0,-2.6318327489,-1.6402256527,0.1288054808
H,0,-2.0585000444,-2.0197772583,2.2621311131
C,0,-2.0528464379,-2.1075792287,-1.0876863276
H,0,-0.2871240663,-3.4047382346,-1.4630431807
H,0,-3.6321091411,-1.215017619,0.2254308143
H,0,-2.4299909241,-1.9269249959,-2.0860847263

State=1-A\HF=-1200.7207752

		1			2			3		
		A			A			A		
Frequencies --		-17.5153			18.4056			41.5955		
Red. masses --		4.5327			14.3411			11.6846		
Frc consts --		0.0008			0.0029			0.0119		
IR Inten --		0.1885			0.0355			0.1701		
Atom	AN	X	Y	Z	X	Y	Z	X	Y	Z
1	13	-0.03	-0.09	0.04	-0.13	-0.12	-0.10	-0.12	-0.14	0.01
2	13	0.05	-0.08	0.00	0.38	-0.05	0.26	0.20	-0.07	-0.05
3	13	-0.05	0.07	0.00	-0.29	0.02	0.26	0.31	-0.08	-0.03
4	13	0.03	0.08	0.04	0.09	0.07	-0.10	-0.12	-0.16	0.00
5	3	0.00	0.01	0.11	-0.01	0.01	-0.12	-0.04	0.00	-0.03
6	3	0.00	0.01	-0.16	-0.02	0.01	-0.08	-0.11	-0.01	0.00
7	3	0.00	0.00	0.01	0.00	0.04	-0.13	0.00	0.27	0.03
8	4	0.01	0.00	-0.11	0.07	0.05	-0.27	0.41	0.25	0.05
9	6	0.04	0.11	0.14	-0.02	-0.05	-0.17	-0.19	0.13	0.03
10	6	0.05	0.20	-0.07	0.02	-0.10	-0.03	-0.13	0.14	0.02
11	6	-0.04	-0.12	0.13	-0.05	0.10	-0.16	-0.20	0.12	0.02
12	1	0.08	0.21	0.29	-0.01	-0.11	-0.27	-0.23	0.13	0.03
13	6	-0.01	0.01	-0.21	-0.01	0.01	0.07	-0.10	0.13	0.01
14	1	0.09	0.36	-0.11	0.06	-0.21	0.00	-0.11	0.15	0.01
15	6	-0.06	-0.18	-0.09	-0.06	0.14	-0.01	-0.14	0.12	0.02
16	1	-0.07	-0.24	0.27	-0.08	0.17	-0.25	-0.25	0.11	0.03
17	1	-0.02	0.02	-0.38	0.01	0.01	0.20	-0.05	0.15	0.01
18	1	-0.10	-0.34	-0.14	-0.09	0.25	0.03	-0.14	0.12	0.01

	4	5	6
	A	A	A
Frequencies --	47.7736	53.1333	84.5600
Red. masses --	6.3110	6.3867	7.4534
Frc consts --	0.0085	0.0106	0.0314
IR Inten --	0.8264	0.1848	3.3246

Atom	AN	X	Y	Z	X	Y	Z	X	Y	Z
1	13	-0.15	-0.05	-0.06	0.13	0.05	0.01	0.16	0.09	0.00
2	13	-0.13	-0.05	0.00	-0.02	0.04	0.07	0.06	0.08	0.00
3	13	0.10	0.06	0.00	0.03	-0.04	0.07	0.06	0.08	0.00
4	13	0.15	0.06	-0.06	-0.12	-0.05	0.01	0.17	0.09	0.01
5	3	0.00	0.01	-0.31	0.01	0.00	0.45	0.08	-0.20	-0.03
6	3	0.01	0.01	-0.25	-0.01	0.01	-0.41	-0.16	-0.28	-0.01
7	3	0.00	-0.01	0.14	0.00	0.00	-0.24	0.13	-0.11	0.02
8	4	-0.02	-0.01	0.12	0.01	0.00	0.13	-0.03	-0.10	-0.01
9	6	0.14	-0.02	0.03	0.11	-0.02	-0.10	-0.32	-0.07	0.01
10	6	0.23	-0.04	0.09	0.18	-0.03	-0.06	-0.14	-0.06	0.00
11	6	-0.12	0.01	0.04	-0.13	0.02	-0.10	-0.32	-0.08	0.01
12	1	0.25	-0.04	-0.01	0.21	-0.03	-0.14	-0.45	-0.08	0.01
13	6	0.02	-0.01	0.13	0.00	0.00	-0.02	-0.02	-0.05	0.00
14	1	0.43	-0.06	0.10	0.33	-0.06	-0.04	-0.10	-0.05	0.00
15	6	-0.20	0.02	0.10	-0.19	0.02	-0.04	-0.14	-0.06	0.00
16	1	-0.24	0.03	0.01	-0.24	0.03	-0.12	-0.45	-0.09	0.01
17	1	0.03	-0.01	0.22	-0.01	-0.01	0.04	0.11	-0.01	-0.01
18	1	-0.40	0.05	0.13	-0.34	0.05	-0.02	-0.10	-0.05	0.00

	7	8	9
	A	A	A
Frequencies --	103.9644	116.3288	153.6112
Red. masses --	8.0904	13.6847	5.2561
Frc consts --	0.0515	0.1091	0.0731
IR Inten --	4.0495	0.3961	1.4388

Atom	AN	X	Y	Z	X	Y	Z	X	Y	Z
1	13	0.04	-0.05	0.13	-0.07	0.19	0.26	-0.02	-0.01	0.01
2	13	-0.06	-0.03	0.04	0.18	0.20	-0.14	-0.10	-0.03	-0.01
3	13	0.05	0.03	0.04	-0.18	-0.20	-0.14	-0.10	-0.02	0.01
4	13	-0.04	0.05	0.13	0.06	-0.19	0.25	-0.04	-0.02	-0.01
5	3	0.01	0.00	-0.53	-0.01	0.01	-0.40	0.25	-0.02	0.01
6	3	0.00	-0.02	0.04	0.00	0.01	-0.18	-0.01	-0.16	-0.01
7	3	0.00	0.02	-0.81	-0.01	-0.01	0.24	-0.07	0.27	0.04
8	4	0.00	0.01	0.03	0.00	-0.01	-0.17	0.08	0.26	0.00
9	6	-0.01	0.00	0.00	0.10	0.01	-0.04	-0.13	-0.03	0.00
10	6	0.00	0.01	-0.01	0.16	0.01	-0.04	0.15	-0.01	0.00
11	6	0.00	-0.01	0.00	-0.09	0.00	-0.04	-0.12	-0.03	0.00
12	1	-0.03	0.01	0.00	0.18	0.01	-0.05	-0.30	-0.04	0.01
13	6	0.02	0.00	-0.02	0.01	0.00	-0.03	0.33	0.00	-0.01
14	1	0.01	0.02	-0.02	0.31	0.02	-0.03	0.22	0.01	-0.01
15	6	0.01	-0.01	-0.01	-0.15	-0.01	-0.03	0.15	-0.01	-0.01
16	1	0.00	-0.01	0.00	-0.18	-0.01	-0.04	-0.29	-0.05	0.01
17	1	0.03	0.01	-0.01	0.02	0.00	0.01	0.51	0.06	-0.01
18	1	0.01	-0.02	-0.02	-0.30	-0.02	-0.02	0.24	0.01	-0.01

		10			11			12		
		A			A			A		
Frequencies --		174.4360			177.2440			205.2280		
Red. masses --		10.0836			11.7419			7.0990		
Frc consts --		0.1808			0.2173			0.1762		
IR Inten --		5.2553			0.8131			24.3921		
Atom	AN	X	Y	Z	X	Y	Z	X	Y	Z
1	13	0.10	0.01	0.01	0.37	0.05	-0.01	-0.04	-0.02	0.00
2	13	-0.11	-0.09	-0.03	-0.02	-0.22	0.06	0.04	0.04	-0.05
3	13	-0.10	-0.20	-0.02	-0.05	0.11	0.06	0.04	0.04	0.05
4	13	0.31	0.04	0.00	-0.21	-0.03	-0.02	-0.05	-0.02	0.00
5	3	-0.05	0.21	0.15	-0.04	0.08	-0.54	0.10	0.60	-0.01
6	3	-0.16	0.31	0.02	-0.05	0.12	0.02	-0.30	0.49	0.04
7	3	0.04	0.37	-0.16	0.01	0.13	0.48	0.12	-0.21	0.00
8	4	0.17	0.37	0.03	0.05	0.13	-0.07	0.04	-0.12	0.00
9	6	0.01	-0.04	0.01	0.06	-0.01	-0.03	-0.10	-0.10	0.00
10	6	-0.16	-0.06	0.01	0.01	-0.01	-0.03	0.02	-0.10	0.00
11	6	0.03	-0.04	0.00	-0.02	-0.01	-0.03	-0.10	-0.10	0.00
12	1	0.10	-0.04	0.00	0.15	0.00	-0.03	-0.14	-0.11	-0.01
13	6	-0.19	-0.05	0.01	-0.10	-0.02	-0.02	0.17	-0.07	-0.01
14	1	-0.21	-0.08	0.01	0.07	0.00	-0.03	0.07	-0.09	0.00
15	6	-0.11	-0.05	0.01	-0.13	-0.03	-0.02	0.02	-0.10	-0.01
16	1	0.15	-0.03	0.00	0.00	-0.01	-0.03	-0.13	-0.10	0.00
17	1	-0.31	-0.09	0.01	-0.14	-0.04	0.00	0.17	-0.07	0.00
18	1	-0.13	-0.06	0.01	-0.24	-0.04	-0.02	0.08	-0.09	-0.01

		13			14			15		
		A			A			A		
Frequencies --		240.7438			254.8384			261.6489		
Red. masses --		20.0266			22.9259			13.3246		
Frc consts --		0.6839			0.8772			0.5375		
IR Inten --		2.7118			3.6129			3.3265		
Atom	AN	X	Y	Z	X	Y	Z	X	Y	Z
1	13	0.03	-0.09	-0.14	-0.17	0.41	0.00	-0.06	0.33	0.04
2	13	0.07	0.03	0.53	-0.02	-0.34	0.04	0.11	-0.29	0.02
3	13	0.07	0.01	-0.54	-0.02	0.44	0.01	0.12	-0.20	-0.02
4	13	0.02	-0.06	0.14	0.18	-0.52	0.01	-0.01	0.23	-0.04
5	3	-0.02	0.20	0.00	0.02	-0.02	0.19	-0.14	0.12	0.03
6	3	-0.04	0.11	0.01	0.00	-0.01	-0.06	0.02	0.01	-0.01
7	3	-0.15	0.15	0.00	0.13	0.00	-0.28	-0.69	0.05	-0.04
8	4	-0.44	0.15	0.01	-0.02	0.06	-0.15	0.02	-0.28	-0.02
9	6	-0.05	-0.03	0.00	-0.02	0.00	0.02	-0.06	-0.01	0.00
10	6	0.02	-0.02	0.00	-0.05	-0.01	0.02	0.04	0.00	0.00
11	6	-0.05	-0.03	0.00	0.04	0.01	0.01	-0.05	-0.01	0.00
12	1	-0.09	-0.03	0.00	-0.03	0.00	0.01	-0.12	-0.02	0.00

13	6	0.08	-0.01	0.00	-0.02	0.00	0.02	0.11	0.00	0.00
14	1	0.04	-0.02	0.00	-0.11	-0.01	0.02	0.06	0.00	0.00
15	6	0.02	-0.02	0.00	0.04	0.01	0.02	0.06	0.00	0.00
16	1	-0.10	-0.03	0.00	0.07	0.01	0.01	-0.10	-0.01	0.01
17	1	0.10	-0.01	0.00	-0.03	0.00	0.01	0.13	0.01	0.00
18	1	0.04	-0.02	0.00	0.08	0.01	0.01	0.10	0.00	0.00

	16	17	18
	A	A	A
Frequencies --	302.2382	307.5820	338.1476
Red. masses --	9.6718	5.7909	10.6319
Frc consts --	0.5205	0.3228	0.7163
IR Inten --	1.3222	0.1576	13.1312

Atom	AN	X	Y	Z	X	Y	Z	X	Y	Z
1	13	-0.10	0.15	0.01	-0.03	0.02	0.00	-0.01	-0.01	0.28
2	13	-0.03	-0.14	0.10	-0.01	-0.02	0.00	0.00	0.03	0.10
3	13	-0.03	-0.14	-0.10	0.01	0.00	-0.01	-0.01	0.04	-0.11
4	13	-0.11	0.15	-0.01	0.01	0.00	-0.01	-0.01	0.01	-0.28
5	3	-0.13	-0.02	-0.01	0.01	-0.02	0.11	0.47	-0.28	-0.01
6	3	0.06	-0.09	-0.07	0.02	-0.03	0.72	-0.22	0.19	0.00
7	3	0.79	-0.36	0.01	0.04	-0.02	-0.05	-0.30	-0.45	0.00
8	4	0.20	0.20	0.00	0.01	0.01	0.00	0.13	0.24	0.04
9	6	-0.02	0.01	0.01	0.10	0.01	-0.08	0.06	0.00	0.00
10	6	0.00	0.01	0.01	0.20	0.03	-0.08	-0.05	0.00	0.00
11	6	0.00	0.01	0.01	-0.10	0.00	-0.08	0.06	0.00	0.00
12	1	-0.06	0.01	0.01	0.18	0.01	-0.08	0.14	0.01	0.00
13	6	0.03	0.01	0.01	0.00	0.01	-0.09	-0.08	0.00	0.00
14	1	0.00	0.01	0.01	0.34	0.04	-0.08	-0.07	-0.01	0.00
15	6	0.04	0.01	0.00	-0.20	-0.02	-0.07	-0.04	0.00	0.01
16	1	-0.03	0.01	0.01	-0.19	-0.01	-0.07	0.14	0.01	0.00
17	1	0.04	0.01	0.00	0.00	0.00	-0.06	-0.01	0.02	0.00
18	1	0.06	0.02	0.00	-0.33	-0.03	-0.06	-0.06	-0.01	0.01

	19	20	21
	A	A	A
Frequencies --	346.7468	354.0129	356.5645
Red. masses --	10.3188	11.3720	7.9788
Frc consts --	0.7310	0.8397	0.5977
IR Inten --	19.8234	7.0957	17.0028

Atom	AN	X	Y	Z	X	Y	Z	X	Y	Z
1	13	-0.03	-0.01	0.26	-0.02	0.03	-0.01	0.06	-0.06	0.14
2	13	0.00	0.00	0.05	-0.20	0.09	0.13	-0.04	0.05	0.03
3	13	0.02	-0.02	-0.04	0.20	-0.10	0.13	0.00	0.03	0.00
4	13	-0.03	0.00	-0.26	0.00	-0.02	0.04	0.06	-0.06	-0.14
5	3	0.05	0.08	0.00	0.09	-0.09	0.03	-0.46	0.52	0.02
6	3	0.04	-0.01	-0.01	-0.06	0.06	-0.02	0.37	-0.39	-0.01

7	3	0.41	0.67	0.01	-0.01	-0.02	0.06	-0.16	-0.23	0.00
8	4	-0.20	-0.43	-0.05	0.02	0.01	-0.91	0.06	0.18	-0.09
9	6	-0.01	-0.01	0.00	0.01	0.00	0.00	-0.05	0.00	0.00
10	6	-0.02	-0.01	0.00	0.00	0.00	0.00	0.01	0.00	0.00
11	6	0.00	-0.01	0.00	0.00	0.00	0.00	-0.05	0.00	0.00
12	1	-0.01	-0.01	0.00	0.03	0.00	0.00	-0.15	-0.01	0.01
13	6	-0.01	0.00	0.00	-0.01	0.00	0.00	0.02	0.00	0.00
14	1	-0.03	-0.01	0.00	0.01	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
15	6	-0.01	-0.01	0.00	0.00	0.00	0.00	0.01	0.00	0.00
16	1	0.00	-0.01	0.00	0.02	0.00	0.00	-0.15	-0.01	0.00
17	1	-0.02	-0.01	0.00	0.01	0.01	0.00	-0.10	-0.03	0.00
18	1	-0.02	-0.01	0.00	-0.02	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00

	22	23	24
	A	A	A
Frequencies --	389.1870	444.6987	494.2193
Red. masses --	6.7252	10.3520	5.6978
Frc consts --	0.6002	1.2062	0.8200
IR Inten --	81.5115	5.5000	81.1375

Atom	AN	X	Y	Z	X	Y	Z	X	Y	Z
1	13	-0.04	0.03	-0.06	0.01	-0.01	-0.03	-0.01	0.00	-0.01
2	13	0.00	-0.01	0.01	-0.12	0.08	0.13	-0.01	0.00	0.00
3	13	-0.01	-0.01	-0.01	-0.12	0.08	-0.13	-0.01	0.00	0.00
4	13	-0.04	0.03	0.06	0.01	-0.01	0.03	-0.01	0.00	0.01
5	3	0.65	0.42	0.00	-0.12	-0.03	0.00	0.11	-0.14	-0.01
6	3	0.18	-0.38	-0.02	-0.05	0.00	0.00	0.70	0.42	0.00
7	3	-0.02	0.02	0.00	-0.12	0.08	0.00	-0.01	-0.01	0.00
8	4	0.06	-0.06	0.00	0.81	-0.47	0.00	0.03	-0.01	0.00
9	6	0.06	-0.01	0.00	0.00	0.01	0.00	-0.10	-0.03	0.00
10	6	-0.12	-0.02	-0.01	0.02	0.00	0.00	-0.08	-0.04	0.00
11	6	0.06	-0.01	-0.01	0.00	0.01	0.00	-0.10	-0.03	0.01
12	1	0.10	-0.01	0.01	0.01	0.01	0.00	-0.28	-0.05	-0.01
13	6	-0.16	0.00	0.01	0.01	0.00	0.00	0.05	-0.01	0.00
14	1	-0.20	-0.04	0.00	0.03	0.01	0.00	-0.21	-0.06	0.00
15	6	-0.12	-0.02	0.02	0.01	0.00	0.00	-0.08	-0.04	0.00
16	1	0.10	0.00	-0.02	0.01	0.01	0.00	-0.27	-0.05	0.02
17	1	-0.21	-0.02	0.01	-0.01	0.00	0.00	-0.07	-0.05	0.00
18	1	-0.20	-0.03	0.02	0.03	0.01	0.00	-0.20	-0.06	0.01

	25	26	27
	A	A	A
Frequencies --	625.3040	633.8150	743.4128
Red. masses --	5.4406	3.9663	1.2159
Frc consts --	1.2534	0.9388	0.3959
IR Inten --	18.9330	0.0800	16.2565

Atom	AN	X	Y	Z	X	Y	Z	X	Y	Z

1	13	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
2	13	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
3	13	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
4	13	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
5	3	-0.08	-0.04	0.00	-0.01	0.00	-0.01	0.02	-0.01	0.00
6	3	-0.07	-0.08	-0.01	0.00	-0.01	0.03	-0.01	-0.01	0.00
7	3	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
8	4	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
9	6	0.09	0.03	0.02	0.32	0.01	0.00	-0.05	0.00	0.01
10	6	-0.27	-0.03	0.00	-0.20	-0.02	-0.01	0.05	-0.01	-0.01
11	6	0.14	0.03	-0.02	-0.31	-0.01	0.01	-0.06	0.00	-0.01
12	1	0.19	0.04	0.02	0.54	0.03	-0.01	0.24	0.03	0.01
13	6	0.44	0.08	-0.01	0.03	0.00	0.01	0.06	0.06	0.00
14	1	-0.46	-0.04	0.00	-0.33	-0.04	0.00	-0.08	-0.05	-0.01
15	6	-0.30	-0.04	0.01	0.17	0.02	-0.01	0.04	-0.01	0.01
16	1	0.29	0.04	-0.02	-0.50	-0.02	0.01	0.29	0.03	-0.03
17	1	0.14	-0.01	0.00	0.01	0.01	-0.06	-0.87	-0.25	0.01
18	1	-0.48	-0.05	0.03	0.27	0.04	-0.02	0.02	-0.03	0.00

	28	29	30
	A	A	A
Frequencies --	750.7820	773.9940	848.2991
Red. masses --	1.2633	1.1469	1.5969
Frc consts --	0.4195	0.4048	0.6771
IR Inten --	4.3094	347.5885	4.5156

Atom	AN	X	Y	Z	X	Y	Z	X	Y	Z
1	13	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
2	13	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
3	13	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
4	13	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
5	3	0.00	0.00	-0.01	0.00	0.00	0.00	0.00	-0.01	0.00
6	3	0.00	0.00	-0.01	-0.05	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
7	3	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
8	4	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
9	6	0.06	0.00	0.00	0.06	0.00	0.00	0.05	-0.04	0.00
10	6	0.09	0.01	-0.01	0.05	0.00	-0.01	-0.06	-0.02	-0.09
11	6	-0.05	0.00	0.01	0.06	0.00	0.00	0.05	-0.04	-0.01
12	1	-0.36	-0.03	0.01	-0.54	-0.03	0.02	-0.29	0.02	0.14
13	6	-0.01	0.00	0.00	0.01	0.01	0.00	0.00	0.14	0.01
14	1	-0.59	-0.04	-0.02	-0.40	-0.04	-0.02	0.56	-0.10	-0.05
15	6	-0.10	0.00	0.00	0.04	0.00	0.01	-0.06	-0.03	0.09
16	1	0.32	0.03	0.00	-0.53	-0.03	0.01	-0.33	0.04	-0.12
17	1	0.08	0.02	0.09	-0.29	-0.09	0.00	-0.24	0.06	0.01
18	1	0.61	0.05	-0.05	-0.39	-0.04	0.04	0.57	-0.10	0.01

	31	32	33

		A			A			A		
Frequencies --		857.8529			871.7975			887.5343		
Red. masses --		4.2366			2.2570			1.2248		
Frc consts --		1.8369			1.0107			0.5684		
IR Inten --		0.0617			0.8845			0.2229		
Atom	AN	X	Y	Z	X	Y	Z	X	Y	Z
1	13	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
2	13	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
3	13	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
4	13	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
5	3	0.00	0.00	0.00	0.02	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
6	3	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
7	3	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
8	4	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
9	6	-0.02	0.24	-0.19	0.03	0.09	0.04	-0.09	-0.02	0.01
10	6	0.01	0.13	0.17	-0.05	-0.02	0.17	0.05	-0.01	0.00
11	6	0.01	-0.21	-0.22	0.03	0.10	-0.02	0.08	0.01	0.01
12	1	0.04	0.32	-0.09	-0.25	-0.07	-0.19	0.62	0.03	-0.01
13	6	0.00	-0.01	0.11	0.04	-0.16	-0.01	0.00	0.00	-0.01
14	1	-0.11	-0.26	0.27	0.41	0.14	0.15	-0.37	-0.03	-0.02
15	6	0.00	-0.15	0.14	-0.06	0.00	-0.17	-0.04	0.01	0.00
16	1	-0.05	-0.31	-0.11	-0.28	-0.09	0.19	-0.60	-0.03	0.02
17	1	0.00	0.02	-0.43	-0.37	-0.29	-0.01	0.01	0.00	0.00
18	1	0.14	0.24	0.28	0.42	0.15	-0.16	0.33	0.02	-0.03

		34			35			36		
		A			A			A		
Frequencies --		1015.9423			1023.1621			1073.6905		
Red. masses --		1.4008			1.4849			1.2534		
Frc consts --		0.8519			0.9159			0.8513		
IR Inten --		7.8137			17.4249			2.7256		
Atom	AN	X	Y	Z	X	Y	Z	X	Y	Z
1	13	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
2	13	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
3	13	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
4	13	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
5	3	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
6	3	0.00	0.00	0.00	0.00	0.01	0.00	0.00	0.00	0.00
7	3	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
8	4	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
9	6	0.01	-0.08	0.01	0.01	-0.04	0.08	0.00	-0.02	-0.04
10	6	0.01	0.00	0.08	-0.01	0.05	-0.06	-0.01	0.08	0.03
11	6	-0.01	0.08	0.01	0.00	-0.04	-0.09	0.00	0.02	-0.03
12	1	-0.03	-0.25	-0.24	-0.01	0.13	0.37	0.03	-0.20	-0.32
13	6	0.00	0.00	-0.09	0.02	-0.12	0.00	0.00	0.00	0.05

14	1	-0.02	0.05	0.07	0.01	0.54	-0.18	-0.04	0.53	-0.08
15	6	-0.01	-0.01	0.09	-0.01	0.05	0.05	0.01	-0.09	0.02
16	1	0.02	0.29	-0.24	-0.03	0.14	-0.32	-0.04	0.23	-0.29
17	1	-0.02	0.05	-0.82	-0.07	-0.15	0.03	0.01	-0.02	0.38
18	1	0.03	-0.01	0.09	0.02	0.52	0.24	0.03	-0.50	-0.13

	37	38	39
	A	A	A
Frequencies --	1077.8036	1139.8100	1283.6807
Red. masses --	1.2613	5.2160	1.2900
Frc consts --	0.8633	3.9926	1.2525
IR Inten --	0.4008	7.2470	0.0038

Atom	AN	X	Y	Z	X	Y	Z	X	Y	Z
1	13	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
2	13	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
3	13	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
4	13	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
5	3	0.00	0.00	0.00	-0.01	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
6	3	0.00	0.00	0.00	0.01	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
7	3	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
8	4	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
9	6	0.00	0.03	0.08	0.02	-0.24	0.15	0.00	0.03	0.06
10	6	0.01	-0.04	0.05	0.01	0.07	0.25	-0.01	0.06	0.00
11	6	-0.01	0.04	-0.07	0.02	-0.22	-0.18	0.00	-0.04	0.05
12	1	0.00	0.30	0.50	0.00	-0.36	0.04	0.02	-0.23	-0.37
13	6	-0.01	-0.01	0.00	-0.02	0.29	0.02	0.00	0.01	-0.09
14	1	-0.02	-0.34	0.13	-0.07	0.26	0.23	0.04	-0.44	0.13
15	6	0.01	-0.03	-0.05	-0.01	0.09	-0.24	0.01	-0.06	-0.01
16	1	-0.03	0.37	-0.47	0.00	-0.35	-0.08	-0.04	0.28	-0.33
17	1	0.08	0.02	0.00	-0.03	0.32	0.02	0.01	-0.03	0.41
18	1	-0.03	-0.33	-0.17	-0.09	0.28	-0.20	-0.03	0.43	0.18

	40	41	42
	A	A	A
Frequencies --	1376.6091	1380.5778	1462.8834
Red. masses --	4.4241	4.7211	2.4123
Frc consts --	4.9396	5.3017	3.0416
IR Inten --	5.3559	0.0389	1.5938

Atom	AN	X	Y	Z	X	Y	Z	X	Y	Z
1	13	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
2	13	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
3	13	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
4	13	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
5	3	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
6	3	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.01	0.00
7	3	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00

8	4	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
9	6	-0.01	0.15	0.26	-0.01	-0.12	0.03	0.00	-0.03	0.16
10	6	0.04	-0.23	-0.07	0.00	0.21	-0.18	-0.02	0.16	-0.08
11	6	-0.03	0.17	-0.25	0.01	0.14	0.02	-0.01	-0.01	-0.16
12	1	0.01	-0.24	-0.35	0.02	-0.15	-0.01	0.03	-0.30	-0.23
13	6	-0.05	0.12	-0.01	0.01	-0.02	0.37	0.02	-0.12	0.00
14	1	-0.07	0.28	-0.21	0.02	-0.37	-0.05	0.05	-0.52	0.08
15	6	0.04	-0.21	0.06	0.00	-0.21	-0.20	-0.01	0.15	0.10
16	1	0.04	-0.31	0.33	-0.02	0.12	0.05	0.04	-0.31	0.17
17	1	0.16	0.18	0.04	-0.01	0.05	-0.57	0.00	-0.15	-0.02
18	1	-0.05	0.21	0.25	-0.03	0.40	0.02	0.05	-0.52	-0.16

	43	44	45
	A	A	A
Frequencies --	1469.0309	3106.1508	3197.3418
Red. masses --	2.7258	1.0899	1.0876
Frc consts --	3.4658	6.1955	6.5506
IR Inten --	0.5547	8.7282	0.0707

Atom	AN	X	Y	Z	X	Y	Z	X	Y	Z
1	13	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
2	13	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
3	13	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
4	13	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
5	3	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
6	3	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
7	3	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
8	4	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
9	6	0.01	-0.19	-0.10	0.00	0.00	0.00	0.00	-0.04	0.03
10	6	-0.02	0.13	0.09	0.00	0.00	0.00	0.00	-0.01	-0.03
11	6	-0.01	0.19	-0.08	0.00	0.00	0.00	0.00	0.04	0.03
12	1	0.01	0.16	0.48	0.00	0.00	0.00	-0.04	0.50	-0.32
13	6	0.00	0.01	-0.14	-0.03	0.08	0.01	0.00	0.00	0.00
14	1	0.02	-0.18	0.20	0.00	0.02	0.08	-0.01	0.08	0.32
15	6	0.02	-0.13	0.08	0.00	0.00	0.00	0.00	0.01	-0.03
16	1	0.02	-0.23	0.46	0.00	0.00	0.00	0.02	-0.47	-0.39
17	1	0.01	-0.03	0.44	0.31	-0.94	-0.07	0.00	-0.01	0.00
18	1	-0.01	0.13	0.21	-0.01	0.03	-0.08	0.04	-0.14	0.37

	46	47	48
	A	A	A
Frequencies --	3206.0074	3214.9061	3224.5414
Red. masses --	1.0921	1.0962	1.1034
Frc consts --	6.6139	6.6753	6.7597
IR Inten --	3.8641	7.5242	3.2250

Atom	AN	X	Y	Z	X	Y	Z	X	Y	Z
1	13	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00

2	13	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
3	13	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
4	13	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
5	3	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
6	3	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
7	3	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
8	4	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
9	6	0.00	-0.03	0.02	0.00	0.02	-0.01	0.00	-0.04	0.03
10	6	0.00	-0.01	-0.04	0.00	-0.01	-0.05	0.00	0.01	0.04
11	6	0.00	-0.02	-0.02	0.00	-0.03	-0.02	0.00	-0.04	-0.03
12	1	-0.03	0.41	-0.26	0.02	-0.25	0.15	-0.04	0.48	-0.31
13	6	0.00	-0.01	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.01	0.00
14	1	-0.02	0.12	0.50	-0.02	0.16	0.61	0.02	-0.12	-0.45
15	6	0.00	-0.02	0.05	0.00	0.02	-0.05	0.00	0.01	-0.03
16	1	-0.01	0.28	0.23	-0.02	0.33	0.27	-0.02	0.42	0.35
17	1	-0.03	0.08	0.01	0.00	0.00	-0.01	0.02	-0.07	0.00
18	1	-0.05	0.21	-0.55	0.05	-0.20	0.53	0.04	-0.14	0.36

$CpBeAl_4Li_3 \rightarrow CpLi + Al_4Li_2Be$ **-16.1428701**

$CpBeAl_4Li_3 \rightarrow Cp^- + Al_4Li_3Be^+$ **-138.6882591**

Charge = 0 Multiplicity = 1

Al,0,-3.0284639619,0.8600910169,-0.8974478525
Al,0,-0.9502251617,1.6944162677,0.3417975166
Al,0,0.3884917313,-0.2778787874,1.3125549797
Al,0,-3.1879523451,-1.584122993,-0.3445701856
Li,0,1.4153416913,-0.032082581,-1.0620181366
Li,0,-5.3627675856,-0.1127762156,0.1191965963
Li,0,-2.1410212645,-0.6204529787,2.0123408856
Be,0,-1.1082749865,-0.6896775572,-0.3599914382
C,0,2.693826557,-0.216308611,0.9255571498
C,0,3.0431506049,-1.2954495451,0.025463996
C,0,3.0274469522,1.0094098296,0.2295511805
H,0,2.8044934361,-0.3081224334,2.0033998457
C,0,3.4979835927,-0.7478259393,-1.1685556199
H,0,2.9505003196,-2.3499164891,0.2494390319
C,0,3.4901602991,0.6864138939,-1.0414010801
H,0,2.9273871857,2.0051572162,0.6401578824
H,0,3.8150117631,-1.303234163,-2.0426850178
H,0,3.8015872683,1.3907521,-1.8029457405

State=1-A\HF=-1200.7291778

		1			2			3		
		A			A			A		
Frequencies --		37.1050			50.0008			56.2840		
Red. masses --		5.8888			7.8695			5.8058		
Frc consts --		0.0048			0.0116			0.0108		
IR Inten --		2.9719			10.8741			1.2445		
Atom	AN	X	Y	Z	X	Y	Z	X	Y	Z
1	13	-0.09	0.07	0.13	-0.15	0.03	0.01	0.09	0.03	-0.02
2	13	-0.07	0.05	0.10	-0.01	-0.03	-0.17	0.09	-0.11	0.02
3	13	0.00	0.05	-0.03	-0.03	-0.04	-0.14	0.00	-0.15	0.02
4	13	0.07	0.01	-0.16	-0.06	0.03	-0.01	-0.12	0.06	-0.01
5	3	0.04	-0.14	-0.03	0.13	-0.06	-0.06	-0.02	-0.27	-0.01
6	3	0.00	-0.19	0.08	0.13	0.04	0.71	-0.01	0.23	-0.03
7	3	0.01	-0.20	-0.07	-0.01	0.04	-0.08	-0.03	-0.04	0.01
8	4	0.03	0.11	-0.07	-0.02	-0.01	-0.15	-0.04	-0.11	0.03
9	6	0.01	0.14	0.02	-0.02	-0.04	0.04	0.01	0.13	0.00
10	6	0.04	-0.01	0.18	0.11	0.00	0.04	0.18	0.09	0.11
11	6	0.01	0.04	-0.18	0.00	-0.01	0.11	-0.19	0.12	-0.12
12	1	-0.01	0.31	0.04	-0.10	-0.07	0.05	0.02	0.26	0.02
13	6	0.05	-0.19	0.10	0.19	0.05	0.10	0.09	0.05	0.05
14	1	0.05	0.02	0.35	0.13	-0.01	0.00	0.37	0.09	0.22
15	6	0.03	-0.16	-0.13	0.12	0.04	0.14	-0.14	0.07	-0.09
16	1	-0.01	0.11	-0.33	-0.08	-0.03	0.13	-0.36	0.15	-0.22
17	1	0.06	-0.33	0.18	0.29	0.09	0.11	0.18	0.01	0.11
18	1	0.04	-0.27	-0.24	0.15	0.08	0.19	-0.26	0.05	-0.16

		4			5			6		
		A			A			A		
Frequencies --		73.6546			99.8403			113.6557		
Red. masses --		8.3612			8.6162			6.7893		
Frc consts --		0.0267			0.0506			0.0517		
IR Inten --		9.6550			5.3048			2.5876		
Atom	AN	X	Y	Z	X	Y	Z	X	Y	Z
1	13	-0.15	0.05	0.22	0.00	0.05	0.07	0.00	-0.02	-0.10
2	13	0.05	0.03	-0.09	0.14	0.05	-0.15	-0.14	0.11	0.06
3	13	-0.03	-0.05	-0.09	-0.02	0.05	0.22	-0.01	0.18	0.03
4	13	0.01	0.01	0.11	0.13	-0.01	-0.18	-0.01	0.01	0.05
5	3	0.11	-0.18	-0.04	-0.11	-0.28	0.12	0.06	-0.38	0.00
6	3	-0.30	-0.22	-0.54	0.10	-0.28	0.21	-0.01	0.11	-0.04
7	3	-0.04	0.32	0.04	-0.19	0.22	-0.05	0.09	-0.39	0.08
8	4	-0.03	0.06	-0.10	0.08	0.03	0.11	-0.04	0.07	0.08
9	6	0.02	-0.07	-0.03	0.02	-0.12	0.00	0.04	-0.18	-0.06
10	6	0.16	-0.03	-0.03	0.04	-0.05	-0.07	0.19	-0.09	-0.10
11	6	-0.03	-0.03	0.03	-0.16	-0.06	0.03	-0.09	-0.10	0.03
12	1	-0.06	-0.10	-0.02	0.07	-0.17	-0.01	0.00	-0.25	-0.06

13	6	0.19	0.04	0.02	-0.11	0.05	-0.08	0.18	0.04	-0.05
14	1	0.23	-0.04	-0.06	0.16	-0.06	-0.10	0.33	-0.11	-0.16
15	6	0.07	0.03	0.05	-0.25	0.04	-0.02	-0.03	0.03	0.02
16	1	-0.14	-0.05	0.05	-0.23	-0.09	0.08	-0.23	-0.14	0.08
17	1	0.30	0.08	0.03	-0.12	0.12	-0.12	0.30	0.13	-0.06
18	1	0.05	0.07	0.09	-0.40	0.11	-0.02	-0.12	0.11	0.07

	7	8	9
	A	A	A
Frequencies --	115.4879	129.4187	157.6546
Red. masses --	8.7958	10.5617	14.5791
Frc consts --	0.0691	0.1042	0.2135
IR Inten --	41.3861	1.2050	1.8478

Atom	AN	X	Y	Z	X	Y	Z	X	Y	Z
1	13	0.04	0.01	0.01	0.02	0.00	-0.18	-0.22	0.24	-0.25
2	13	0.05	0.05	0.00	-0.20	0.01	0.28	-0.14	-0.28	-0.08
3	13	0.15	0.00	-0.22	-0.04	-0.11	-0.06	0.17	-0.08	0.13
4	13	0.15	0.02	0.09	0.15	-0.02	0.04	0.06	0.27	0.08
5	3	-0.21	-0.05	-0.36	0.03	-0.10	-0.01	-0.04	0.04	0.04
6	3	0.10	-0.01	-0.05	0.18	-0.04	0.14	-0.20	-0.45	-0.02
7	3	0.32	-0.08	-0.01	-0.16	0.76	0.01	0.30	-0.11	0.19
8	4	0.07	0.09	-0.10	0.05	0.09	-0.07	0.09	0.00	0.10
9	6	-0.18	-0.06	0.12	0.01	-0.05	-0.04	0.15	0.00	0.06
10	6	-0.11	-0.04	0.11	0.10	-0.04	-0.02	0.06	0.00	0.03
11	6	-0.28	-0.03	0.10	-0.07	-0.03	-0.05	0.08	0.00	0.02
12	1	-0.01	-0.05	0.11	-0.02	-0.03	-0.04	0.27	0.00	0.05
13	6	-0.15	-0.01	0.12	0.07	-0.02	-0.03	-0.07	0.00	-0.02
14	1	-0.03	-0.05	0.11	0.18	-0.04	-0.01	0.08	0.00	0.04
15	6	-0.26	0.00	0.11	-0.03	-0.02	-0.05	-0.05	0.00	-0.02
16	1	-0.35	-0.04	0.10	-0.15	-0.04	-0.07	0.12	0.00	0.03
17	1	-0.10	0.01	0.12	0.13	-0.01	-0.01	-0.16	-0.01	-0.05
18	1	-0.30	0.02	0.11	-0.08	0.00	-0.05	-0.12	0.00	-0.05

	10	11	12
	A	A	A
Frequencies --	171.8432	188.1059	215.9828
Red. masses --	12.5635	9.5344	6.0780
Frc consts --	0.2186	0.1988	0.1670
IR Inten --	26.6526	3.5776	62.6492

Atom	AN	X	Y	Z	X	Y	Z	X	Y	Z
1	13	-0.05	-0.06	0.09	0.19	0.03	-0.10	0.01	0.03	0.04
2	13	-0.11	-0.10	0.05	0.12	0.11	0.10	-0.01	-0.16	0.00
3	13	0.33	0.20	-0.02	0.01	0.04	-0.08	0.02	0.08	0.10
4	13	-0.23	-0.07	-0.24	-0.21	0.06	0.01	0.07	0.02	-0.03
5	3	-0.10	-0.04	-0.26	-0.01	0.00	-0.14	0.00	-0.04	-0.09
6	3	-0.13	0.19	-0.02	-0.17	-0.77	0.16	0.07	0.08	-0.02

7	3	0.11	0.45	-0.10	-0.04	0.03	0.02	0.06	0.06	0.06
8	4	-0.04	-0.20	0.24	-0.13	-0.16	0.15	0.06	-0.06	0.10
9	6	0.12	-0.06	0.10	-0.12	0.00	-0.04	-0.38	0.02	-0.16
10	6	0.07	-0.03	0.03	-0.04	0.00	-0.02	-0.16	0.01	-0.11
11	6	0.06	-0.04	0.09	-0.04	0.00	-0.01	-0.14	0.02	-0.09
12	1	0.34	-0.09	0.07	-0.12	0.00	-0.04	-0.26	0.01	-0.17
13	6	-0.02	0.00	0.02	0.08	0.00	0.03	0.18	-0.01	0.04
14	1	0.12	-0.04	0.02	-0.07	0.00	-0.03	-0.27	0.01	-0.15
15	6	-0.04	0.00	0.05	0.08	0.00	0.04	0.18	0.00	0.05
16	1	0.09	-0.05	0.12	-0.08	0.00	-0.02	-0.23	0.02	-0.12
17	1	-0.05	0.02	0.00	0.18	0.00	0.06	0.39	-0.01	0.11
18	1	-0.10	0.03	0.05	0.16	0.00	0.07	0.39	-0.01	0.12

	13	14	15
	A	A	A
Frequencies --	244.6454	264.7816	276.6385
Red. masses --	10.7544	8.1304	6.3483
Frc consts --	0.3792	0.3358	0.2862
IR Inten --	0.8466	23.6571	13.4195

Atom	AN	X	Y	Z	X	Y	Z	X	Y	Z
1	13	-0.09	-0.11	-0.07	0.14	0.02	0.08	0.10	-0.01	0.07
2	13	0.03	0.25	-0.04	-0.08	-0.09	-0.02	-0.08	-0.04	-0.05
3	13	0.04	-0.23	0.11	-0.16	0.08	-0.11	-0.07	0.07	0.01
4	13	-0.05	-0.06	-0.16	-0.01	0.04	-0.07	-0.02	0.05	-0.02
5	3	-0.01	0.08	0.11	0.11	-0.41	0.26	0.03	0.59	0.20
6	3	-0.14	0.07	0.05	0.08	-0.07	0.00	0.02	-0.04	0.00
7	3	0.65	0.14	0.41	0.46	0.15	0.29	0.18	0.04	0.02
8	4	-0.11	0.23	0.13	0.01	-0.20	-0.18	0.05	-0.12	-0.10
9	6	-0.10	0.01	-0.04	0.05	0.05	0.02	0.01	-0.11	-0.02
10	6	-0.01	0.00	-0.01	-0.11	0.05	-0.01	0.19	-0.09	0.04
11	6	-0.05	0.01	-0.04	0.11	0.03	0.06	-0.19	-0.08	-0.06
12	1	-0.05	0.03	-0.05	-0.15	0.00	0.03	-0.05	-0.05	-0.01
13	6	0.07	-0.01	0.02	-0.13	0.05	-0.03	0.10	-0.07	0.01
14	1	-0.02	0.00	-0.01	-0.20	0.05	-0.03	0.35	-0.10	0.07
15	6	0.05	-0.01	0.01	-0.01	0.03	0.01	-0.12	-0.06	-0.05
16	1	-0.09	0.01	-0.06	0.20	0.03	0.09	-0.33	-0.08	-0.09
17	1	0.12	-0.02	0.04	-0.26	0.05	-0.08	0.17	-0.06	0.03
18	1	0.11	-0.02	0.02	-0.04	0.03	-0.01	-0.23	-0.04	-0.08

	16	17	18
	A	A	A
Frequencies --	292.5141	303.4371	337.3824
Red. masses --	8.9516	15.1066	12.8455
Frc consts --	0.4513	0.8195	0.8615
IR Inten --	7.1661	2.1150	93.5400

Atom	AN	X	Y	Z	X	Y	Z	X	Y	Z

1	13	0.03	-0.16	0.03	-0.15	0.16	-0.16	0.06	0.33	0.04
2	13	-0.07	0.07	0.02	0.32	-0.19	0.18	-0.19	0.12	-0.12
3	13	0.07	-0.05	0.12	-0.04	0.22	0.03	0.10	-0.13	0.04
4	13	-0.04	0.15	0.07	-0.09	-0.30	0.05	-0.13	-0.25	0.09
5	3	0.04	-0.18	0.22	0.08	0.04	0.30	-0.03	-0.04	0.21
6	3	-0.23	-0.03	0.06	-0.14	0.02	0.05	0.64	-0.13	-0.19
7	3	0.26	0.06	-0.76	0.36	0.09	-0.28	0.15	-0.03	-0.35
8	4	0.19	-0.02	-0.23	-0.19	0.29	-0.32	-0.10	-0.09	0.14
9	6	-0.08	0.02	-0.03	-0.02	-0.02	-0.01	-0.05	0.01	-0.02
10	6	-0.07	0.01	-0.03	0.02	-0.02	0.01	-0.02	0.00	-0.01
11	6	-0.01	0.02	-0.01	-0.05	-0.01	-0.01	0.00	0.01	-0.01
12	1	0.01	0.00	-0.03	-0.10	-0.02	0.00	0.05	0.02	-0.02
13	6	-0.02	0.01	-0.01	0.00	-0.01	0.00	0.01	0.00	0.01
14	1	-0.13	0.01	-0.05	0.05	-0.02	0.01	-0.03	0.00	-0.02
15	6	0.01	0.01	0.01	-0.06	-0.01	-0.01	0.03	0.00	0.01
16	1	-0.01	0.02	-0.01	-0.10	-0.01	-0.02	-0.02	0.01	-0.02
17	1	-0.03	0.01	-0.01	0.00	0.00	0.00	0.01	0.00	0.00
18	1	0.02	0.01	0.01	-0.12	0.00	-0.03	0.04	-0.01	0.01

	19	20	21
	A	A	A
Frequencies --	347.3238	372.6699	382.3646
Red. masses --	8.9258	10.0305	11.6357
Frc consts --	0.6344	0.8208	1.0023
IR Inten --	50.1595	55.1238	8.1776

Atom	AN	X	Y	Z	X	Y	Z	X	Y	Z
1	13	-0.09	-0.04	-0.03	-0.13	-0.21	0.01	0.27	-0.04	0.08
2	13	0.04	0.04	0.02	0.08	-0.05	0.05	-0.14	-0.18	-0.13
3	13	0.21	0.01	-0.22	0.02	0.05	0.04	0.08	-0.02	-0.05
4	13	0.02	0.04	-0.02	-0.17	0.19	0.00	-0.03	-0.01	0.00
5	3	0.15	-0.03	0.79	-0.01	0.00	-0.01	-0.03	-0.05	0.15
6	3	-0.01	0.04	-0.02	0.81	-0.20	-0.24	-0.18	-0.09	0.10
7	3	-0.27	-0.06	0.13	-0.01	0.02	0.09	-0.13	0.00	0.01
8	4	0.05	-0.09	0.17	-0.06	0.25	-0.16	-0.25	0.83	0.06
9	6	-0.14	0.00	-0.04	0.00	0.00	0.00	-0.02	0.00	0.00
10	6	-0.06	-0.01	-0.02	0.01	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
11	6	-0.09	0.01	-0.03	0.01	0.00	0.00	0.01	0.01	0.01
12	1	-0.09	0.01	-0.04	0.05	-0.01	0.00	0.00	0.00	0.00
13	6	-0.02	-0.01	0.01	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.01
14	1	-0.12	-0.01	-0.04	0.02	0.00	0.00	-0.01	0.00	0.00
15	6	-0.04	0.00	0.01	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.01
16	1	-0.17	0.02	-0.05	0.02	0.00	0.00	0.00	0.01	0.00
17	1	-0.08	0.01	-0.02	0.01	0.00	0.00	-0.01	0.00	0.00
18	1	-0.11	-0.01	-0.03	-0.01	0.00	0.00	-0.01	0.00	0.00

	22	23	24

		A			A			A		
Frequencies --		408.4897			463.6992			581.2209		
Red. masses --		9.9743			6.1257			9.7151		
Frc consts --		0.9806			0.7760			1.9337		
IR Inten --		23.1011			22.2255			3.4164		
Atom	AN	X	Y	Z	X	Y	Z	X	Y	Z
1	13	0.06	0.06	-0.01	0.00	0.00	0.00	-0.02	0.02	-0.01
2	13	-0.06	0.07	-0.02	-0.01	-0.01	0.00	0.02	-0.03	0.01
3	13	0.19	-0.01	0.14	-0.01	-0.01	0.02	-0.12	0.00	-0.08
4	13	-0.13	-0.09	0.00	-0.03	-0.01	0.00	-0.16	-0.07	0.00
5	3	0.10	-0.03	-0.05	0.82	0.04	-0.20	-0.17	-0.01	0.00
6	3	-0.09	-0.02	0.04	0.02	-0.01	-0.01	0.00	-0.02	-0.01
7	3	-0.28	-0.04	0.44	0.02	0.00	-0.04	0.04	0.00	0.01
8	4	0.29	-0.01	-0.69	0.06	0.07	0.15	0.86	0.26	0.27
9	6	-0.06	0.00	-0.01	0.04	0.00	0.02	-0.04	0.00	-0.01
10	6	-0.06	0.00	-0.02	-0.11	0.00	0.01	0.04	0.00	0.00
11	6	-0.05	0.00	-0.01	-0.12	0.00	0.00	0.05	-0.01	0.01
12	1	0.07	-0.01	-0.02	-0.17	0.00	0.03	-0.06	-0.01	-0.01
13	6	-0.01	0.00	0.01	-0.09	0.00	-0.02	0.01	0.00	0.00
14	1	-0.11	0.00	-0.04	-0.19	0.01	-0.01	0.07	0.00	0.01
15	6	-0.01	0.00	0.01	-0.09	0.00	-0.01	-0.01	0.00	-0.01
16	1	-0.09	0.00	-0.02	-0.22	-0.01	-0.02	0.12	-0.01	0.03
17	1	-0.01	0.00	0.01	-0.20	0.00	-0.05	0.06	-0.01	0.02
18	1	-0.01	0.00	0.01	-0.20	0.02	-0.05	0.03	0.00	0.01

		25			26			27		
		A			A			A		
Frequencies --		621.0435			626.9329			740.1549		
Red. masses --		3.5217			4.7782			1.2591		
Frc consts --		0.8003			1.1065			0.4064		
IR Inten --		1.0063			94.6343			297.2527		
Atom	AN	X	Y	Z	X	Y	Z	X	Y	Z
1	13	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
2	13	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
3	13	0.00	0.01	0.00	-0.01	0.00	-0.01	-0.03	0.00	-0.01
4	13	0.00	0.00	0.00	-0.01	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
5	3	0.00	-0.02	0.00	-0.13	-0.01	0.05	0.03	0.00	0.01
6	3	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
7	3	0.00	0.00	0.00	0.01	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
8	4	0.01	0.00	0.00	0.03	0.01	0.01	0.00	0.00	0.00
9	6	-0.03	-0.02	-0.01	0.39	-0.02	0.08	-0.08	-0.01	0.10
10	6	0.19	-0.01	0.06	-0.23	0.00	-0.07	-0.01	0.02	-0.04
11	6	-0.15	0.01	-0.05	-0.27	0.03	-0.08	0.00	-0.01	-0.03
12	1	0.00	0.16	0.01	0.13	0.00	0.10	0.95	-0.03	-0.01
13	6	-0.27	0.02	-0.11	0.10	0.02	0.03	0.02	-0.02	0.00

14	1	0.32	-0.02	0.09	-0.51	0.01	-0.15	0.06	0.01	-0.08
15	6	0.25	-0.01	0.11	0.15	-0.03	0.05	0.03	0.01	0.01
16	1	-0.24	0.01	-0.07	-0.54	0.04	-0.16	-0.04	0.03	-0.12
17	1	-0.49	0.03	-0.20	0.03	0.03	0.00	-0.10	-0.03	-0.04
18	1	0.49	-0.02	0.20	0.13	-0.03	0.03	-0.17	0.04	-0.05

	28	29	30
	A	A	A
Frequencies --	750.9466	781.5753	856.7701
Red. masses --	1.2815	1.1798	4.5903
Frc consts --	0.4258	0.4246	1.9853
IR Inten --	9.9967	234.2694	0.3357

Atom	AN	X	Y	Z	X	Y	Z	X	Y	Z
1	13	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
2	13	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
3	13	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
4	13	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
5	3	0.01	-0.01	0.00	-0.03	0.00	-0.02	0.00	0.00	0.00
6	3	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
7	3	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
8	4	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
9	6	-0.01	0.00	0.01	-0.03	0.00	-0.02	0.00	0.13	0.03
10	6	0.08	-0.02	0.03	0.05	-0.02	0.01	0.09	0.18	-0.10
11	6	-0.07	-0.02	-0.04	0.05	0.02	0.02	-0.08	0.11	0.15
12	1	0.10	0.20	0.03	-0.20	0.00	0.00	-0.03	-0.29	-0.02
13	6	0.06	0.01	0.04	0.05	-0.01	0.02	0.11	-0.18	-0.26
14	1	-0.52	-0.02	-0.26	-0.35	-0.01	-0.15	-0.29	0.25	0.14
15	6	-0.05	0.03	-0.04	0.05	0.00	0.03	-0.11	-0.24	0.18
16	1	0.51	-0.09	0.21	-0.35	0.05	-0.14	0.24	0.27	-0.12
17	1	-0.36	0.04	-0.12	-0.52	0.04	-0.21	0.04	-0.06	-0.35
18	1	0.33	0.01	0.12	-0.54	0.02	-0.22	-0.02	-0.12	0.35

	31	32	33
	A	A	A
Frequencies --	858.2101	890.6748	904.4629
Red. masses --	2.9645	1.3806	1.2493
Frc consts --	1.2864	0.6453	0.6021
IR Inten --	31.3535	8.7869	0.4877

Atom	AN	X	Y	Z	X	Y	Z	X	Y	Z
1	13	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
2	13	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
3	13	0.01	0.00	0.00	-0.01	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
4	13	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
5	3	-0.01	0.00	0.01	0.01	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
6	3	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
7	3	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00

8	4	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
9	6	-0.06	-0.04	0.22	0.00	0.00	-0.02	0.00	0.00	0.00
10	6	0.03	0.20	0.04	0.08	-0.07	0.00	-0.05	0.00	-0.02
11	6	0.04	-0.22	-0.03	0.08	0.07	0.02	0.05	0.00	0.02
12	1	-0.41	-0.02	0.26	0.19	0.00	-0.03	0.00	-0.04	-0.01
13	6	0.01	0.05	-0.10	-0.07	-0.01	0.01	0.08	-0.01	0.03
14	1	-0.24	0.18	-0.29	-0.48	-0.06	-0.25	0.36	-0.01	0.16
15	6	0.02	0.00	-0.12	-0.07	0.01	0.01	-0.08	0.00	-0.03
16	1	-0.29	-0.11	-0.33	-0.50	0.14	-0.23	-0.36	0.04	-0.15
17	1	0.13	-0.27	0.13	0.37	0.04	0.13	-0.55	0.03	-0.21
18	1	0.13	0.24	0.17	0.37	-0.08	0.11	0.53	-0.03	0.21

	34	35	36
	A	A	A
Frequencies --	1003.4388	1015.4915	1067.5113
Red. masses --	1.5653	1.4301	1.6134
Frc consts --	0.9286	0.8689	1.0833
IR Inten --	40.8341	3.9995	20.4292

Atom	AN	X	Y	Z	X	Y	Z	X	Y	Z
1	13	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
2	13	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
3	13	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
4	13	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
5	3	0.01	0.00	-0.01	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
6	3	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
7	3	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
8	4	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
9	6	-0.03	-0.02	0.13	0.00	0.11	0.02	0.00	0.01	-0.07
10	6	0.00	-0.05	-0.05	-0.03	-0.09	-0.03	0.01	0.10	0.05
11	6	0.00	0.07	-0.04	0.02	-0.09	0.01	0.01	-0.11	0.02
12	1	-0.23	-0.04	0.15	0.01	0.85	0.12	0.22	0.02	-0.10
13	6	-0.01	0.10	0.04	0.02	0.00	-0.05	-0.01	0.11	0.02
14	1	0.27	-0.14	-0.41	0.11	-0.11	-0.03	-0.20	0.16	0.27
15	6	-0.01	-0.10	0.01	-0.02	-0.02	0.05	-0.01	-0.11	-0.01
16	1	0.27	0.25	-0.36	-0.09	-0.10	-0.01	-0.21	-0.23	0.22
17	1	0.05	0.40	-0.11	0.14	0.23	-0.15	0.10	0.51	-0.16
18	1	0.05	-0.36	-0.22	-0.14	0.17	0.20	0.10	-0.46	-0.30

	37	38	39
	A	A	A
Frequencies --	1089.2286	1131.4529	1276.6339
Red. masses --	1.2062	2.3135	1.3699
Frc consts --	0.8432	1.7450	1.3154
IR Inten --	6.5596	3.6581	0.3667

Atom	AN	X	Y	Z	X	Y	Z	X	Y	Z
1	13	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00

2	13	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
3	13	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
4	13	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
5	3	0.00	0.00	0.00	-0.01	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
6	3	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
7	3	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
8	4	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
9	6	0.00	-0.03	-0.01	-0.06	-0.02	0.17	0.00	0.14	0.02
10	6	-0.02	-0.05	0.07	-0.02	-0.11	0.03	0.00	-0.02	0.04
11	6	0.02	-0.03	-0.08	-0.02	0.10	0.05	0.00	-0.01	-0.05
12	1	0.00	-0.26	-0.04	-0.10	-0.03	0.19	0.00	-0.51	-0.07
13	6	0.01	0.03	-0.02	0.05	-0.07	-0.15	-0.02	-0.05	0.03
14	1	-0.21	0.03	0.48	-0.15	-0.04	0.45	0.15	-0.11	-0.41
15	6	-0.01	0.02	0.03	0.05	0.11	-0.13	0.02	-0.04	-0.04
16	1	0.21	0.16	-0.45	-0.14	-0.07	0.43	-0.15	-0.22	0.36
17	1	0.08	0.38	-0.19	0.16	0.26	-0.33	0.06	0.34	-0.17
18	1	-0.08	0.31	0.28	0.16	-0.16	-0.38	-0.06	0.29	0.25

	40	41	42
	A	A	A
Frequencies --	1348.0058	1398.0336	1446.2770
Red. masses --	3.0860	4.1343	2.3057
Frc consts --	3.3039	4.7609	2.8415
IR Inten --	1.1162	12.3385	36.3794

Atom	AN	X	Y	Z	X	Y	Z	X	Y	Z
1	13	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
2	13	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
3	13	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
4	13	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
5	3	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	-0.01	0.00	0.00
6	3	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
7	3	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
8	4	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
9	6	0.00	0.28	0.04	-0.03	0.01	-0.04	0.02	0.01	-0.11
10	6	0.07	-0.14	-0.15	-0.04	-0.14	0.14	-0.06	0.03	0.19
11	6	-0.07	-0.18	0.11	-0.04	0.10	0.18	-0.06	-0.08	0.17
12	1	0.00	-0.48	-0.06	0.25	0.01	-0.06	0.13	0.02	-0.13
13	6	-0.02	0.06	0.04	0.06	0.28	-0.12	0.02	-0.09	-0.07
14	1	-0.13	-0.06	0.34	-0.03	-0.18	0.02	0.19	-0.11	-0.53
15	6	0.03	0.07	-0.03	0.06	-0.24	-0.20	0.02	0.11	-0.04
16	1	0.13	0.04	-0.35	-0.03	0.18	0.06	0.18	0.25	-0.48
17	1	-0.11	-0.29	0.21	-0.12	-0.46	0.24	0.09	0.19	-0.23
18	1	0.11	-0.23	-0.29	-0.11	0.39	0.36	0.09	-0.11	-0.27

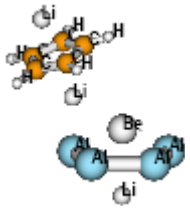
	43	44	45
	A	A	A

Frequencies --		1500.5914			3143.2654			3193.6158		
Red. masses --		3.4495			1.0885			1.0882		
Frc consts --		4.5765			6.3362			6.5390		
IR Inten --		0.4806			29.9732			2.8836		
Atom	AN	X	Y	Z	X	Y	Z	X	Y	Z
1	13	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
2	13	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
3	13	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
4	13	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
5	3	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
6	3	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
7	3	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
8	4	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
9	6	0.00	0.06	0.01	-0.01	0.01	-0.08	0.00	0.00	0.00
10	6	-0.06	-0.08	0.18	0.00	-0.01	0.00	0.00	-0.02	0.00
11	6	0.06	-0.03	-0.19	0.00	0.00	0.00	0.00	-0.02	-0.01
12	1	0.00	-0.30	-0.04	0.10	-0.13	0.98	0.00	0.00	0.00
13	6	0.09	0.13	-0.21	0.00	0.00	0.00	-0.02	0.03	0.05
14	1	0.06	-0.19	-0.20	0.01	0.08	-0.02	0.02	0.23	-0.04
15	6	-0.09	0.06	0.23	0.00	0.00	0.00	0.02	0.04	-0.04
16	1	-0.06	-0.23	0.14	0.01	-0.07	-0.04	-0.02	0.19	0.09
17	1	-0.07	-0.51	0.07	0.00	0.00	0.00	0.20	-0.32	-0.56
18	1	0.06	-0.46	-0.20	0.00	0.00	0.00	-0.20	-0.45	0.44

			46			47			48	
			A			A			A	
Frequencies --		3205.5678			3220.8396			3226.5282		
Red. masses --		1.0918			1.0963			1.1026		
Frc consts --		6.6102			6.7008			6.7631		
IR Inten --		8.2423			4.2627			3.1107		
Atom	AN	X	Y	Z	X	Y	Z	X	Y	Z
1	13	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
2	13	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
3	13	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
4	13	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
5	3	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
6	3	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
7	3	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
8	4	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
9	6	0.00	0.00	0.01	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.01
10	6	0.00	-0.03	0.00	-0.01	-0.06	0.01	0.00	-0.04	0.01
11	6	0.00	0.03	0.01	0.00	-0.05	-0.02	-0.01	0.06	0.03
12	1	-0.01	0.01	-0.06	0.00	0.00	-0.01	-0.01	0.01	-0.09
13	6	-0.01	0.03	0.04	0.01	-0.01	-0.03	0.01	-0.02	-0.03
14	1	0.04	0.39	-0.06	0.07	0.72	-0.12	0.05	0.48	-0.08

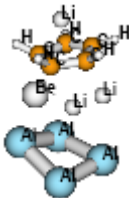
15	6	-0.02	-0.04	0.04	0.00	-0.01	0.01	0.01	0.02	-0.03
16	1	0.03	-0.32	-0.15	-0.05	0.53	0.25	0.06	-0.62	-0.29
17	1	0.17	-0.28	-0.47	-0.09	0.14	0.25	-0.10	0.16	0.28
18	1	0.18	0.42	-0.41	0.04	0.09	-0.10	-0.12	-0.27	0.26

CpBeAl4Li3-fusion1358-b36311+gx.frq 5.005835523



State=1-A\HF=-1200.7431858

CpBeAl4Li3-fusion1357-b36311+gx.frq 19.12186123

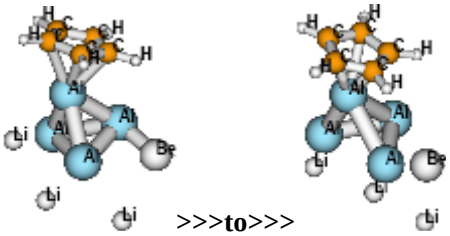


State=1-A\HF=-1200.7206905

CpBeAl4Li3-fusion60000-b36311+gx.frq 26.53080904

State=1-A\HF=-1200.7088836

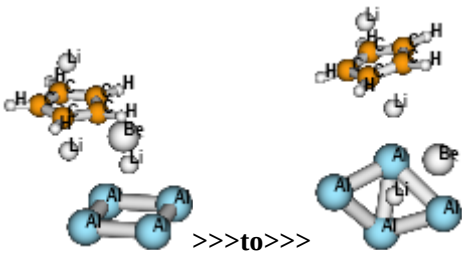
CpBeAl4Li3-fusion40000-b36311+gx.frq 31.61633834



>>>to>>>

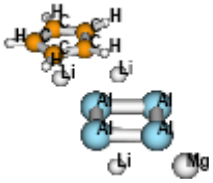
State=1-A\HF=-1200.7007793

CpBeAl4Li3-fusion10002-b36311+gx.frq 10.36615144



>>>to>>>

State=1-A\HF=-1200.7346436



Charge = 0 Multiplicity = 1

Al,0,-0.480458483,1.2961312246,1.1179411722
Al,0,-2.2011810747,1.2292696405,-0.8463606056
Al,0,-2.1344863382,-1.3894205105,-0.7307150198
Al,0,-0.4374175233,-1.2371277398,1.2453970668
Li,0,2.2163420982,0.0829762207,0.9441021378
Li,0,0.7724971304,-0.1325009385,-1.1115933405
Li,0,-2.8152098508,0.0204663209,2.0353138085
Mg,0,-4.7523709906,-0.1127728069,-0.2513184244
C,0,3.7850834514,1.2054040433,-0.1196665522
C,0,4.3300242143,0.1131350984,0.5969338981
C,0,2.9789817041,0.6864419167,-1.1643241718
H,0,3.9732220479,2.2539315379,0.0696949111
C,0,3.8455160641,-1.0832098628,0.0174799929
H,0,5.007725519,0.1812032207,1.4386048922
C,0,3.0162547443,-0.7343744553,-1.0792777976
H,0,2.5261781319,1.2834353901,-1.9517923669
H,0,4.0884233491,-2.090592532,0.3286343454
H,0,2.605478745,-1.4440299986,-1.7936545435

State=1-A\HF=-1386.1132981

		1			2			3		
		A			A			A		
Frequencies --		13.2119			20.1543			38.8742		
Red. masses --		4.9845			13.7669			7.4018		
Frc consts --		0.0005			0.0033			0.0066		
IR Inten --		1.1442			1.3642			1.1339		
Atom	AN	X	Y	Z	X	Y	Z	X	Y	Z
1	13	-0.01	0.06	-0.02	-0.04	-0.02	0.28	-0.06	0.08	0.09
2	13	0.05	-0.10	-0.07	0.20	0.01	0.06	-0.05	0.05	0.09
3	13	-0.04	-0.10	0.07	0.17	-0.01	0.06	0.05	0.06	-0.08
4	13	0.01	0.06	0.04	-0.04	-0.01	0.26	0.07	0.08	-0.09
5	3	0.00	-0.03	0.00	-0.04	0.00	-0.04	0.00	0.01	0.00
6	3	-0.02	0.37	0.00	-0.19	-0.02	0.09	-0.01	0.63	-0.01
7	3	0.00	0.12	0.00	-0.13	-0.01	-0.04	0.00	0.03	0.00
8	12	0.01	-0.04	-0.01	0.17	0.02	-0.37	0.00	-0.20	-0.01
9	6	0.11	-0.06	0.13	-0.14	0.01	-0.17	0.03	-0.08	-0.13
10	6	0.00	-0.19	-0.01	-0.07	0.03	-0.20	0.00	-0.02	0.00

11	6	0.06	0.15	0.08	-0.22	-0.01	-0.10	0.01	-0.19	-0.08
12	1	0.21	-0.11	0.26	-0.14	0.02	-0.20	0.06	-0.06	-0.25
13	6	-0.12	-0.06	-0.14	-0.10	0.01	-0.15	-0.03	-0.08	0.12
14	1	0.00	-0.36	-0.01	-0.01	0.05	-0.25	0.00	0.06	-0.01
15	6	-0.08	0.15	-0.09	-0.19	-0.01	-0.09	-0.02	-0.19	0.08
16	1	0.12	0.28	0.16	-0.28	-0.03	-0.08	0.08	-0.26	-0.19
17	1	-0.22	-0.12	-0.27	-0.07	0.02	-0.15	-0.06	-0.06	0.25
18	1	-0.15	0.28	-0.17	-0.24	-0.03	-0.04	-0.10	-0.26	0.20

	4	5	6
	A	A	A
Frequencies --	41.3200	76.5127	82.6220
Red. masses --	9.7007	7.8002	5.4665
Frc consts --	0.0098	0.0269	0.0220
IR Inten --	1.2004	1.2707	0.4687

Atom	AN	X	Y	Z	X	Y	Z	X	Y	Z
1	13	-0.03	0.11	-0.05	0.10	-0.08	0.00	0.05	0.08	-0.04
2	13	-0.17	0.15	0.05	-0.01	-0.01	0.08	0.06	0.06	-0.06
3	13	0.18	0.16	-0.04	0.01	-0.01	-0.08	-0.04	0.06	0.05
4	13	0.02	0.11	0.08	-0.11	-0.08	0.00	-0.02	0.08	0.02
5	3	-0.01	0.05	-0.02	0.01	-0.13	0.01	-0.02	-0.41	0.01
6	3	0.00	-0.53	0.00	0.00	0.02	0.01	0.00	0.08	-0.01
7	3	-0.01	0.02	0.00	0.01	0.90	0.01	0.02	-0.18	0.00
8	12	0.01	-0.28	-0.02	0.00	-0.11	0.00	0.01	-0.10	0.01
9	6	0.11	-0.10	0.07	-0.08	0.03	0.04	-0.24	-0.02	0.13
10	6	0.00	-0.20	0.00	0.00	0.05	0.00	-0.02	0.02	0.01
11	6	0.07	0.06	0.04	-0.05	0.01	0.03	-0.15	-0.06	0.08
12	1	0.20	-0.14	0.15	-0.15	0.04	0.08	-0.43	0.00	0.24
13	6	-0.11	-0.11	-0.09	0.08	0.03	-0.04	0.19	-0.01	-0.12
14	1	-0.01	-0.33	0.00	0.01	0.06	-0.01	-0.03	0.05	0.01
15	6	-0.06	0.05	-0.06	0.04	0.01	-0.02	0.11	-0.06	-0.07
16	1	0.08	0.15	0.12	-0.10	0.01	0.05	-0.24	-0.06	0.13
17	1	-0.20	-0.15	-0.16	0.15	0.04	-0.08	0.38	0.00	-0.22
18	1	-0.06	0.15	-0.15	0.08	0.01	-0.04	0.19	-0.06	-0.11

	7	8	9
	A	A	A
Frequencies --	92.9601	105.4865	120.2849
Red. masses --	8.4833	17.0433	13.8617
Frc consts --	0.0432	0.1117	0.1182
IR Inten --	1.1975	0.4569	5.9543

Atom	AN	X	Y	Z	X	Y	Z	X	Y	Z
1	13	0.06	0.00	-0.05	0.07	-0.23	-0.13	0.27	0.01	-0.08
2	13	0.10	-0.01	-0.07	0.24	0.27	-0.19	-0.02	-0.03	0.23
3	13	0.13	-0.01	-0.09	-0.25	0.25	0.17	-0.02	0.04	0.25
4	13	0.08	-0.01	-0.07	-0.09	-0.23	0.12	0.26	-0.04	-0.06

5	3	-0.28	0.05	-0.03	0.00	0.24	0.00	-0.17	0.01	-0.11
6	3	-0.08	-0.03	-0.14	-0.01	0.18	0.02	-0.01	0.01	-0.28
7	3	0.21	0.03	0.09	0.02	-0.08	0.03	0.00	0.03	-0.25
8	12	0.21	0.02	0.18	0.05	-0.31	0.01	-0.30	0.00	-0.26
9	6	-0.22	0.00	0.07	0.12	0.05	-0.09	-0.11	0.00	0.05
10	6	-0.32	-0.01	0.13	-0.01	0.05	0.00	-0.20	0.00	0.13
11	6	-0.12	0.01	-0.02	0.07	0.05	-0.06	0.03	0.00	-0.06
12	1	-0.23	0.00	0.08	0.23	0.05	-0.18	-0.15	0.00	0.08
13	6	-0.28	0.00	0.09	-0.13	0.05	0.10	-0.12	0.00	0.07
14	1	-0.41	-0.01	0.21	-0.01	0.04	0.00	-0.33	0.00	0.23
15	6	-0.15	0.01	0.00	-0.09	0.05	0.06	0.02	0.00	-0.05
16	1	-0.04	0.01	-0.06	0.13	0.04	-0.10	0.14	0.00	-0.12
17	1	-0.33	0.00	0.13	-0.24	0.05	0.18	-0.17	0.00	0.11
18	1	-0.09	0.01	-0.04	-0.15	0.04	0.11	0.13	0.00	-0.11

	10	11	12
	A	A	A
Frequencies --	136.5019	141.8349	156.9841
Red. masses --	6.0590	18.6628	9.6240
Frc consts --	0.0665	0.2212	0.1397
IR Inten --	4.0071	0.1367	6.3173

Atom	AN	X	Y	Z	X	Y	Z	X	Y	Z
1	13	-0.06	0.00	0.06	0.23	0.23	0.19	-0.11	0.00	0.15
2	13	-0.07	0.01	0.07	0.38	-0.12	0.15	0.16	0.00	-0.13
3	13	-0.13	-0.04	0.05	-0.28	-0.10	-0.20	0.18	0.04	-0.06
4	13	-0.09	0.05	0.02	-0.19	0.21	-0.17	-0.03	-0.04	0.13
5	3	-0.11	-0.01	-0.22	0.01	0.14	0.03	-0.09	-0.02	-0.12
6	3	0.03	-0.02	-0.15	0.00	-0.45	0.01	0.08	0.03	-0.11
7	3	0.03	0.00	0.16	-0.04	-0.13	-0.07	-0.20	0.05	-0.17
8	12	0.21	-0.01	-0.07	-0.11	-0.21	0.04	-0.31	0.00	0.18
9	6	0.01	0.00	0.01	0.08	0.03	-0.06	-0.01	0.00	-0.01
10	6	-0.12	0.00	0.12	0.01	0.02	-0.01	-0.12	0.00	0.08
11	6	0.23	0.00	-0.16	0.03	0.04	-0.02	0.18	-0.01	-0.16
12	1	-0.04	0.00	0.06	0.16	0.03	-0.12	-0.07	0.00	0.03
13	6	0.02	0.00	0.01	-0.09	0.03	0.06	0.01	0.00	-0.03
14	1	-0.29	0.01	0.26	0.03	0.01	-0.03	-0.27	0.00	0.20
15	6	0.23	0.00	-0.16	-0.09	0.04	0.06	0.20	-0.01	-0.17
16	1	0.39	-0.01	-0.26	0.00	0.04	-0.01	0.33	-0.02	-0.25
17	1	-0.02	0.00	0.06	-0.16	0.02	0.11	-0.02	0.00	0.01
18	1	0.40	0.01	-0.26	-0.10	0.04	0.06	0.35	0.00	-0.27

	13	14	15
	A	A	A
Frequencies --	184.9539	205.4511	235.9118
Red. masses --	17.6778	8.3188	6.5593
Frc consts --	0.3563	0.2069	0.2151

IR Inten	--	0.1323			14.4070			9.9175		
Atom	AN	X	Y	Z	X	Y	Z	X	Y	Z
1	13	-0.30	0.00	0.31	0.00	0.02	0.02	0.01	0.00	-0.02
2	13	0.09	0.05	-0.22	0.01	-0.01	-0.06	-0.02	0.00	0.01
3	13	-0.14	0.04	0.23	0.02	0.01	-0.08	-0.02	0.00	0.01
4	13	0.33	0.01	-0.34	-0.01	-0.02	0.04	0.02	0.00	-0.04
5	3	0.01	0.03	0.00	0.00	0.00	0.01	0.07	0.03	0.54
6	3	-0.02	-0.40	-0.02	0.00	0.01	0.06	0.44	0.00	0.49
7	3	0.09	0.41	0.06	0.61	-0.03	0.74	-0.04	0.01	-0.02
8	12	0.01	-0.05	-0.03	-0.21	0.00	-0.14	0.02	0.00	-0.02
9	6	-0.04	-0.03	0.04	0.00	0.00	0.00	-0.10	-0.01	-0.05
10	6	0.04	-0.03	-0.02	-0.01	0.00	0.01	-0.15	-0.01	-0.01
11	6	-0.07	-0.02	0.07	0.01	0.00	-0.01	0.03	-0.01	-0.15
12	1	-0.07	-0.03	0.07	-0.01	0.00	0.00	-0.11	0.00	-0.05
13	6	0.06	-0.03	-0.03	-0.01	0.00	0.00	-0.09	-0.01	-0.06
14	1	0.07	-0.03	-0.04	-0.02	0.00	0.02	-0.20	-0.01	0.03
15	6	-0.01	-0.02	0.02	0.01	0.00	-0.01	0.04	0.00	-0.16
16	1	-0.16	-0.01	0.13	0.02	0.00	-0.02	0.10	-0.02	-0.20
17	1	0.11	-0.03	-0.08	-0.01	0.00	0.00	-0.10	-0.01	-0.06
18	1	0.02	-0.02	0.00	0.02	0.00	-0.02	0.11	0.01	-0.21

		16			17			18		
		A			A			A		
Frequencies	--	253.7305			267.7553			270.3194		
Red. masses	--	22.3905			23.5081			13.1005		
Frc consts	--	0.8493			0.9930			0.5640		
IR Inten	--	4.8818			2.6274			9.9235		
Atom	AN	X	Y	Z	X	Y	Z	X	Y	Z
1	13	0.37	0.02	0.30	0.15	-0.19	0.13	-0.11	-0.13	-0.19
2	13	-0.26	-0.03	-0.31	-0.11	0.57	-0.11	0.19	0.15	0.15
3	13	0.26	0.02	0.31	-0.07	-0.57	-0.09	0.20	-0.15	0.15
4	13	-0.38	-0.03	-0.30	0.11	0.19	0.10	-0.12	0.13	-0.20
5	3	0.00	-0.17	0.02	0.04	-0.02	-0.03	-0.02	0.01	0.10
6	3	0.01	0.07	-0.01	-0.04	0.00	0.10	0.11	0.00	-0.22
7	3	0.01	-0.14	0.02	0.25	-0.01	-0.29	-0.53	0.00	0.57
8	12	0.01	-0.01	0.00	-0.10	0.00	0.00	-0.05	0.00	-0.02
9	6	0.08	0.04	-0.06	-0.02	0.00	0.01	0.01	0.00	-0.01
10	6	0.00	0.04	0.00	-0.03	0.00	0.02	0.03	0.00	-0.02
11	6	0.06	0.04	-0.05	0.00	0.00	0.00	-0.01	0.00	0.01
12	1	0.15	0.03	-0.12	-0.02	0.00	0.01	0.02	0.00	-0.02
13	6	-0.08	0.03	0.06	-0.03	0.00	0.02	0.01	0.00	-0.01
14	1	0.00	0.04	0.00	-0.05	0.00	0.03	0.05	0.00	-0.05
15	6	-0.06	0.04	0.04	-0.01	0.00	0.00	-0.01	0.00	0.01
16	1	0.11	0.03	-0.08	0.00	0.00	0.00	-0.02	0.01	0.02
17	1	-0.16	0.03	0.11	-0.04	0.00	0.03	0.02	0.00	-0.02

18	1	-0.10	0.03	0.07	-0.02	0.00	0.01	-0.02	-0.01	0.02

	19	20	21
	A	A	A
Frequencies --	310.4234	311.6370	320.6319
Red. masses --	9.8579	6.4030	18.6454
Frc consts --	0.5597	0.3664	1.1294
IR Inten --	28.2563	1.0646	3.4510

Atom	AN	X	Y	Z	X	Y	Z	X	Y	Z
1	13	-0.18	0.06	-0.06	0.10	-0.01	0.03	-0.01	0.50	-0.07
2	13	0.09	0.05	0.13	-0.03	-0.01	-0.04	0.03	0.20	0.03
3	13	0.09	-0.06	0.14	-0.01	0.00	-0.01	0.02	-0.20	0.02
4	13	-0.21	-0.06	-0.07	-0.01	0.01	0.00	0.01	-0.50	-0.07
5	3	-0.04	0.23	0.11	-0.01	0.75	-0.06	0.01	0.01	-0.11
6	3	0.13	0.02	-0.17	-0.02	0.07	0.01	-0.38	-0.01	0.34
7	3	0.69	-0.01	-0.46	-0.13	-0.02	0.09	-0.25	0.01	0.18
8	12	-0.01	0.00	0.00	0.00	-0.01	0.00	0.03	0.00	-0.01
9	6	-0.03	-0.02	0.02	-0.13	-0.07	0.12	0.02	0.00	0.01
10	6	0.03	-0.02	-0.03	0.00	-0.08	0.01	-0.01	0.00	0.03
11	6	-0.05	-0.03	0.04	-0.12	-0.08	0.09	0.05	0.00	-0.03
12	1	-0.04	-0.02	0.03	-0.23	-0.07	0.19	0.01	0.00	0.02
13	6	0.05	-0.02	-0.04	0.13	-0.07	-0.11	0.03	0.00	0.00
14	1	0.07	-0.03	-0.05	-0.01	-0.09	0.01	-0.05	0.00	0.07
15	6	0.03	-0.02	-0.02	0.12	-0.08	-0.08	0.06	0.00	-0.03
16	1	-0.06	-0.01	0.05	-0.14	-0.07	0.11	0.09	-0.02	-0.06
17	1	0.10	-0.02	-0.08	0.23	-0.07	-0.18	0.03	0.00	0.01
18	1	0.02	-0.02	-0.02	0.13	-0.07	-0.10	0.09	0.01	-0.06

	22	23	24
	A	A	A
Frequencies --	330.3661	363.8463	502.4801
Red. masses --	7.8852	6.5722	5.6720
Frc consts --	0.5071	0.5126	0.8438
IR Inten --	40.6436	69.4669	127.4008

Atom	AN	X	Y	Z	X	Y	Z	X	Y	Z
1	13	-0.03	-0.11	-0.08	-0.01	0.03	0.00	-0.02	0.01	0.00
2	13	0.06	-0.04	0.04	0.00	0.01	0.01	0.00	0.00	0.00
3	13	0.06	0.04	0.05	0.00	-0.01	0.01	0.00	0.00	0.00
4	13	-0.03	0.12	-0.09	-0.01	-0.03	0.00	-0.02	-0.01	0.00
5	3	0.05	0.01	-0.36	-0.13	-0.03	-0.60	0.81	0.01	-0.14
6	3	-0.46	0.00	0.71	0.66	0.01	0.22	0.04	0.00	-0.12
7	3	0.11	0.00	-0.11	-0.03	0.00	0.02	0.00	0.00	0.00
8	12	-0.03	0.00	0.01	-0.01	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
9	6	0.00	0.00	0.02	-0.01	0.00	0.00	-0.11	0.01	0.05
10	6	-0.04	0.00	0.06	0.01	0.00	-0.02	-0.09	0.00	0.05
11	6	0.05	0.00	-0.03	-0.09	0.01	0.07	-0.02	0.00	-0.02

12	1	-0.03	0.00	0.05	-0.05	0.00	0.04	-0.24	0.01	0.13
13	6	0.01	0.00	0.01	-0.02	0.00	0.01	-0.11	-0.01	0.05
14	1	-0.13	0.00	0.13	-0.02	0.00	0.00	-0.24	0.00	0.16
15	6	0.06	0.00	-0.03	-0.09	0.00	0.07	-0.01	0.00	-0.02
16	1	0.08	-0.03	-0.06	-0.17	0.02	0.12	-0.11	0.01	0.04
17	1	-0.01	0.00	0.04	-0.07	0.00	0.05	-0.24	-0.01	0.13
18	1	0.08	0.02	-0.06	-0.18	-0.01	0.13	-0.11	-0.01	0.04

	25	26	27
	A	A	A
Frequencies --	620.4177	634.9831	731.2340
Red. masses --	5.3669	3.9876	1.2289
Frc consts --	1.2171	0.9473	0.3873
IR Inten --	0.1036	1.6956	1.3513

Atom	AN	X	Y	Z	X	Y	Z	X	Y	Z
1	13	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
2	13	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
3	13	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
4	13	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
5	3	0.00	0.05	0.00	0.06	0.00	0.02	0.00	0.01	0.00
6	3	0.01	0.00	0.00	0.01	0.00	-0.02	0.00	0.02	0.00
7	3	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
8	12	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
9	6	-0.18	0.01	0.12	0.19	-0.01	-0.17	0.07	0.00	-0.06
10	6	0.00	-0.02	0.00	-0.26	0.00	0.22	0.00	0.00	0.00
11	6	0.32	-0.01	-0.22	-0.08	0.01	0.06	0.04	-0.01	-0.01
12	1	-0.39	0.01	0.29	0.32	-0.01	-0.27	-0.33	0.01	0.23
13	6	0.17	0.01	-0.12	0.19	0.01	-0.17	-0.06	0.00	0.06
14	1	0.00	-0.03	0.00	-0.42	0.00	0.35	-0.01	-0.01	0.01
15	6	-0.33	-0.01	0.22	-0.08	-0.01	0.06	-0.04	-0.01	0.01
16	1	0.21	-0.02	-0.16	-0.17	0.00	0.10	-0.44	0.03	0.31
17	1	0.38	0.01	-0.29	0.32	0.01	-0.27	0.33	0.02	-0.23
18	1	-0.20	-0.02	0.16	-0.17	0.00	0.10	0.49	0.05	-0.34

	28	29	30
	A	A	A
Frequencies --	749.6991	773.7686	841.0374
Red. masses --	1.2477	1.1603	1.3403
Frc consts --	0.4132	0.4093	0.5586
IR Inten --	154.8574	283.7802	0.5427

Atom	AN	X	Y	Z	X	Y	Z	X	Y	Z
1	13	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
2	13	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
3	13	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
4	13	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
5	3	-0.03	0.00	0.00	-0.04	0.00	0.03	0.00	0.00	0.00

6	3	-0.01	0.00	0.00	-0.01	0.00	0.00	0.00	-0.01	0.00
7	3	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
8	12	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
9	6	-0.01	0.00	0.01	0.05	0.00	-0.03	0.04	-0.04	-0.05
10	6	-0.03	0.00	0.04	0.06	0.00	-0.05	0.00	-0.01	0.00
11	6	0.08	0.00	-0.06	0.01	0.00	-0.01	-0.07	0.05	-0.03
12	1	0.00	0.00	-0.01	-0.39	0.01	0.32	-0.35	-0.06	0.40
13	6	-0.02	0.00	0.02	0.05	0.00	-0.03	-0.04	-0.04	0.05
14	1	0.24	0.00	-0.18	-0.49	0.00	0.40	-0.01	0.08	0.01
15	6	0.07	0.00	-0.06	0.01	0.00	-0.01	0.07	0.05	0.03
16	1	-0.55	0.10	0.39	-0.17	0.02	0.11	0.30	-0.05	-0.33
17	1	0.04	0.00	-0.04	-0.39	-0.01	0.32	0.35	-0.06	-0.40
18	1	-0.52	-0.11	0.37	-0.17	-0.02	0.11	-0.28	-0.05	0.32

	31	32	33
	A	A	A
Frequencies --	861.0899	866.7527	884.8458
Red. masses --	4.2090	3.0959	1.2346
Frc consts --	1.8388	1.3703	0.5695
IR Inten --	3.0184	0.0072	0.2438

Atom	AN	X	Y	Z	X	Y	Z	X	Y	Z
1	13	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
2	13	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
3	13	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
4	13	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
5	3	0.00	0.00	0.00	0.00	-0.01	0.00	0.00	0.00	0.00
6	3	-0.01	0.00	0.00	0.00	-0.02	0.00	0.00	0.00	0.00
7	3	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
8	12	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
9	6	0.00	0.27	0.02	0.12	0.13	0.07	0.05	0.02	-0.04
10	6	-0.19	0.00	-0.26	0.00	0.10	0.00	-0.09	0.00	0.04
11	6	0.10	0.02	0.11	0.07	-0.16	0.16	0.00	0.01	0.02
12	1	0.29	0.19	0.12	-0.33	0.21	0.11	-0.37	0.02	0.32
13	6	0.01	-0.27	0.02	-0.12	0.12	-0.08	0.05	-0.02	-0.04
14	1	-0.32	0.00	-0.15	0.00	-0.30	0.00	0.51	0.00	-0.45
15	6	0.10	-0.02	0.11	-0.07	-0.16	-0.15	0.00	-0.01	0.02
16	1	-0.18	-0.34	-0.05	0.42	-0.15	-0.04	0.10	-0.03	-0.08
17	1	0.30	-0.18	0.12	0.32	0.22	-0.11	-0.37	-0.02	0.32
18	1	-0.18	0.34	-0.05	-0.41	-0.15	0.03	0.09	0.03	-0.07

	34	35	36
	A	A	A
Frequencies --	1025.2619	1031.2488	1077.0124
Red. masses --	1.4816	1.4406	1.2365
Frc consts --	0.9176	0.9027	0.8451
IR Inten --	36.5986	13.5985	0.7037

Atom	AN	X	Y	Z	X	Y	Z	X	Y	Z
1	13	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
2	13	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
3	13	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
4	13	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
5	3	0.01	0.00	0.00	0.00	0.01	0.00	0.00	0.00	0.00
6	3	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
7	3	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
8	12	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
9	6	0.03	-0.04	0.04	-0.03	-0.09	-0.05	0.04	-0.01	0.06
10	6	-0.07	0.00	-0.09	0.00	0.06	0.00	0.00	0.09	0.00
11	6	-0.03	0.10	-0.03	0.05	0.00	0.07	0.01	-0.03	0.00
12	1	0.32	-0.18	0.39	-0.18	-0.04	-0.15	0.31	-0.14	0.35
13	6	0.03	0.04	0.03	0.03	-0.08	0.05	-0.04	-0.01	-0.06
14	1	-0.08	0.00	-0.08	0.00	0.56	0.00	-0.01	0.66	0.00
15	6	-0.03	-0.10	-0.03	-0.05	0.00	-0.07	-0.01	-0.03	0.00
16	1	0.13	0.39	0.12	0.28	0.35	0.24	-0.10	-0.14	-0.02
17	1	0.32	0.19	0.38	0.19	-0.03	0.16	-0.32	-0.15	-0.35
18	1	0.14	-0.39	0.13	-0.30	0.35	-0.25	0.11	-0.14	0.03

	37	38	39
	A	A	A
Frequencies --	1079.1303	1141.3805	1289.4246
Red. masses --	1.2487	5.7850	1.2782
Frc consts --	0.8567	4.4403	1.2521
IR Inten --	3.7695	13.4626	0.0149

Atom	AN	X	Y	Z	X	Y	Z	X	Y	Z
1	13	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
2	13	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
3	13	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
4	13	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
5	3	0.00	0.00	0.00	-0.01	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
6	3	0.01	0.00	0.00	0.01	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
7	3	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
8	12	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
9	6	0.03	-0.04	0.04	0.05	0.28	0.07	-0.04	0.02	-0.05
10	6	0.01	0.00	0.01	0.19	0.00	0.24	0.00	0.07	0.00
11	6	-0.03	-0.06	-0.05	-0.15	0.17	-0.18	-0.02	-0.06	-0.04
12	1	0.25	-0.16	0.33	0.08	0.32	0.04	0.26	-0.13	0.34
13	6	0.03	0.05	0.03	0.05	-0.28	0.08	0.04	0.02	0.05
14	1	0.03	0.00	0.00	0.23	0.01	0.25	0.00	-0.45	0.00
15	6	-0.03	0.05	-0.05	-0.15	-0.18	-0.18	0.03	-0.06	0.04
16	1	-0.24	-0.43	-0.25	-0.16	0.12	-0.27	0.17	0.35	0.20
17	1	0.23	0.17	0.32	0.07	-0.32	0.03	-0.25	-0.14	-0.34
18	1	-0.24	0.42	-0.25	-0.16	-0.14	-0.27	-0.18	0.34	-0.20

	40			41			42		
	A			A			A		
Frequencies --	1374.0522			1387.7448			1468.0625		
Red. masses --	4.4672			4.6858			2.4940		
Frc consts --	4.9693			5.3168			3.1670		
IR Inten --	0.0305			1.8688			6.6447		
Atom AN	X	Y	Z	X	Y	Z	X	Y	Z
1 13	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
2 13	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
3 13	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
4 13	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
5 3	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.01	0.00	0.00
6 3	0.00	0.00	0.00	-0.01	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
7 3	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
8 12	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
9 6	0.14	-0.15	0.19	-0.14	-0.07	-0.15	0.10	-0.11	0.13
10 6	0.00	0.31	0.00	0.10	0.00	0.09	-0.09	0.02	-0.11
11 6	-0.09	-0.01	-0.16	0.10	0.29	0.11	0.00	0.14	-0.01
12 1	-0.26	0.05	-0.35	0.10	-0.19	0.10	-0.32	0.09	-0.41
13 6	-0.13	-0.16	-0.19	-0.15	0.06	-0.16	0.11	0.08	0.14
14 1	0.00	-0.40	0.00	0.08	0.00	0.11	-0.10	-0.07	-0.14
15 6	0.08	0.00	0.16	0.11	-0.29	0.12	-0.02	-0.12	-0.03
16 1	-0.07	0.26	0.05	-0.24	-0.37	-0.26	-0.19	-0.22	-0.24
17 1	0.25	0.05	0.34	0.11	0.19	0.11	-0.34	-0.15	-0.43
18 1	0.08	0.25	-0.06	-0.25	0.37	-0.27	-0.17	0.12	-0.21

	43			44			45		
	A			A			A		
Frequencies --	1469.1133			3143.0331			3161.6687		
Red. masses --	2.5458			1.0877			1.0957		
Frc consts --	3.2374			6.3308			6.4531		
IR Inten --	0.4946			0.7182			6.3834		
Atom AN	X	Y	Z	X	Y	Z	X	Y	Z
1 13	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
2 13	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
3 13	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
4 13	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
5 3	0.00	0.01	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
6 3	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
7 3	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
8 12	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
9 6	-0.07	-0.10	-0.08	0.00	0.00	0.00	0.00	0.01	0.00
10 6	0.01	0.21	0.01	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
11 6	0.09	0.07	0.12	-0.02	0.03	-0.03	0.03	-0.04	0.05
12 1	0.11	-0.21	0.12	0.01	0.06	0.01	-0.02	-0.13	-0.03

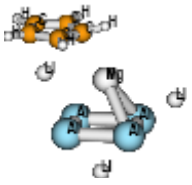
13	6	0.04	-0.12	0.05	0.00	-0.01	0.00	0.00	-0.01	0.00
14	1	0.02	-0.59	0.02	0.00	0.00	0.00	0.01	0.00	0.02
15	6	-0.08	0.09	-0.12	0.03	0.04	0.05	0.02	0.03	0.03
16	1	-0.10	-0.39	-0.13	0.23	-0.34	0.40	-0.32	0.48	-0.55
17	1	-0.03	-0.19	-0.02	-0.02	0.09	-0.02	-0.02	0.10	-0.02
18	1	0.15	-0.42	0.18	-0.31	-0.49	-0.56	-0.22	-0.35	-0.39

	46	47	48
	A	A	A
Frequencies --	3199.5478	3215.6640	3224.6866
Red. masses --	1.0895	1.0946	1.1023
Frc consts --	6.5712	6.6687	6.7532
IR Inten --	4.5332	6.5795	6.0024

Atom	AN	X	Y	Z	X	Y	Z	X	Y	Z
1	13	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
2	13	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
3	13	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
4	13	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
5	3	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
6	3	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
7	3	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
8	12	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
9	6	0.01	0.03	0.01	-0.01	-0.06	-0.01	-0.01	-0.05	-0.01
10	6	-0.05	0.00	-0.06	0.00	0.00	0.00	-0.03	0.00	-0.04
11	6	0.00	0.00	-0.01	0.00	0.00	0.01	0.00	-0.01	0.01
12	1	-0.07	-0.35	-0.09	0.14	0.67	0.16	0.11	0.56	0.13
13	6	0.01	-0.03	0.01	0.01	-0.06	0.02	-0.01	0.05	-0.01
14	1	0.53	0.01	0.65	0.00	-0.01	0.00	0.34	0.01	0.42
15	6	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	-0.01	0.00	0.00	0.01
16	1	0.03	-0.05	0.05	-0.03	0.04	-0.06	-0.04	0.05	-0.06
17	1	-0.08	0.35	-0.09	-0.15	0.66	-0.16	0.12	-0.56	0.14
18	1	0.03	0.04	0.05	0.03	0.04	0.05	-0.03	-0.05	-0.06

$CpMgAl_4Li_3 \rightarrow CpLi + Al_4Li_2Mg$ **-18.7572002**

$CpMgAl_4Li_3 \rightarrow Cp^- + Al_4Li_3Mg^+$ **-139.0785073**



Charge = 0 Multiplicity = 1

Al,0,2.5478212012,0.7096127232,-1.3122706349

Al,0,1.031973605,-1.586445356,-1.2439738311

Al,0,1.0265915585,-1.5758319387,1.2543085604

Al,0,2.5396891509,0.7206817433,1.30772256

Li,0,-1.6617817466,-1.2036455792,-0.0034677276
Li,0,2.4253736538,3.0326154438,-0.0133571271
Li,0,3.4436236327,-1.6670964842,0.0120199374
Mg,0,0.0484963653,0.9482626736,-0.0159044861
C,0,-3.6049219537,-0.4890930522,-0.6939128666
C,0,-3.5862524388,-0.4718043582,0.7352240209
C,0,-2.8188803224,0.5740667266,-1.1567852303
H,0,-4.1489250722,-1.1904261067,-1.3146353622
C,0,-2.7901677902,0.6032142338,1.1513055317
H,0,-4.1132128607,-1.1577352534,1.3869593111
C,0,-2.292464323,1.2707714684,-0.0176385729
H,0,-2.6700828737,0.8512796254,-2.1923068512
H,0,-2.6159162677,0.9057113459,2.1757934683
H,0,-1.9983266645,2.3192448209,-0.0349257863

State=1-A\HF=-1386.1114608

		1			2			3		
		A			A			A		
Frequencies --		22.0618			55.3015			71.7948		
Red. masses --		4.5293			6.2713			8.9769		
Frc consts --		0.0013			0.0113			0.0273		
IR Inten --		0.0924			0.4235			1.6803		
Atom	AN	X	Y	Z	X	Y	Z	X	Y	Z
1	13	0.06	0.05	0.07	0.11	-0.08	0.03	0.15	-0.01	0.00
2	13	0.03	0.04	-0.06	0.09	-0.04	-0.02	-0.05	0.10	0.01
3	13	-0.03	-0.04	-0.06	-0.09	0.04	-0.02	-0.03	0.10	0.00
4	13	-0.06	-0.05	0.07	-0.12	0.07	0.03	0.14	-0.03	0.02
5	3	0.00	0.00	-0.04	0.00	0.00	-0.23	-0.06	0.41	0.06
6	3	0.00	0.00	0.14	0.00	0.00	-0.14	0.30	-0.02	0.02
7	3	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.19	-0.08	-0.19	-0.03
8	12	0.00	0.00	-0.11	0.00	0.00	-0.21	0.15	0.18	-0.05
9	6	-0.08	-0.08	0.18	-0.07	0.11	0.03	-0.21	-0.10	0.00
10	6	0.09	0.09	0.18	0.07	-0.11	0.03	-0.24	-0.10	0.00
11	6	-0.13	-0.14	-0.04	-0.12	0.18	0.11	-0.13	-0.17	0.00
12	1	-0.16	-0.16	0.33	-0.14	0.20	-0.02	-0.23	-0.09	0.00
13	6	0.13	0.14	-0.05	0.12	-0.18	0.11	-0.17	-0.16	0.01
14	1	0.17	0.16	0.32	0.14	-0.21	-0.02	-0.28	-0.07	-0.01
15	6	0.00	0.00	-0.19	0.00	0.00	0.17	-0.06	-0.22	0.01
16	1	-0.25	-0.27	-0.09	-0.24	0.34	0.14	-0.08	-0.19	0.00
17	1	0.25	0.27	-0.10	0.24	-0.34	0.14	-0.14	-0.17	0.01
18	1	0.00	0.00	-0.36	0.00	0.00	0.30	-0.03	-0.23	0.01

	4	5	6
	A	A	A
Frequencies --	76.3699	89.4122	92.6304

Red. masses --		10.7222			6.8980			7.7311		
Frc consts --		0.0368			0.0325			0.0391		
IR Inten --		0.0890			1.6724			3.1017		
Atom	AN	X	Y	Z	X	Y	Z	X	Y	Z
1	13	-0.03	-0.09	-0.07	-0.03	-0.01	0.04	0.08	0.06	0.01
2	13	0.12	0.01	-0.07	-0.13	-0.02	0.14	0.11	-0.06	0.00
3	13	-0.13	0.02	-0.07	0.11	0.03	0.14	0.12	-0.06	0.01
4	13	0.07	0.08	-0.07	0.03	0.00	0.04	0.09	0.06	-0.01
5	3	-0.01	0.05	-0.40	0.01	0.00	-0.38	-0.24	0.08	-0.03
6	3	0.04	0.00	-0.13	0.02	0.00	0.03	-0.27	0.08	0.00
7	3	-0.01	-0.03	0.39	-0.01	-0.01	-0.52	0.14	0.14	-0.02
8	12	0.02	0.02	0.46	0.00	0.02	0.04	0.04	-0.27	0.00
9	6	-0.13	0.00	0.04	-0.10	0.05	-0.04	-0.28	0.17	0.00
10	6	0.08	-0.03	0.04	0.12	-0.07	-0.05	-0.26	0.16	0.00
11	6	-0.16	-0.02	-0.06	-0.16	0.08	-0.08	-0.11	0.04	-0.01
12	1	-0.22	0.01	0.11	-0.19	0.10	-0.02	-0.39	0.25	0.00
13	6	0.13	-0.03	-0.06	0.17	-0.09	-0.08	-0.09	0.03	0.00
14	1	0.18	-0.04	0.10	0.23	-0.13	-0.02	-0.36	0.23	0.00
15	6	-0.01	-0.03	-0.12	0.00	0.00	-0.10	0.02	-0.06	-0.01
16	1	-0.28	-0.01	-0.07	-0.31	0.16	-0.08	-0.07	0.02	-0.01
17	1	0.25	-0.03	-0.08	0.31	-0.17	-0.08	-0.02	-0.01	0.00
18	1	-0.01	-0.03	-0.18	-0.01	0.00	-0.08	0.20	-0.11	-0.01

			7			8			9	
			A			A			A	
Frequencies --		123.8306			125.5996			143.0351		
Red. masses --		12.1551			10.0464			15.0492		
Frc consts --		0.1098			0.0934			0.1814		
IR Inten --		1.4686			3.4843			1.4336		
Atom	AN	X	Y	Z	X	Y	Z	X	Y	Z
1	13	-0.19	0.18	-0.15	-0.19	0.01	-0.05	0.13	0.13	-0.15
2	13	0.03	0.07	0.15	0.14	-0.12	0.03	0.25	-0.28	0.05
3	13	-0.05	-0.05	0.16	0.14	-0.14	-0.01	-0.26	0.28	0.05
4	13	0.22	-0.18	-0.15	-0.17	-0.01	0.03	-0.13	-0.12	-0.15
5	3	0.00	-0.01	-0.13	-0.02	0.11	-0.01	0.00	-0.01	0.03
6	3	-0.06	0.01	0.45	0.74	-0.12	0.03	0.03	0.00	0.54
7	3	-0.02	-0.03	0.57	0.25	0.37	0.04	0.00	0.01	-0.51
8	12	0.00	-0.01	-0.19	0.00	0.12	-0.01	0.00	-0.01	0.10
9	6	-0.04	0.04	-0.03	-0.10	0.05	0.00	0.03	-0.01	0.03
10	6	0.06	-0.04	-0.03	-0.09	0.04	0.00	-0.03	0.01	0.03
11	6	-0.08	0.06	-0.03	-0.07	0.02	0.00	0.04	-0.02	0.04
12	1	-0.09	0.07	-0.03	-0.12	0.06	0.00	0.04	-0.02	0.02
13	6	0.09	-0.07	-0.03	-0.05	0.01	0.00	-0.04	0.02	0.04
14	1	0.11	-0.08	-0.03	-0.10	0.05	0.00	-0.05	0.02	0.03
15	6	0.00	0.00	-0.03	-0.02	-0.01	0.00	0.00	0.00	0.05

16	1	-0.16	0.12	-0.02	-0.07	0.02	0.00	0.07	-0.03	0.04
17	1	0.17	-0.12	-0.03	-0.04	0.00	0.00	-0.07	0.03	0.04
18	1	0.00	0.00	0.01	-0.03	0.00	0.00	0.00	0.00	0.04

	10	11	12
	A	A	A
Frequencies --	151.9154	170.3738	171.9672
Red. masses --	11.1385	25.9317	7.6204
Frc consts --	0.1515	0.4435	0.1328
IR Inten --	0.1121	0.3108	6.4845

Atom	AN	X	Y	Z	X	Y	Z	X	Y	Z
1	13	0.08	0.07	0.04	0.41	-0.04	-0.29	-0.10	0.08	-0.03
2	13	-0.11	0.14	-0.02	-0.03	0.41	0.22	-0.15	-0.03	0.00
3	13	-0.10	0.13	0.02	0.02	-0.41	0.22	-0.15	-0.03	0.00
4	13	0.09	0.07	-0.02	-0.40	0.05	-0.30	-0.10	0.08	0.04
5	3	-0.11	-0.39	0.00	0.00	-0.01	-0.03	0.01	0.24	0.01
6	3	0.76	0.01	-0.01	0.01	0.00	0.15	0.00	0.08	0.00
7	3	-0.11	0.11	0.01	-0.01	0.00	-0.06	-0.10	0.22	0.00
8	12	-0.11	-0.36	-0.01	0.00	-0.01	0.12	0.19	-0.09	0.00
9	6	0.02	-0.03	0.00	0.02	-0.01	0.01	0.00	0.04	0.00
10	6	0.02	-0.03	0.00	-0.02	0.01	0.01	0.01	0.04	0.00
11	6	0.00	0.00	0.00	0.04	-0.03	0.01	0.19	-0.11	0.00
12	1	0.02	-0.02	-0.01	0.03	-0.02	0.01	-0.09	0.11	0.00
13	6	-0.01	0.00	0.00	-0.03	0.02	0.01	0.20	-0.11	0.00
14	1	0.02	-0.02	0.00	-0.04	0.03	0.01	-0.09	0.11	0.00
15	6	-0.04	0.02	0.00	0.01	0.00	0.01	0.31	-0.20	0.00
16	1	-0.02	0.00	0.00	0.06	-0.05	0.01	0.27	-0.15	0.00
17	1	-0.02	0.00	0.00	-0.05	0.04	0.01	0.28	-0.16	0.00
18	1	-0.02	0.01	0.00	0.01	-0.01	-0.01	0.46	-0.24	0.00

	13	14	15
	A	A	A
Frequencies --	204.9401	206.2524	224.1427
Red. masses --	14.3758	8.1251	12.5857
Frc consts --	0.3557	0.2036	0.3725
IR Inten --	8.4662	11.1612	13.3626

Atom	AN	X	Y	Z	X	Y	Z	X	Y	Z
1	13	-0.17	0.01	0.05	-0.13	0.10	0.04	-0.11	-0.21	-0.10
2	13	0.32	0.20	0.10	0.12	0.02	-0.02	0.09	0.30	0.05
3	13	-0.33	-0.20	0.09	0.11	0.02	0.02	0.09	0.30	-0.05
4	13	0.17	-0.01	0.06	-0.12	0.10	-0.04	-0.11	-0.21	0.10
5	3	0.00	0.00	-0.11	-0.05	-0.12	0.00	-0.08	-0.22	0.00
6	3	0.00	0.00	-0.53	0.14	0.03	-0.01	-0.17	-0.37	0.01
7	3	0.00	0.02	-0.51	-0.19	-0.82	0.00	0.22	0.15	0.00
8	12	0.00	0.00	-0.08	-0.02	-0.01	0.00	-0.03	-0.02	0.00
9	6	0.03	-0.03	0.03	-0.06	0.06	0.00	-0.09	0.08	0.00

10	6	-0.03	0.03	0.03	-0.06	0.06	0.00	-0.09	0.07	0.00
11	6	0.06	-0.05	0.03	0.06	-0.03	0.00	0.08	-0.06	0.00
12	1	0.06	-0.04	0.03	-0.14	0.13	0.00	-0.22	0.17	0.00
13	6	-0.06	0.04	0.03	0.06	-0.03	0.00	0.09	-0.06	0.00
14	1	-0.06	0.05	0.03	-0.13	0.12	0.00	-0.21	0.17	0.00
15	6	0.00	0.00	0.03	0.13	-0.08	0.00	0.18	-0.13	0.00
16	1	0.11	-0.08	0.02	0.09	-0.04	0.00	0.13	-0.08	0.00
17	1	-0.10	0.08	0.03	0.10	-0.05	0.00	0.14	-0.09	0.00
18	1	0.00	0.00	0.01	0.17	-0.09	0.00	0.22	-0.14	0.00

		16			17			18		
		A			A			A		
Frequencies --		241.2458			252.4092			256.7023		
Red. masses --		12.7334			5.7869			7.6759		
Frc consts --		0.4366			0.2172			0.2980		
IR Inten --		1.6936			0.1643			4.7985		
Atom	AN	X	Y	Z	X	Y	Z	X	Y	Z
1	13	0.12	0.34	0.01	-0.01	-0.02	0.00	-0.07	-0.01	-0.07
2	13	-0.04	-0.06	0.05	0.05	0.03	0.00	0.04	0.06	0.00
3	13	0.04	0.06	0.04	-0.05	-0.02	0.00	0.05	0.06	0.00
4	13	-0.12	-0.35	0.01	0.00	0.02	0.00	-0.07	-0.01	0.07
5	3	0.00	0.00	0.05	0.01	0.04	0.70	0.14	0.68	-0.05
6	3	0.00	0.00	-0.81	0.00	-0.01	0.00	0.00	-0.19	0.00
7	3	0.00	0.00	0.18	0.00	-0.01	-0.07	-0.03	-0.14	0.00
8	12	0.00	0.00	0.09	0.00	-0.01	0.04	0.03	-0.26	0.00
9	6	-0.02	0.01	-0.01	-0.07	0.05	-0.07	0.12	-0.08	0.01
10	6	0.02	-0.01	-0.01	0.09	-0.07	-0.07	0.11	-0.07	0.00
11	6	-0.04	0.02	-0.01	-0.18	0.12	-0.08	-0.04	0.05	0.01
12	1	-0.04	0.03	-0.01	-0.13	0.09	-0.06	0.28	-0.21	0.01
13	6	0.04	-0.02	-0.01	0.17	-0.11	-0.08	-0.07	0.07	0.01
14	1	0.04	-0.03	-0.01	0.17	-0.12	-0.07	0.26	-0.19	0.00
15	6	0.00	0.00	-0.02	-0.01	0.01	-0.10	-0.15	0.12	0.01
16	1	-0.06	0.04	-0.01	-0.31	0.20	-0.07	-0.06	0.06	0.01
17	1	0.06	-0.04	-0.01	0.30	-0.19	-0.08	-0.12	0.10	0.00
18	1	0.00	0.00	-0.01	-0.01	0.01	-0.03	-0.06	0.09	0.00

		19			20			21		
		A			A			A		
Frequencies --		273.8519			336.2820			339.9446		
Red. masses --		19.4190			16.0123			13.7506		
Frc consts --		0.8580			1.0669			0.9362		
IR Inten --		19.7883			50.6498			58.8855		
Atom	AN	X	Y	Z	X	Y	Z	X	Y	Z
1	13	-0.07	-0.13	0.52	-0.12	-0.07	0.04	-0.06	0.02	0.07
2	13	0.02	0.08	-0.04	0.02	0.06	-0.31	-0.09	0.02	0.34
3	13	0.02	0.08	0.05	0.02	0.06	0.31	-0.09	0.02	-0.34

4	13	-0.07	-0.13	-0.53	-0.12	-0.07	-0.04	-0.06	0.02	-0.07
5	3	0.10	0.44	-0.01	-0.04	-0.39	0.00	-0.07	-0.21	0.00
6	3	0.02	0.20	0.00	-0.03	0.23	0.00	0.00	0.18	0.00
7	3	0.18	0.18	0.00	-0.03	0.06	0.00	0.61	-0.26	0.00
8	12	-0.12	-0.04	0.00	0.52	-0.03	0.00	0.30	-0.06	0.00
9	6	0.01	0.01	0.00	0.00	-0.05	0.00	0.02	-0.04	0.00
10	6	0.01	0.01	0.00	0.00	-0.05	0.00	0.02	-0.04	0.00
11	6	0.06	-0.04	-0.01	-0.15	0.07	0.01	-0.08	0.05	0.01
12	1	0.02	0.00	0.01	0.03	-0.07	-0.01	0.06	-0.07	-0.01
13	6	0.06	-0.04	0.01	-0.15	0.07	-0.01	-0.08	0.05	-0.01
14	1	0.02	0.00	0.00	0.03	-0.07	0.01	0.06	-0.07	0.01
15	6	0.10	-0.06	0.00	-0.18	0.11	0.00	-0.12	0.08	0.00
16	1	0.10	-0.06	-0.01	-0.23	0.12	0.01	-0.13	0.07	0.01
17	1	0.09	-0.06	0.01	-0.22	0.12	-0.01	-0.13	0.07	-0.01
18	1	0.09	-0.06	0.00	-0.13	0.09	0.00	-0.08	0.07	0.00

	22	23	24
	A	A	A
Frequencies --	355.7269	370.2501	477.8760
Red. masses --	8.9137	8.5766	6.0504
Frc consts --	0.6646	0.6927	0.8141
IR Inten --	10.9645	60.9801	23.0206

Atom	AN	X	Y	Z	X	Y	Z	X	Y	Z
1	13	0.01	-0.03	-0.10	-0.02	-0.13	-0.07	0.00	0.00	0.00
2	13	-0.07	0.00	-0.14	0.08	0.02	0.10	-0.02	0.00	0.01
3	13	-0.07	0.00	0.14	0.08	0.02	-0.10	-0.02	0.00	-0.01
4	13	0.01	-0.03	0.10	-0.03	-0.13	0.07	0.00	0.00	0.00
5	3	0.02	0.13	0.00	0.01	0.05	0.00	0.85	-0.11	0.00
6	3	0.06	0.48	0.00	0.08	0.84	0.00	0.00	0.00	0.00
7	3	0.75	-0.26	0.00	-0.44	0.09	0.00	-0.01	-0.01	0.00
8	12	-0.16	-0.01	0.00	-0.02	-0.03	0.00	0.00	-0.04	0.00
9	6	0.00	0.01	0.00	0.00	0.00	0.00	-0.09	0.05	0.00
10	6	0.00	0.01	0.00	0.00	0.00	0.00	-0.10	0.05	0.00
11	6	0.04	-0.02	0.00	0.00	0.00	0.00	-0.10	0.03	0.00
12	1	0.00	0.01	0.00	0.01	0.00	0.00	-0.22	0.14	0.02
13	6	0.04	-0.02	0.00	0.00	0.00	0.00	-0.09	0.03	0.00
14	1	0.00	0.01	0.00	0.01	0.00	0.00	-0.22	0.14	-0.01
15	6	0.04	-0.03	0.00	0.00	0.00	0.00	0.07	-0.06	0.00
16	1	0.06	-0.03	0.00	0.01	0.00	0.00	-0.17	0.08	0.00
17	1	0.06	-0.03	0.00	0.01	0.00	0.00	-0.16	0.07	0.00
18	1	0.03	-0.02	0.00	0.03	-0.01	0.00	-0.09	-0.01	0.00

	25	26	27
	A	A	A
Frequencies --	624.6640	630.7163	715.2638
Red. masses --	5.4845	3.7993	1.1878

Frc consts --		1.2609			0.8905			0.3580		
IR Inten --		60.6549			0.2016			148.3530		
Atom	AN	X	Y	Z	X	Y	Z	X	Y	Z
1	13	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
2	13	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
3	13	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
4	13	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
5	3	-0.14	0.01	0.00	-0.01	0.00	-0.04	-0.02	0.01	0.00
6	3	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
7	3	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
8	12	-0.03	0.00	0.00	0.00	0.00	0.01	0.01	-0.01	0.00
9	6	0.10	-0.05	-0.03	0.24	-0.20	0.00	-0.03	0.03	-0.01
10	6	0.14	-0.07	0.02	-0.23	0.19	0.00	-0.03	0.03	0.01
11	6	-0.22	0.14	0.01	-0.16	0.11	0.01	0.01	-0.04	0.01
12	1	0.15	-0.09	-0.02	0.42	-0.33	0.00	0.13	-0.09	-0.03
13	6	-0.24	0.16	-0.01	0.14	-0.10	0.01	0.01	-0.04	-0.01
14	1	0.21	-0.13	0.02	-0.40	0.32	0.01	0.13	-0.09	0.02
15	6	0.39	-0.22	0.00	0.02	-0.01	-0.01	0.08	0.03	0.00
16	1	-0.40	0.27	0.02	-0.27	0.17	0.01	-0.02	-0.07	0.00
17	1	-0.42	0.28	-0.01	0.23	-0.14	0.00	-0.01	-0.07	0.00
18	1	-0.01	-0.10	-0.01	0.00	0.00	0.12	-0.91	0.31	0.01

			28			29			30	
			A			A			A	
Frequencies --		748.6489			776.0567			851.3409		
Red. masses --		1.2657			1.1513			2.1744		
Frc consts --		0.4179			0.4085			0.9285		
IR Inten --		4.3785			248.5059			3.6389		
Atom	AN	X	Y	Z	X	Y	Z	X	Y	Z
1	13	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
2	13	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
3	13	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
4	13	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
5	3	0.00	0.00	-0.01	-0.03	0.03	0.00	0.00	0.01	0.00
6	3	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
7	3	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
8	12	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	-0.01	0.00	0.00
9	6	-0.04	0.05	0.01	0.05	-0.04	0.00	-0.01	-0.09	0.01
10	6	0.04	-0.05	0.01	0.04	-0.04	0.00	-0.01	-0.09	-0.01
11	6	-0.07	0.06	-0.01	0.04	-0.03	0.02	-0.06	0.02	0.15
12	1	0.29	-0.22	0.01	-0.44	0.35	0.00	-0.19	0.23	-0.19
13	6	0.07	-0.06	-0.01	0.04	-0.03	-0.02	-0.06	0.02	-0.15
14	1	-0.29	0.22	0.02	-0.44	0.35	0.01	-0.18	0.23	0.19
15	6	0.00	0.00	0.00	-0.01	0.01	0.00	0.11	0.16	0.00
16	1	0.45	-0.36	-0.05	-0.32	0.24	0.04	0.30	-0.45	0.07

17	1	-0.46	0.36	-0.05	-0.32	0.23	-0.03	0.29	-0.46	-0.07
18	1	-0.01	0.00	0.16	-0.21	0.07	0.00	0.14	0.15	-0.01

	31	32	33
	A	A	A
Frequencies --	857.6043	874.2298	893.7679
Red. masses --	4.4542	1.6962	1.2295
Frc consts --	1.9302	0.7638	0.5787
IR Inten --	0.1584	4.7277	0.0302

Atom	AN	X	Y	Z	X	Y	Z	X	Y	Z
1	13	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
2	13	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
3	13	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
4	13	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
5	3	0.00	0.00	0.00	-0.01	0.01	0.00	0.00	0.00	0.00
6	3	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
7	3	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
8	12	0.00	0.00	0.00	0.01	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
9	6	0.15	0.18	0.21	0.09	0.02	-0.02	0.07	-0.05	0.01
10	6	-0.15	-0.18	0.22	0.09	0.02	0.02	-0.07	0.05	0.01
11	6	0.11	0.10	-0.15	-0.06	0.03	-0.12	-0.04	0.04	0.00
12	1	0.19	0.27	0.09	-0.31	0.19	0.13	-0.46	0.37	0.01
13	6	-0.11	-0.10	-0.16	-0.06	0.03	0.12	0.04	-0.04	0.00
14	1	-0.18	-0.26	0.11	-0.31	0.19	-0.12	0.46	-0.37	0.00
15	6	0.00	0.00	-0.12	-0.05	-0.08	0.00	0.00	0.00	-0.01
16	1	-0.29	-0.07	-0.26	0.42	-0.28	-0.14	0.29	-0.23	-0.03
17	1	0.29	0.07	-0.27	0.42	-0.28	0.13	-0.29	0.23	-0.02
18	1	0.01	0.00	0.37	-0.32	0.00	0.01	0.00	0.00	0.02

	34	35	36
	A	A	A
Frequencies --	1015.0588	1018.0145	1075.9310
Red. masses --	1.5259	1.4149	1.3561
Frc consts --	0.9263	0.8639	0.9249
IR Inten --	34.4306	4.5234	3.2153

Atom	AN	X	Y	Z	X	Y	Z	X	Y	Z
1	13	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
2	13	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
3	13	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
4	13	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
5	3	-0.01	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
6	3	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
7	3	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
8	12	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
9	6	0.02	0.03	0.09	-0.04	-0.06	-0.01	-0.01	-0.02	0.09
10	6	0.02	0.02	-0.09	0.04	0.06	-0.01	-0.01	-0.02	-0.09

11	6	-0.02	-0.04	-0.06	0.01	-0.02	-0.09	0.01	0.04	0.07
12	1	-0.08	-0.13	0.37	-0.19	-0.16	0.23	-0.18	-0.23	0.49
13	6	-0.02	-0.04	0.06	-0.02	0.01	-0.09	0.01	0.04	-0.08
14	1	-0.10	-0.14	-0.37	0.19	0.16	0.21	-0.19	-0.24	-0.48
15	6	0.07	0.11	0.00	0.00	0.00	0.10	0.00	-0.03	0.00
16	1	-0.36	-0.35	-0.19	-0.06	0.02	-0.09	0.27	0.23	0.17
17	1	-0.36	-0.35	0.21	0.04	-0.03	-0.09	0.26	0.22	-0.18
18	1	0.19	0.08	-0.02	0.02	0.01	0.84	-0.14	0.01	0.00

	37	38	39
	A	A	A
Frequencies --	1081.2102	1135.8945	1283.2957
Red. masses --	1.2317	3.7219	1.3046
Frc consts --	0.8483	2.8293	1.2658
IR Inten --	6.1518	10.0210	0.0919

Atom	AN	X	Y	Z	X	Y	Z	X	Y	Z
1	13	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
2	13	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
3	13	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
4	13	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
5	3	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
6	3	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
7	3	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
8	12	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
9	6	-0.01	-0.02	0.03	0.12	0.16	0.13	0.02	0.03	-0.05
10	6	0.01	0.02	0.03	0.11	0.16	-0.14	-0.03	-0.03	-0.05
11	6	0.04	0.07	-0.03	-0.04	-0.05	0.18	0.03	0.05	0.00
12	1	-0.13	-0.20	0.33	0.26	0.30	-0.10	-0.14	-0.20	0.34
13	6	-0.04	-0.07	-0.03	-0.05	-0.05	-0.18	-0.03	-0.05	0.00
14	1	0.14	0.20	0.33	0.26	0.30	0.09	0.14	0.20	0.34
15	6	0.00	0.00	-0.04	-0.14	-0.20	0.00	0.00	0.00	0.11
16	1	0.32	0.40	0.09	-0.20	-0.35	0.10	-0.26	-0.35	-0.15
17	1	-0.32	-0.40	0.11	-0.20	-0.35	-0.09	0.25	0.35	-0.16
18	1	0.00	0.00	-0.32	-0.17	-0.21	0.00	-0.01	0.00	-0.45

	40	41	42
	A	A	A
Frequencies --	1370.3216	1384.1393	1455.0956
Red. masses --	3.9478	4.3514	2.2975
Frc consts --	4.3677	4.9117	2.8661
IR Inten --	0.3311	1.4751	9.8375

Atom	AN	X	Y	Z	X	Y	Z	X	Y	Z
1	13	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
2	13	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
3	13	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
4	13	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00

5	3	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.01	0.00	0.00
6	3	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
7	3	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
8	12	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
9	6	0.06	0.05	0.05	-0.10	-0.14	0.26	-0.02	-0.02	-0.14
10	6	-0.06	-0.05	0.05	-0.10	-0.14	-0.25	-0.02	-0.02	0.14
11	6	-0.12	-0.13	-0.18	0.11	0.18	-0.09	0.09	0.13	0.08
12	1	0.13	0.16	-0.13	0.17	0.23	-0.38	-0.17	-0.24	0.19
13	6	0.12	0.13	-0.19	0.11	0.18	0.09	0.09	0.13	-0.08
14	1	-0.13	-0.17	-0.13	0.18	0.23	0.38	-0.18	-0.24	-0.19
15	6	0.00	0.00	0.35	-0.01	-0.10	0.00	-0.06	-0.10	0.00
16	1	0.21	0.29	-0.03	-0.07	-0.15	-0.23	-0.31	-0.43	-0.13
17	1	-0.21	-0.28	-0.03	-0.07	-0.16	0.23	-0.31	-0.43	0.14
18	1	0.00	0.00	-0.60	-0.29	-0.02	0.00	-0.12	-0.10	0.00

	43	44	45
	A	A	A
Frequencies --	1480.8341	3127.5061	3193.0107
Red. masses --	3.0152	1.0887	1.0877
Frc consts --	3.8957	6.2743	6.5338
IR Inten --	0.6792	10.1781	1.3647

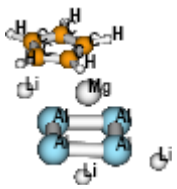
Atom	AN	X	Y	Z	X	Y	Z	X	Y	Z
1	13	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
2	13	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
3	13	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
4	13	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
5	3	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
6	3	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
7	3	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
8	12	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
9	6	-0.13	-0.17	0.09	0.00	0.00	0.00	-0.03	-0.04	-0.03
10	6	0.13	0.17	0.09	0.00	0.00	0.00	0.03	0.04	-0.03
11	6	0.09	0.14	-0.07	0.00	0.00	0.00	0.00	-0.01	0.02
12	1	0.11	0.13	-0.49	0.00	0.00	0.00	0.34	0.43	0.39
13	6	-0.09	-0.14	-0.06	0.00	0.00	0.00	0.00	0.01	0.02
14	1	-0.12	-0.13	-0.48	0.00	0.00	0.00	-0.31	-0.41	0.38
15	6	0.00	0.00	0.10	0.02	0.08	0.00	0.00	0.00	0.00
16	1	-0.11	-0.15	-0.21	0.01	0.03	-0.08	0.03	0.07	-0.25
17	1	0.10	0.15	-0.21	0.02	0.03	0.08	-0.04	-0.07	-0.25
18	1	0.00	0.00	-0.37	-0.26	-0.95	0.01	0.00	0.00	0.00

	46	47	48
	A	A	A
Frequencies --	3204.2127	3216.1083	3222.8669
Red. masses --	1.0917	1.0961	1.1033
Frc consts --	6.6039	6.6796	6.7518

IR Inten	--	5.6246			5.4604			4.5676		
Atom	AN	X	Y	Z	X	Y	Z	X	Y	Z
1	13	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
2	13	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
3	13	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
4	13	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
5	3	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
6	3	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
7	3	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
8	12	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
9	6	0.02	0.03	0.03	0.01	0.02	0.01	-0.02	-0.03	-0.02
10	6	0.02	0.03	-0.03	-0.01	-0.02	0.01	-0.02	-0.03	0.03
11	6	0.00	0.01	-0.04	-0.01	-0.02	0.05	0.01	0.01	-0.05
12	1	-0.27	-0.34	-0.32	-0.12	-0.15	-0.13	0.23	0.29	0.26
13	6	0.00	0.01	0.04	0.01	0.02	0.06	0.01	0.01	0.05
14	1	-0.27	-0.34	0.33	0.14	0.19	-0.17	0.22	0.28	-0.27
15	6	0.00	0.01	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.01	0.00
16	1	-0.06	-0.11	0.40	0.09	0.17	-0.62	-0.08	-0.15	0.54
17	1	-0.07	-0.13	-0.45	-0.10	-0.18	-0.62	-0.08	-0.14	-0.49
18	1	-0.02	-0.07	0.00	0.00	0.00	0.01	-0.03	-0.09	0.00

$CpMgAl_4Li_3 \rightarrow CpLi + Al_4Li_2Mg$ **-24.3693942**

$CpMgAl_4Li_3 \rightarrow Cp^- + Al_4Li_3Mg^+$ **-141.6661682**



Charge = 0 Multiplicity = 1

Al,0,-2.2941342015,-0.8624254819,1.1983819642
Al,0,0.2592940549,-1.829322975,1.3586138501
Al,0,0.4115574866,-1.9505633728,-1.1482852447
Al,0,-2.1511579598,-0.9898061887,-1.3822196086
Li,0,2.3480647219,-0.2223676248,0.1548336408
Li,0,-4.4599845047,-1.438610697,-0.1952163312
Li,0,-1.6470481546,-3.3573647738,0.0465997646
Mg,0,-0.2867517441,0.6857702694,-0.0861350214
C,0,0.702006199,2.735920473,0.1127612087
C,0,1.5607839312,2.3893583659,1.1942723375
C,0,1.386051535,2.4160907401,-1.1013121755
H,0,-0.207618564,3.322767199,0.1925150471
C,0,2.7741848128,1.9133509131,0.6536592199
H,0,1.3475965999,2.5377265709,2.2444949306
C,0,2.6620687147,1.9182273474,-0.7623197441

H,0,1.0310976004,2.6155487476,-2.1045673384
H,0,3.6629052709,1.6680547883,1.2272943051
H,0,3.4411007364,1.6615359507,-1.4715154822

State=1-A\HF=-1386.1058469

		1			2			3		
		A			A			A		
Frequencies --		-14.4070			50.5166			55.6395		
Red. masses --		4.0927			9.7483			7.9358		
Frc consts --		0.0005			0.0147			0.0145		
IR Inten --		0.3129			1.4792			4.9097		
Atom	AN	X	Y	Z	X	Y	Z	X	Y	Z
1	13	0.02	0.05	0.05	-0.23	-0.03	0.02	-0.06	0.02	0.01
2	13	-0.01	0.04	-0.05	-0.07	0.00	-0.03	0.08	0.08	0.00
3	13	0.00	-0.06	-0.05	0.10	0.06	-0.03	-0.04	0.01	-0.01
4	13	0.03	-0.05	0.05	0.06	0.01	0.03	-0.19	-0.07	0.02
5	3	-0.02	-0.05	-0.09	0.06	0.16	-0.10	0.11	0.28	0.13
6	3	0.02	-0.01	0.10	-0.04	0.03	0.23	-0.01	0.12	-0.05
7	3	0.00	0.02	-0.03	0.01	-0.07	0.11	0.02	-0.11	-0.12
8	12	0.03	-0.03	0.04	-0.09	0.10	-0.38	-0.15	0.16	0.15
9	6	0.01	0.00	-0.21	0.02	-0.10	0.08	-0.03	-0.18	-0.11
10	6	0.08	-0.15	-0.04	0.22	-0.05	0.11	0.04	-0.21	-0.07
11	6	-0.11	0.18	-0.10	-0.08	-0.10	0.10	0.13	-0.06	-0.08
12	1	0.01	-0.03	-0.39	0.06	-0.09	0.08	-0.06	-0.20	-0.18
13	6	0.01	-0.07	0.17	0.22	-0.02	0.15	0.23	-0.08	-0.02
14	1	0.16	-0.30	-0.07	0.36	-0.02	0.11	-0.05	-0.29	-0.08
15	6	-0.12	0.13	0.13	0.03	-0.05	0.15	0.28	0.00	-0.02
16	1	-0.15	0.34	-0.18	-0.26	-0.15	0.10	0.15	0.00	-0.11
17	1	0.05	-0.14	0.33	0.33	0.01	0.20	0.28	-0.07	0.02
18	1	-0.22	0.23	0.26	-0.03	-0.05	0.18	0.41	0.10	0.00

		4			5			6		
		A			A			A		
Frequencies --		65.0017			78.3766			99.9114		
Red. masses --		7.7275			11.1510			5.9650		
Frc consts --		0.0192			0.0404			0.0351		
IR Inten --		8.5825			0.2734			2.4993		
Atom	AN	X	Y	Z	X	Y	Z	X	Y	Z
1	13	0.01	-0.11	-0.02	0.03	0.12	0.09	0.02	-0.01	0.02
2	13	-0.04	-0.10	0.01	0.18	-0.01	0.11	0.00	-0.04	0.12
3	13	-0.02	-0.08	-0.01	-0.18	-0.01	0.11	-0.01	0.04	0.12
4	13	0.02	-0.09	0.01	0.02	-0.13	0.09	-0.04	0.02	0.02
5	3	0.03	0.05	-0.03	-0.01	-0.05	0.44	0.02	0.03	-0.51
6	3	0.60	0.71	0.00	0.04	0.02	0.15	-0.02	-0.02	-0.10
7	3	-0.06	0.02	0.02	0.00	0.02	-0.70	0.00	0.00	-0.33

8	12	-0.05	0.02	0.00	0.02	-0.03	-0.30	-0.01	0.00	0.08
9	6	-0.06	0.05	0.01	0.00	0.03	-0.04	0.02	-0.01	-0.05
10	6	-0.02	0.08	0.01	-0.04	0.02	-0.05	0.21	0.09	-0.05
11	6	-0.06	0.05	0.01	0.00	0.03	-0.05	-0.17	-0.10	-0.05
12	1	-0.10	0.04	0.02	0.02	0.04	-0.04	0.01	0.00	-0.01
13	6	0.01	0.09	0.00	-0.07	0.00	-0.05	0.14	0.05	-0.05
14	1	-0.02	0.09	0.01	-0.06	0.01	-0.05	0.37	0.16	-0.04
15	6	-0.01	0.07	0.00	-0.03	0.02	-0.05	-0.11	-0.07	-0.05
16	1	-0.09	0.03	0.01	0.01	0.04	-0.05	-0.31	-0.17	-0.03
17	1	0.05	0.11	0.00	-0.13	-0.02	-0.06	0.25	0.10	-0.03
18	1	0.00	0.07	0.00	0.00	0.03	-0.05	-0.24	-0.13	-0.04

	7	8	9
	A	A	A
Frequencies --	118.0127	134.3668	147.0174
Red. masses --	7.5780	7.9449	11.9779
Frc consts --	0.0622	0.0845	0.1525
IR Inten --	1.1616	0.1462	2.5180

Atom	AN	X	Y	Z	X	Y	Z	X	Y	Z
1	13	0.04	0.09	0.00	0.18	0.03	0.06	-0.22	-0.20	0.02
2	13	-0.15	-0.09	-0.01	0.07	0.11	0.01	0.19	0.01	-0.11
3	13	-0.16	-0.10	0.00	-0.06	-0.11	0.01	-0.16	0.00	-0.11
4	13	0.05	0.09	0.00	-0.16	-0.01	0.06	0.21	0.22	0.02
5	3	0.22	0.06	0.03	0.02	0.02	0.25	0.02	0.00	0.45
6	3	-0.10	-0.09	0.02	0.00	0.00	-0.24	0.00	0.01	0.18
7	3	-0.15	0.23	0.01	0.00	0.00	0.53	0.02	0.00	-0.06
8	12	-0.01	-0.24	-0.01	-0.01	0.00	-0.13	0.00	-0.02	0.21
9	6	-0.10	-0.02	0.00	0.01	0.00	-0.07	0.01	0.00	-0.06
10	6	0.06	0.05	0.00	0.19	0.08	-0.07	0.18	0.09	-0.06
11	6	0.03	0.04	0.00	-0.19	-0.09	-0.07	-0.20	-0.09	-0.06
12	1	-0.28	-0.06	0.00	0.01	0.01	-0.03	-0.02	0.00	-0.02
13	6	0.26	0.15	0.01	0.09	0.04	-0.07	0.08	0.04	-0.07
14	1	0.01	0.04	0.00	0.33	0.15	-0.06	0.30	0.15	-0.05
15	6	0.25	0.14	0.01	-0.12	-0.06	-0.07	-0.13	-0.07	-0.07
16	1	-0.05	0.02	0.00	-0.32	-0.15	-0.06	-0.31	-0.15	-0.05
17	1	0.41	0.23	0.01	0.14	0.07	-0.06	0.12	0.06	-0.06
18	1	0.40	0.22	0.00	-0.20	-0.10	-0.06	-0.19	-0.10	-0.06

	10	11	12
	A	A	A
Frequencies --	148.6526	158.4221	165.2905
Red. masses --	17.7295	14.0519	8.9234
Frc consts --	0.2308	0.2078	0.1436
IR Inten --	0.6292	5.7237	2.7696

Atom	AN	X	Y	Z	X	Y	Z	X	Y	Z
1	13	0.15	-0.11	0.31	-0.16	0.03	0.11	0.15	0.18	-0.09

2	13	-0.15	-0.31	-0.22	0.17	0.16	-0.07	0.01	-0.10	0.00
3	13	0.09	0.23	-0.23	0.17	0.18	0.02	0.22	0.06	0.01
4	13	-0.07	0.10	0.33	-0.19	0.11	0.02	0.11	0.01	-0.03
5	3	-0.03	0.06	0.17	0.18	-0.28	-0.10	0.05	0.12	0.23
6	3	-0.01	-0.09	-0.58	0.04	0.35	-0.18	0.04	-0.04	0.20
7	3	-0.02	0.05	-0.28	0.14	-0.23	-0.03	0.17	0.01	-0.04
8	12	-0.02	0.09	-0.03	0.05	-0.46	-0.04	-0.19	-0.01	0.06
9	6	0.01	0.01	0.01	-0.14	-0.05	0.02	-0.30	-0.13	-0.01
10	6	0.00	0.00	0.01	-0.12	-0.04	0.02	-0.13	-0.06	-0.01
11	6	0.02	0.01	0.01	-0.06	-0.01	0.01	-0.30	-0.13	-0.01
12	1	0.04	0.01	0.01	-0.30	-0.09	0.00	-0.42	-0.15	0.00
13	6	-0.01	-0.01	0.01	0.00	0.01	0.02	0.01	0.01	-0.02
14	1	0.00	0.00	0.01	-0.17	-0.06	0.01	-0.13	-0.05	-0.01
15	6	0.01	0.00	0.01	0.04	0.03	0.02	-0.09	-0.03	-0.02
16	1	0.03	0.01	0.01	-0.09	-0.01	0.01	-0.42	-0.18	-0.01
17	1	-0.03	-0.02	0.00	0.09	0.06	0.01	0.13	0.08	-0.01
18	1	0.01	0.00	0.01	0.12	0.08	0.02	-0.01	0.01	-0.01

	13	14	15
	A	A	A
Frequencies --	167.3009	211.5430	218.6075
Red. masses --	10.5643	15.1387	9.2424
Frc consts --	0.1742	0.3992	0.2602
IR Inten --	5.8937	6.2286	6.7102

Atom	AN	X	Y	Z	X	Y	Z	X	Y	Z
1	13	0.07	-0.09	0.05	0.07	0.08	-0.01	-0.03	-0.16	-0.08
2	13	0.21	0.10	0.02	0.30	-0.26	-0.07	0.06	0.14	0.04
3	13	-0.10	-0.18	0.00	-0.30	0.34	-0.08	0.11	0.10	-0.03
4	13	0.17	0.19	0.12	-0.05	-0.14	0.02	-0.02	-0.16	0.07
5	3	-0.02	0.12	-0.46	0.00	-0.01	-0.40	0.02	-0.01	0.03
6	3	0.03	-0.09	-0.30	0.03	-0.04	0.41	0.13	-0.19	-0.04
7	3	0.09	0.07	0.03	-0.05	0.05	0.50	-0.40	0.80	-0.03
8	12	-0.14	0.08	-0.12	0.00	-0.01	-0.01	-0.01	-0.05	0.00
9	6	-0.20	-0.09	0.04	-0.03	-0.01	0.01	-0.06	-0.04	0.00
10	6	-0.27	-0.12	0.04	-0.05	-0.02	0.01	-0.03	-0.02	0.00
11	6	-0.01	0.00	0.04	0.01	0.00	0.01	-0.05	-0.03	0.00
12	1	-0.24	-0.10	0.01	-0.04	-0.02	0.00	-0.09	-0.04	0.00
13	6	-0.08	-0.03	0.04	0.00	0.00	0.01	0.02	0.00	0.00
14	1	-0.38	-0.17	0.03	-0.07	-0.03	0.01	-0.03	-0.02	0.00
15	6	0.05	0.03	0.05	0.02	0.01	0.01	0.01	-0.01	0.00
16	1	0.02	0.02	0.03	0.02	0.01	0.01	-0.07	-0.04	0.00
17	1	-0.05	-0.02	0.04	0.03	0.01	0.01	0.05	0.02	0.00
18	1	0.15	0.08	0.04	0.02	0.01	0.01	0.03	0.01	0.00

	16	17	18
	A	A	A

Frequencies --		235.6238			253.5842			282.4316		
Red. masses --		13.1493			12.9039			18.4678		
Frc consts --		0.4301			0.4889			0.8679		
IR Inten --		11.1477			3.3750			15.7982		
Atom	AN	X	Y	Z	X	Y	Z	X	Y	Z
1	13	0.14	-0.15	-0.03	0.28	-0.27	-0.01	0.09	-0.10	0.51
2	13	-0.21	0.30	0.02	-0.04	0.06	-0.03	0.01	0.03	-0.12
3	13	-0.18	0.26	-0.01	0.02	-0.03	-0.04	0.01	0.03	0.12
4	13	0.19	-0.15	0.03	-0.26	0.25	-0.01	0.09	-0.09	-0.51
5	3	-0.04	0.01	0.03	0.00	-0.01	-0.05	-0.15	0.39	0.00
6	3	0.29	-0.25	-0.07	0.01	-0.01	0.80	-0.23	0.15	0.00
7	3	0.03	-0.56	-0.02	0.00	-0.02	-0.21	-0.23	0.17	0.00
8	12	0.03	-0.05	0.00	0.00	-0.01	-0.07	0.07	0.01	-0.01
9	6	-0.12	-0.05	0.00	0.00	0.00	0.00	-0.09	-0.05	0.00
10	6	-0.05	-0.01	0.00	-0.02	-0.01	0.00	-0.07	-0.04	0.00
11	6	-0.08	-0.03	0.00	0.03	0.01	0.01	-0.08	-0.04	0.00
12	1	-0.22	-0.07	0.00	-0.01	0.00	0.00	-0.14	-0.06	0.00
13	6	0.08	0.04	0.00	-0.01	0.00	0.00	0.02	0.00	0.00
14	1	-0.07	-0.01	0.00	-0.05	-0.02	0.00	-0.10	-0.05	0.00
15	6	0.06	0.03	0.00	0.02	0.01	0.01	0.00	0.00	0.00
16	1	-0.13	-0.05	0.00	0.04	0.02	0.00	-0.13	-0.06	0.00
17	1	0.17	0.10	0.00	-0.01	0.00	0.00	0.03	0.01	0.00
18	1	0.14	0.07	-0.01	0.04	0.02	0.00	0.02	0.00	0.00

		19			20			21		
		A			A			A		
Frequencies --		307.9604			332.5025			348.0636		
Red. masses --		7.1519			19.7550			7.9633		
Frc consts --		0.3996			1.2868			0.5684		
IR Inten --		10.2684			0.1358			38.3402		
Atom	AN	X	Y	Z	X	Y	Z	X	Y	Z
1	13	0.00	0.00	-0.08	0.00	0.05	0.09	-0.06	-0.04	0.06
2	13	0.00	0.00	-0.05	0.04	-0.02	0.55	-0.08	0.01	0.09
3	13	0.00	0.00	0.05	0.04	-0.02	-0.55	-0.08	0.01	-0.09
4	13	-0.01	0.00	0.08	-0.01	0.05	-0.09	-0.06	-0.05	-0.06
5	3	-0.15	0.82	-0.01	0.12	0.31	-0.01	0.03	0.03	0.00
6	3	0.06	-0.03	0.00	-0.04	0.04	0.00	0.11	-0.08	0.00
7	3	0.07	-0.02	0.00	-0.35	-0.25	0.00	0.88	0.38	0.01
8	12	0.02	-0.21	0.00	0.12	-0.05	-0.01	0.06	0.00	0.00
9	6	0.12	0.05	0.00	-0.01	-0.01	0.00	-0.02	-0.01	0.00
10	6	0.01	0.00	0.00	-0.06	-0.03	0.00	-0.03	-0.01	0.00
11	6	0.05	0.03	-0.01	-0.05	-0.02	0.00	-0.03	-0.01	0.00
12	1	0.15	0.05	0.00	-0.04	-0.02	0.00	-0.06	-0.02	0.00
13	6	-0.09	-0.05	0.00	-0.04	-0.02	0.00	0.00	0.00	0.00
14	1	0.03	0.00	0.00	-0.09	-0.04	0.00	-0.04	-0.01	0.00

15	6	-0.09	-0.05	0.00	-0.05	-0.02	0.00	0.00	0.00	0.00
16	1	0.10	0.04	-0.01	-0.06	-0.03	0.00	-0.04	-0.02	0.00
17	1	-0.27	-0.15	0.01	-0.09	-0.04	0.00	0.01	0.01	0.00
18	1	-0.21	-0.11	0.00	-0.08	-0.04	0.00	0.01	0.01	0.00

	22	23	24
	A	A	A
Frequencies --	367.9744	379.2705	397.0989
Red. masses --	9.4827	8.8114	6.5442
Frc consts --	0.7565	0.7468	0.6080
IR Inten --	33.8559	113.0146	60.2049

Atom	AN	X	Y	Z	X	Y	Z	X	Y	Z
1	13	-0.02	-0.02	-0.11	-0.12	0.11	0.06	0.01	-0.02	0.00
2	13	-0.01	-0.03	-0.04	0.01	-0.05	-0.06	-0.04	0.02	-0.04
3	13	-0.01	-0.03	0.04	0.01	-0.05	0.06	-0.04	0.02	0.04
4	13	-0.03	-0.02	0.11	-0.12	0.11	-0.07	0.01	-0.02	0.01
5	3	-0.13	0.13	0.01	0.08	0.06	0.00	0.87	0.09	-0.02
6	3	-0.31	0.22	0.00	0.73	-0.52	0.01	-0.10	0.05	0.00
7	3	-0.01	-0.02	0.00	-0.16	-0.07	0.00	-0.03	0.01	0.00
8	12	0.45	0.12	-0.01	0.15	0.07	0.00	0.03	0.05	0.00
9	6	-0.18	-0.09	0.00	-0.05	-0.03	0.00	0.06	0.02	0.00
10	6	-0.17	-0.07	0.00	-0.07	-0.03	0.00	-0.09	-0.04	0.00
11	6	-0.21	-0.10	0.01	-0.07	-0.04	0.00	-0.03	-0.01	0.00
12	1	-0.37	-0.13	0.00	-0.08	-0.03	0.00	0.10	0.02	0.00
13	6	0.08	0.04	0.01	0.01	0.01	0.00	-0.11	-0.04	0.00
14	1	-0.25	-0.10	0.00	-0.10	-0.04	0.00	-0.13	-0.06	0.00
15	6	0.06	0.02	-0.01	0.00	0.00	0.00	-0.13	-0.06	0.01
16	1	-0.32	-0.14	0.02	-0.10	-0.05	0.01	-0.02	-0.02	0.00
17	1	0.19	0.11	0.00	0.02	0.02	0.00	-0.22	-0.11	-0.01
18	1	0.15	0.07	-0.01	0.01	0.00	0.00	-0.23	-0.10	0.02

	25	26	27
	A	A	A
Frequencies --	623.6632	631.8905	730.0443
Red. masses --	5.5420	4.6555	1.2378
Frc consts --	1.2700	1.0952	0.3887
IR Inten --	11.6002	9.7505	2.1794

Atom	AN	X	Y	Z	X	Y	Z	X	Y	Z
1	13	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
2	13	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
3	13	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
4	13	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
5	3	-0.02	-0.01	-0.02	0.06	0.03	-0.02	0.00	0.00	-0.01
6	3	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
7	3	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
8	12	-0.05	-0.01	0.00	0.03	0.01	0.00	0.00	0.00	0.00

9	6	0.38	0.13	-0.01	-0.21	-0.08	-0.02	0.01	-0.01	0.00
10	6	-0.11	-0.03	0.00	0.27	0.11	0.00	0.09	0.04	-0.01
11	6	-0.34	-0.13	0.00	-0.02	-0.02	0.01	-0.06	-0.02	0.00
12	1	0.19	0.09	0.03	-0.15	-0.06	0.04	-0.27	-0.06	0.06
13	6	-0.10	-0.07	0.02	-0.33	-0.15	-0.01	0.02	0.02	0.01
14	1	-0.18	-0.08	0.00	0.52	0.20	0.01	-0.44	-0.20	-0.03
15	6	0.27	0.11	-0.01	0.20	0.11	0.01	-0.06	-0.04	0.01
16	1	-0.44	-0.16	0.00	-0.15	-0.04	0.00	0.51	0.24	-0.05
17	1	-0.07	-0.03	0.00	-0.44	-0.22	-0.01	-0.28	-0.15	0.01
18	1	0.48	0.23	-0.01	0.23	0.10	0.00	0.44	0.20	-0.02

	28	29	30
	A	A	A
Frequencies --	737.6036	768.1620	842.7624
Red. masses --	1.2512	1.1073	1.5345
Frc consts --	0.4011	0.3850	0.6421
IR Inten --	6.7902	361.2921	0.6236

Atom	AN	X	Y	Z	X	Y	Z	X	Y	Z
1	13	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
2	13	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
3	13	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
4	13	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
5	3	-0.01	-0.02	0.00	-0.01	-0.01	0.00	0.00	0.00	0.00
6	3	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
7	3	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
8	12	0.00	-0.01	0.00	-0.01	0.01	0.00	0.00	0.00	0.00
9	6	-0.06	0.00	0.00	0.05	0.01	0.00	-0.08	0.11	-0.02
10	6	0.00	-0.01	0.00	0.04	0.02	-0.01	0.04	0.01	0.07
11	6	-0.04	-0.03	0.00	0.05	0.03	0.01	0.07	-0.01	-0.10
12	1	0.57	0.15	0.05	-0.62	-0.15	-0.04	0.31	0.21	0.03
13	6	0.08	0.05	0.00	0.02	0.00	0.00	0.00	-0.03	0.02
14	1	-0.16	-0.10	-0.02	-0.32	-0.14	-0.02	-0.34	-0.32	0.03
15	6	0.07	0.03	0.01	0.03	0.01	0.00	-0.03	-0.07	0.03
16	1	0.06	0.03	-0.01	-0.41	-0.17	0.04	-0.49	-0.36	-0.01
17	1	-0.58	-0.30	-0.05	-0.28	-0.17	-0.01	0.03	0.07	-0.11
18	1	-0.35	-0.17	0.04	-0.34	-0.18	0.01	0.37	0.24	0.11

	31	32	33
	A	A	A
Frequencies --	849.8651	858.4010	865.7269
Red. masses --	2.5982	2.3683	1.4578
Frc consts --	1.1056	1.0282	0.6438
IR Inten --	0.3775	0.1330	0.2189

Atom	AN	X	Y	Z	X	Y	Z	X	Y	Z
1	13	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
2	13	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00

3	13	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
4	13	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
5	3	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	-0.01	-0.01
6	3	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
7	3	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
8	12	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
9	6	-0.04	0.07	0.05	0.04	-0.16	0.06	0.00	0.04	0.03
10	6	0.08	-0.03	0.17	0.06	-0.04	-0.11	-0.05	-0.06	0.09
11	6	-0.07	0.06	0.03	0.02	0.09	0.19	0.00	0.05	0.00
12	1	0.04	0.05	-0.23	0.43	-0.08	-0.04	-0.17	-0.02	-0.12
13	6	0.04	-0.20	-0.10	-0.01	0.02	-0.08	0.10	-0.05	-0.04
14	1	-0.46	-0.08	0.18	-0.35	0.01	-0.10	0.50	0.27	0.12
15	6	0.00	0.11	-0.15	-0.11	0.11	-0.06	-0.05	0.00	-0.07
16	1	0.38	-0.04	0.14	-0.48	-0.12	0.22	-0.10	-0.10	0.06
17	1	0.43	0.01	-0.09	0.03	-0.12	0.19	-0.48	-0.35	-0.09
18	1	-0.44	0.04	0.00	0.35	0.17	-0.23	0.34	0.27	-0.03

	34	35	36
	A	A	A
Frequencies --	1019.4013	1024.8319	1074.4520
Red. masses --	1.5013	1.4441	1.2563
Frc consts --	0.9192	0.8936	0.8545
IR Inten --	20.0540	9.6248	0.0519

Atom	AN	X	Y	Z	X	Y	Z	X	Y	Z
1	13	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
2	13	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
3	13	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
4	13	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
5	3	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
6	3	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
7	3	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
8	12	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
9	6	-0.04	0.10	-0.06	-0.02	0.05	0.07	-0.02	0.00	0.00
10	6	0.02	-0.05	-0.01	-0.01	-0.01	-0.10	-0.01	0.04	0.05
11	6	0.00	-0.03	0.10	0.02	-0.05	-0.06	-0.01	0.04	-0.05
12	1	-0.07	0.06	-0.32	-0.10	0.13	0.65	0.08	0.02	0.00
13	6	-0.03	0.07	0.07	0.02	-0.05	0.04	0.01	-0.03	0.07
14	1	0.24	-0.45	-0.08	0.09	-0.06	-0.12	-0.19	0.29	0.10
15	6	0.01	0.00	-0.08	-0.03	0.08	-0.05	0.02	-0.05	-0.06
16	1	0.23	-0.36	0.29	0.13	-0.27	0.05	-0.20	0.29	-0.20
17	1	-0.01	0.00	0.23	0.12	-0.27	0.48	0.11	-0.24	0.50
18	1	0.12	-0.29	-0.39	-0.12	0.22	0.11	0.17	-0.38	-0.42

	37	38	39
	A	A	A
Frequencies --	1076.1324	1136.2161	1285.2703

Red. masses --		1.2367			5.4194			1.2818		
Frc consts --		0.8438			4.1221			1.2475		
IR Inten --		1.5374			15.2962			0.0078		
Atom	AN	X	Y	Z	X	Y	Z	X	Y	Z
1	13	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
2	13	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
3	13	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
4	13	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
5	3	0.00	0.00	0.00	-0.01	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
6	3	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
7	3	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
8	12	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
9	6	0.00	0.01	0.07	0.11	-0.26	0.05	0.00	0.01	0.08
10	6	0.03	-0.08	0.02	0.03	-0.03	0.27	-0.02	0.06	0.01
11	6	-0.03	0.07	0.00	0.06	-0.10	-0.25	0.02	-0.06	0.03
12	1	-0.05	0.07	0.49	0.10	-0.31	-0.01	0.03	-0.06	-0.43
13	6	-0.01	0.01	-0.03	-0.11	0.24	0.14	-0.01	0.03	-0.06
14	1	0.23	-0.51	-0.06	0.02	-0.21	0.27	0.18	-0.41	-0.08
15	6	0.01	-0.01	-0.04	-0.08	0.19	-0.21	0.02	-0.04	-0.05
16	1	-0.18	0.40	-0.18	0.07	-0.32	-0.18	-0.17	0.37	-0.20
17	1	-0.01	0.15	-0.27	-0.16	0.30	0.06	0.08	-0.19	0.38
18	1	0.04	-0.20	-0.22	-0.16	0.26	-0.15	-0.12	0.28	0.31

			40			41			42	
			A			A			A	
Frequencies --		1377.7212			1379.8729			1460.2640		
Red. masses --		4.4219			4.4806			2.4056		
Frc consts --		4.9452			5.0264			3.0222		
IR Inten --		0.4760			1.4625			2.9599		
Atom	AN	X	Y	Z	X	Y	Z	X	Y	Z
1	13	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
2	13	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
3	13	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
4	13	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
5	3	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
6	3	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
7	3	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
8	12	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
9	6	-0.02	0.08	0.34	0.00	-0.12	0.11	-0.04	0.11	-0.01
10	6	0.12	-0.24	-0.12	-0.04	0.15	-0.13	0.07	-0.15	-0.07
11	6	-0.07	0.10	-0.21	-0.09	0.26	-0.03	0.05	-0.12	0.10
12	1	-0.01	-0.06	-0.59	0.19	-0.11	-0.12	-0.07	0.13	-0.03
13	6	-0.08	0.13	-0.08	0.03	-0.08	0.26	-0.02	0.04	0.16
14	1	-0.17	0.37	-0.02	0.06	-0.22	-0.20	-0.22	0.50	0.04
15	6	0.05	-0.06	0.10	0.10	-0.21	-0.21	0.00	-0.01	-0.16

16	1	0.17	-0.29	0.00	0.09	-0.31	0.28	-0.20	0.44	-0.19
17	1	0.02	0.06	0.14	-0.08	0.22	-0.33	-0.11	0.26	-0.24
18	1	0.05	-0.20	-0.02	-0.13	0.26	0.31	-0.14	0.31	0.16

	43	44	45
	A	A	A
Frequencies --	1467.9188	3165.7862	3173.2589
Red. masses --	2.6471	1.0886	1.0894
Frc consts --	3.3607	6.4283	6.4631
IR Inten --	1.7064	3.0873	1.0273

Atom	AN	X	Y	Z	X	Y	Z	X	Y	Z
1	13	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
2	13	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
3	13	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
4	13	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
5	3	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
6	3	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
7	3	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
8	12	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
9	6	-0.01	0.02	0.14	0.00	0.00	0.00	0.02	-0.08	0.01
10	6	-0.04	0.11	-0.10	0.00	0.00	-0.01	0.00	0.00	-0.01
11	6	0.05	-0.13	-0.06	0.00	0.00	0.00	0.00	0.01	0.02
12	1	0.03	-0.07	-0.48	-0.01	0.03	-0.01	-0.21	0.92	-0.14
13	6	0.08	-0.15	0.12	-0.04	0.06	0.04	0.00	0.00	0.00
14	1	0.07	-0.16	-0.18	0.00	-0.02	0.15	0.01	-0.03	0.16
15	6	-0.09	0.17	0.05	0.01	-0.02	0.02	0.00	0.01	-0.01
16	1	-0.04	0.11	-0.22	-0.01	0.02	0.05	0.03	-0.10	-0.21
17	1	-0.07	0.11	-0.48	0.40	-0.69	-0.42	0.00	0.00	0.00
18	1	0.12	-0.23	-0.42	-0.13	0.23	-0.26	0.03	-0.06	0.07

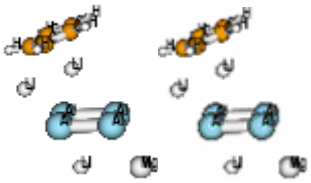
	46	47	48
	A	A	A
Frequencies --	3188.5889	3211.5171	3222.4917
Red. masses --	1.0937	1.0972	1.0991
Frc consts --	6.5513	6.6673	6.7244
IR Inten --	5.6386	3.7131	2.9871

Atom	AN	X	Y	Z	X	Y	Z	X	Y	Z
1	13	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
2	13	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
3	13	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
4	13	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
5	3	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
6	3	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
7	3	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
8	12	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
9	6	0.00	0.01	0.00	0.00	0.01	-0.01	-0.01	0.02	0.00

10	6	0.00	0.00	-0.01	0.00	0.00	0.02	0.00	0.01	-0.08
11	6	0.00	0.01	0.03	-0.01	0.04	0.07	0.00	0.01	0.02
12	1	0.04	-0.17	0.03	0.03	-0.13	0.03	0.04	-0.19	0.03
13	6	-0.01	0.02	0.02	0.00	0.00	0.00	0.01	-0.02	-0.01
14	1	0.00	-0.01	0.07	-0.01	0.05	-0.27	0.03	-0.15	0.92
15	6	-0.03	0.05	-0.05	0.01	-0.02	0.02	0.00	-0.01	0.01
16	1	0.04	-0.13	-0.29	0.11	-0.38	-0.80	0.02	-0.09	-0.18
17	1	0.16	-0.28	-0.17	-0.01	0.02	0.02	-0.08	0.14	0.08
18	1	0.29	-0.52	0.60	-0.11	0.20	-0.23	-0.04	0.07	-0.08

$CpMgAl_4Li_3 \rightarrow CpLi + Al_4Li_2Mg$ **-23.07427733**

$CpMgAl_4Li_3 \rightarrow Cp^- + Al_4Li_3Mg^+$ **-140.642261**



Charge = 0 Multiplicity = 1

Al,0,-0.5338152209,-0.2712588998,1.3968818065
Al,0,1.8619050885,0.6458735576,1.1133306928
Al,0,1.4875015252,0.7049514076,-1.4754286716
Al,0,-0.8996539791,-0.2088668021,-1.1263130709
Li,0,-1.7691987506,-2.4489515378,0.238245277
Li,0,0.7573148056,-2.5411401167,-0.1490272312
Li,0,-0.7580646889,2.2769841017,0.1971007256
Mg,0,1.9845662129,3.3899151396,-0.163050942
C,0,1.5703507653,-4.4530010164,0.4470607984
C,0,0.2910816516,-4.4252492497,1.0371560562
C,0,1.4094650027,-4.4281913441,-0.9663873274
H,0,2.5111718516,-4.5004369096,0.9804199358
C,0,-0.6730179712,-4.3739193274,-0.012584533
H,0,0.0796931877,-4.4730154639,2.0975606032
C,0,0.0307936969,-4.3824965455,-1.2527595718
H,0,2.2066804466,-4.4535902004,-1.6983584242
H,0,-1.7362638456,-4.5927736924,0.1017112602
H,0,-0.4149246431,-4.3890474799,-2.238852032

State=1-A\HF=-1386.1126512

	1	2	3
	A	A	A
Frequencies --	-11.7754	17.5784	26.9218
Red. masses --	4.2536	11.8963	5.8656
Frc consts --	0.0003	0.0022	0.0025

IR Inten --		0.0834			0.2543			0.6793		
Atom	AN	X	Y	Z	X	Y	Z	X	Y	Z
1	13	0.00	-0.08	0.06	0.05	0.20	0.01	0.04	-0.02	0.00
2	13	0.02	-0.08	-0.04	-0.21	0.05	-0.01	0.05	-0.02	0.10
3	13	0.01	0.07	-0.03	-0.20	0.08	-0.01	-0.05	0.02	0.10
4	13	0.00	0.06	0.06	0.05	0.23	0.01	-0.04	0.02	0.00
5	3	0.00	-0.01	0.13	-0.03	0.01	0.02	0.00	-0.01	0.23
6	3	-0.01	-0.01	-0.11	0.16	0.05	-0.01	0.00	0.00	-0.39
7	3	-0.01	0.01	0.02	0.11	-0.10	0.01	0.00	0.00	-0.47
8	12	0.01	0.02	-0.01	-0.21	-0.28	0.00	0.00	0.00	0.07
9	6	0.00	0.13	0.14	0.26	-0.09	0.03	0.13	-0.02	-0.08
10	6	0.01	0.20	-0.08	0.15	-0.09	-0.01	0.20	-0.02	-0.02
11	6	-0.04	-0.11	0.15	0.26	-0.13	0.03	-0.12	0.01	-0.08
12	1	0.01	0.24	0.28	0.34	-0.06	0.06	0.25	-0.03	-0.12
13	6	0.00	0.00	-0.22	0.08	-0.13	-0.04	-0.01	0.00	0.01
14	1	0.02	0.37	-0.14	0.12	-0.06	-0.02	0.36	-0.05	0.00
15	6	-0.03	-0.19	-0.07	0.15	-0.16	-0.01	-0.19	0.02	-0.02
16	1	-0.06	-0.21	0.30	0.34	-0.15	0.06	-0.22	0.03	-0.11
17	1	0.01	0.01	-0.40	0.00	-0.17	-0.08	0.00	0.00	0.08
18	1	-0.04	-0.35	-0.12	0.13	-0.20	-0.02	-0.36	0.05	0.00

		4			5			6		
		A			A			A		
Frequencies --		38.5365			67.4572			87.7783		
Red. masses --		10.7267			7.9947			13.6982		
Frc consts --		0.0094			0.0214			0.0622		
IR Inten --		0.0067			0.0565			0.4749		
Atom	AN	X	Y	Z	X	Y	Z	X	Y	Z
1	13	0.09	0.05	0.10	-0.14	-0.04	-0.02	0.07	0.04	-0.04
2	13	0.17	0.09	0.18	0.01	0.03	0.13	0.33	0.14	-0.13
3	13	-0.17	-0.09	0.18	0.00	-0.03	0.13	-0.32	-0.14	-0.13
4	13	-0.09	-0.05	0.10	0.14	0.04	-0.02	-0.06	-0.03	-0.04
5	3	0.00	-0.01	0.21	0.00	0.01	-0.34	0.00	-0.02	0.26
6	3	0.00	0.00	0.14	0.00	0.00	-0.26	0.00	-0.01	-0.17
7	3	0.00	0.00	-0.08	0.00	0.00	0.49	0.00	0.00	0.67
8	12	0.00	0.00	-0.34	0.00	0.00	-0.25	0.00	-0.01	0.24
9	6	-0.11	0.01	-0.11	0.12	0.01	0.00	0.05	0.00	-0.03
10	6	-0.17	0.01	-0.15	0.18	0.01	0.01	0.08	0.01	-0.03
11	6	0.10	-0.01	-0.11	-0.10	-0.01	0.00	-0.06	0.00	-0.03
12	1	-0.22	0.01	-0.09	0.22	0.02	0.00	0.10	0.01	-0.04
13	6	0.01	0.00	-0.17	-0.01	0.00	0.02	0.00	0.00	-0.03
14	1	-0.34	0.02	-0.16	0.35	0.03	0.02	0.14	0.01	-0.02
15	6	0.18	-0.01	-0.15	-0.18	-0.01	0.01	-0.09	-0.01	-0.03
16	1	0.20	-0.01	-0.09	-0.20	-0.02	0.00	-0.11	-0.01	-0.03
17	1	0.01	0.00	-0.24	-0.01	0.00	0.07	0.00	0.00	-0.02

18	1	0.35	-0.02	-0.16	-0.35	-0.03	0.02	-0.15	-0.01	-0.02

	7	8	9
	A	A	A
Frequencies --	90.6005	109.7621	110.7134
Red. masses --	11.1126	14.4165	14.4721
Frc consts --	0.0537	0.1023	0.1045
IR Inten --	4.3152	0.0718	1.6770

Atom	AN	X	Y	Z	X	Y	Z	X	Y	Z
1	13	0.04	0.13	0.00	0.30	0.07	-0.08	-0.01	0.16	0.34
2	13	0.12	0.17	-0.01	0.03	-0.11	0.05	0.01	0.15	-0.17
3	13	0.13	0.18	0.01	0.05	-0.07	-0.01	-0.01	-0.18	-0.18
4	13	0.05	0.13	0.00	0.28	0.10	0.00	0.08	-0.14	0.34
5	3	-0.05	-0.13	-0.01	0.12	-0.23	0.07	0.02	-0.01	-0.56
6	3	-0.16	-0.16	0.00	-0.09	-0.15	0.01	-0.01	-0.02	-0.12
7	3	0.21	-0.18	-0.01	0.09	0.35	0.04	0.01	0.04	-0.31
8	12	0.18	-0.30	0.00	-0.42	0.19	0.00	-0.04	0.03	0.00
9	6	-0.27	-0.10	0.00	-0.21	-0.07	0.00	0.04	0.00	-0.03
10	6	-0.18	-0.09	0.00	-0.11	-0.06	0.00	0.10	0.01	-0.04
11	6	-0.27	-0.10	0.00	-0.20	-0.07	0.00	-0.09	-0.02	-0.03
12	1	-0.33	-0.11	0.00	-0.30	-0.08	0.00	0.09	0.01	-0.03
13	6	-0.12	-0.08	0.00	-0.03	-0.05	0.01	0.00	-0.01	-0.04
14	1	-0.16	-0.09	0.00	-0.10	-0.06	0.01	0.20	0.03	-0.04
15	6	-0.19	-0.09	0.00	-0.09	-0.06	0.00	-0.12	-0.02	-0.04
16	1	-0.34	-0.11	0.00	-0.28	-0.08	0.00	-0.15	-0.03	-0.03
17	1	-0.07	-0.06	0.00	0.06	-0.02	0.00	0.00	0.00	-0.01
18	1	-0.17	-0.09	0.00	-0.06	-0.05	0.00	-0.22	-0.04	-0.03

	10	11	12
	A	A	A
Frequencies --	133.4794	141.2363	159.9032
Red. masses --	15.7320	12.1603	4.8609
Frc consts --	0.1651	0.1429	0.0732
IR Inten --	3.3478	2.4841	1.8886

Atom	AN	X	Y	Z	X	Y	Z	X	Y	Z
1	13	0.12	0.12	0.02	0.11	0.22	0.02	-0.07	-0.03	0.02
2	13	-0.31	-0.12	-0.01	-0.25	0.07	-0.03	0.00	0.07	-0.02
3	13	-0.29	-0.12	0.02	0.26	-0.06	-0.03	0.00	0.07	0.02
4	13	0.11	0.10	-0.04	-0.13	-0.23	0.02	-0.07	-0.03	-0.02
5	3	0.15	0.01	0.03	-0.02	-0.03	0.62	0.21	-0.02	-0.01
6	3	-0.06	-0.13	-0.01	0.01	-0.01	-0.16	0.05	-0.25	0.00
7	3	0.15	-0.18	0.03	-0.01	0.00	0.39	-0.04	-0.01	0.00
8	12	0.45	0.25	-0.01	-0.01	-0.01	-0.11	-0.09	-0.01	0.00
9	6	-0.17	-0.07	0.00	0.08	0.01	-0.04	-0.14	-0.03	0.00
10	6	0.02	-0.05	0.00	0.11	0.02	-0.04	0.16	0.00	0.00
11	6	-0.18	-0.07	0.00	-0.06	0.00	-0.04	-0.15	-0.03	0.00

12	1	-0.29	-0.08	0.00	0.15	0.02	-0.04	-0.33	-0.06	0.00	
13	6	0.15	-0.03	0.00	-0.01	0.00	-0.04	0.35	0.02	0.00	
14	1	0.08	-0.04	0.00	0.18	0.02	-0.03	0.25	0.02	0.00	
15	6	0.00	-0.05	0.00	-0.10	-0.01	-0.04	0.15	0.01	0.00	
16	1	-0.31	-0.09	0.00	-0.12	-0.01	-0.03	-0.35	-0.05	0.00	
17	1	0.26	0.01	0.00	0.00	0.01	-0.04	0.53	0.09	0.00	
18	1	0.05	-0.04	0.00	-0.18	-0.01	-0.03	0.23	0.03	0.00	

	13	14	15
	A	A	A
Frequencies --	197.1481	205.5741	214.5662
Red. masses --	14.7872	7.9103	7.1182
Frc consts --	0.3386	0.1970	0.1931
IR Inten --	1.0029	16.7278	16.2535

Atom	AN	X	Y	Z	X	Y	Z	X	Y	Z
1	13	0.32	0.14	0.00	0.00	0.01	0.01	0.01	-0.03	-0.02
2	13	0.05	-0.27	0.06	-0.02	-0.03	-0.01	0.03	0.01	0.00
3	13	-0.04	0.27	0.06	-0.02	-0.05	0.00	0.03	0.00	-0.01
4	13	-0.32	-0.14	0.00	0.02	0.02	-0.01	0.01	-0.03	0.02
5	3	0.02	0.06	-0.67	0.05	0.15	0.03	0.11	0.66	0.04
6	3	-0.02	0.03	0.06	-0.09	0.11	0.00	-0.33	0.49	-0.01
7	3	-0.03	0.06	0.25	-0.38	0.84	-0.01	0.14	-0.16	0.00
8	12	0.01	-0.01	0.03	0.13	-0.19	0.00	-0.06	0.04	0.00
9	6	0.03	0.00	-0.03	-0.04	-0.03	0.00	-0.06	-0.10	0.00
10	6	0.07	0.00	-0.03	0.02	-0.03	0.00	0.00	-0.10	0.00
11	6	-0.04	-0.01	-0.03	-0.04	-0.03	0.00	-0.06	-0.11	0.00
12	1	0.07	0.00	-0.03	-0.06	-0.04	0.00	-0.05	-0.10	0.00
13	6	0.00	-0.01	-0.03	0.07	-0.02	0.00	0.11	-0.08	-0.01
14	1	0.14	0.02	-0.03	0.04	-0.03	0.00	0.05	-0.10	0.00
15	6	-0.07	-0.02	-0.03	0.02	-0.03	0.00	-0.01	-0.11	0.00
16	1	-0.06	-0.02	-0.03	-0.06	-0.04	0.00	-0.06	-0.11	0.01
17	1	-0.01	-0.01	0.00	0.09	-0.01	0.00	0.10	-0.08	-0.01
18	1	-0.14	-0.03	-0.03	0.04	-0.03	0.00	0.03	-0.11	-0.01

	16	17	18
	A	A	A
Frequencies --	266.7644	277.5316	279.0254
Red. masses --	21.7323	21.0347	10.1567
Frc consts --	0.9112	0.9546	0.4659
IR Inten --	4.2793	5.5543	13.6011

Atom	AN	X	Y	Z	X	Y	Z	X	Y	Z
1	13	-0.07	0.10	-0.27	-0.33	0.38	-0.01	0.01	-0.17	-0.13
2	13	0.05	-0.09	0.52	0.16	-0.31	-0.01	-0.12	0.13	0.05
3	13	0.05	-0.10	-0.52	-0.16	0.30	-0.03	-0.12	0.13	-0.05
4	13	-0.09	0.11	0.27	0.32	-0.36	-0.01	0.01	-0.18	0.12
5	3	-0.26	0.06	-0.01	-0.01	0.01	0.27	0.02	-0.03	0.00

6	3	0.07	-0.10	0.01	0.00	0.00	-0.24	0.02	-0.06	0.00
7	3	-0.13	-0.11	0.00	0.00	0.00	-0.09	0.80	0.43	0.00
8	12	0.06	-0.01	0.00	0.00	0.00	-0.02	0.02	-0.01	0.00
9	6	-0.05	0.00	0.00	-0.06	-0.01	0.04	0.03	0.01	0.00
10	6	0.08	0.01	0.00	-0.10	-0.02	0.04	-0.02	0.01	0.00
11	6	-0.06	0.00	0.00	0.05	0.01	0.04	0.03	0.01	0.00
12	1	-0.13	-0.01	0.00	-0.12	-0.02	0.04	0.05	0.02	0.00
13	6	0.14	0.01	0.00	0.01	0.00	0.04	-0.05	0.00	0.00
14	1	0.12	0.02	0.00	-0.18	-0.03	0.04	-0.03	0.01	0.00
15	6	0.07	0.01	0.00	0.10	0.02	0.04	-0.02	0.01	0.00
16	1	-0.15	-0.01	0.00	0.09	0.01	0.04	0.05	0.02	0.00
17	1	0.15	0.03	0.00	0.02	0.00	0.02	-0.06	0.00	0.00
18	1	0.10	0.02	0.00	0.20	0.03	0.03	-0.03	0.01	0.00

	19	20	21
	A	A	A
Frequencies --	311.1054	312.8409	318.4856
Red. masses --	11.7514	6.2613	17.6717
Frc consts --	0.6701	0.3610	1.0561
IR Inten --	2.9864	0.3182	1.8640

Atom	AN	X	Y	Z	X	Y	Z	X	Y	Z
1	13	0.14	-0.15	0.13	-0.03	-0.01	0.02	-0.11	0.07	0.44
2	13	-0.10	0.19	0.19	0.00	0.01	0.04	0.05	-0.11	0.20
3	13	-0.08	0.17	-0.19	-0.04	0.07	-0.04	0.06	-0.11	-0.20
4	13	0.10	-0.13	-0.13	0.08	-0.05	-0.04	-0.12	0.08	-0.44
5	3	0.46	-0.18	-0.04	0.09	-0.04	0.11	0.00	0.07	0.00
6	3	-0.15	0.14	-0.29	-0.04	0.03	0.72	0.04	-0.04	0.00
7	3	-0.45	-0.16	0.02	-0.09	-0.03	-0.04	0.63	0.25	0.00
8	12	0.01	-0.01	0.00	0.00	0.00	0.00	-0.04	0.00	0.00
9	6	0.01	-0.01	0.03	0.11	0.01	-0.08	0.00	0.00	0.00
10	6	-0.13	-0.02	0.03	0.18	0.03	-0.07	-0.01	0.00	0.00
11	6	0.09	0.00	0.03	-0.08	-0.01	-0.07	0.00	0.00	0.00
12	1	0.05	0.00	0.03	0.21	0.02	-0.08	-0.01	0.00	0.00
13	6	-0.09	-0.01	0.04	-0.03	0.00	-0.09	-0.01	0.00	0.00
14	1	-0.21	-0.04	0.03	0.30	0.05	-0.07	-0.01	0.00	0.00
15	6	0.03	0.00	0.03	-0.20	-0.03	-0.07	-0.01	0.00	0.00
16	1	0.20	0.01	0.03	-0.15	-0.02	-0.08	-0.01	0.00	0.00
17	1	-0.04	0.00	0.02	-0.01	0.00	-0.06	-0.01	0.00	0.00
18	1	0.06	0.00	0.03	-0.34	-0.05	-0.07	-0.01	0.00	0.00

	22	23	24
	A	A	A
Frequencies --	347.4678	381.9235	501.4835
Red. masses --	7.1804	7.4739	5.7163
Frc consts --	0.5108	0.6423	0.8470
IR Inten --	28.7432	138.8156	101.8364

Atom	AN	X	Y	Z	X	Y	Z	X	Y	Z
1	13	0.08	-0.06	0.04	-0.09	0.07	-0.07	-0.02	-0.01	-0.01
2	13	-0.02	0.05	0.01	0.03	-0.05	-0.01	0.00	0.00	0.00
3	13	-0.02	0.05	-0.01	0.02	-0.05	0.01	0.00	0.00	0.00
4	13	0.08	-0.06	-0.04	-0.08	0.07	0.07	-0.02	-0.01	0.01
5	3	-0.28	0.62	0.01	0.79	0.22	0.01	0.12	-0.10	0.00
6	3	0.42	-0.47	0.00	0.08	-0.31	0.01	0.69	0.45	0.00
7	3	-0.15	-0.03	0.00	0.04	0.02	0.00	0.00	0.00	0.00
8	12	-0.01	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
9	6	-0.02	0.00	0.00	0.08	0.00	0.00	-0.09	-0.03	0.00
10	6	-0.05	0.00	-0.01	-0.11	-0.01	-0.01	-0.08	-0.04	0.00
11	6	-0.02	0.00	0.00	0.08	0.00	0.00	-0.09	-0.03	0.01
12	1	-0.08	0.00	0.01	0.14	0.01	0.01	-0.26	-0.06	-0.01
13	6	-0.07	-0.01	0.00	-0.18	-0.01	0.00	0.05	-0.01	0.00
14	1	-0.09	-0.01	-0.01	-0.17	-0.02	-0.01	-0.20	-0.07	0.00
15	6	-0.05	0.00	0.00	-0.11	-0.01	0.01	-0.09	-0.04	0.00
16	1	-0.08	-0.01	-0.01	0.13	0.01	-0.01	-0.26	-0.06	0.01
17	1	-0.22	-0.05	0.00	-0.11	0.01	0.00	-0.08	-0.05	0.00
18	1	-0.10	-0.02	0.00	-0.17	-0.03	0.01	-0.22	-0.07	0.00

	25	26	27
	A	A	A
Frequencies --	623.8935	632.8062	748.6868
Red. masses --	5.3878	3.9566	1.2574
Frc consts --	1.2356	0.9335	0.4153
IR Inten --	25.4782	0.0838	4.6208

Atom	AN	X	Y	Z	X	Y	Z	X	Y	Z
1	13	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
2	13	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
3	13	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
4	13	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
5	3	0.06	0.03	0.00	0.00	0.00	-0.01	0.01	0.00	0.00
6	3	0.07	0.09	-0.01	0.00	0.01	0.03	0.00	0.00	0.01
7	3	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
8	12	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
9	6	-0.14	-0.04	-0.02	0.31	0.02	0.00	-0.08	0.00	0.00
10	6	0.30	0.05	0.01	-0.17	-0.02	-0.01	-0.07	-0.01	0.00
11	6	-0.10	-0.03	0.02	-0.32	-0.02	0.01	0.02	0.00	-0.01
12	1	-0.28	-0.05	-0.02	0.50	0.04	0.00	0.45	0.06	0.00
13	6	-0.43	-0.10	0.00	-0.02	0.00	0.01	0.02	0.02	0.00
14	1	0.48	0.07	0.01	-0.28	-0.05	-0.01	0.56	0.04	0.03
15	6	0.27	0.04	-0.01	0.20	0.02	-0.01	0.10	0.00	0.01
16	1	-0.20	-0.04	0.02	-0.53	-0.05	0.00	-0.18	-0.02	-0.01
17	1	-0.12	0.01	0.01	-0.01	0.00	-0.07	-0.34	-0.11	-0.08
18	1	0.47	0.07	-0.02	0.32	0.05	-0.01	-0.54	-0.07	0.04

		28			29			30		
		A			A			A		
Frequencies --		750.1411			773.7597			848.4328		
Red. masses --		1.2308			1.1465			1.6029		
Frc consts --		0.4080			0.4044			0.6798		
IR Inten --		13.5504			368.4206			7.3875		
Atom	AN	X	Y	Z	X	Y	Z	X	Y	Z
1	13	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
2	13	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
3	13	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
4	13	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
5	3	0.02	-0.01	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	-0.01	0.00
6	3	0.00	-0.01	0.00	-0.05	-0.01	0.00	0.00	0.00	0.00
7	3	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
8	12	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
9	6	-0.04	0.00	0.01	0.05	0.00	0.00	0.05	-0.04	0.00
10	6	0.07	-0.01	-0.01	0.05	0.00	-0.02	-0.06	-0.03	-0.09
11	6	-0.08	0.00	0.00	0.05	0.01	0.00	0.05	-0.04	0.00
12	1	0.15	0.02	0.02	-0.50	-0.05	0.01	-0.32	0.02	0.13
13	6	0.05	0.05	0.00	0.01	0.02	0.00	0.00	0.14	0.00
14	1	-0.25	-0.06	-0.02	-0.39	-0.06	-0.03	0.57	-0.08	-0.03
15	6	0.00	-0.01	0.01	0.05	0.01	0.01	-0.06	-0.03	0.09
16	1	0.43	0.06	-0.02	-0.52	-0.05	0.00	-0.29	0.02	-0.13
17	1	-0.77	-0.25	0.06	-0.35	-0.12	0.01	-0.24	0.05	0.00
18	1	0.22	-0.02	-0.01	-0.40	-0.06	0.03	0.57	-0.08	0.03

		31			32			33		
		A			A			A		
Frequencies --		858.0392			873.4361			885.6726		
Red. masses --		4.2095			2.2178			1.2262		
Frc consts --		1.8260			0.9968			0.5667		
IR Inten --		0.0732			0.5272			0.0014		
Atom	AN	X	Y	Z	X	Y	Z	X	Y	Z
1	13	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
2	13	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
3	13	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
4	13	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
5	3	0.00	0.00	0.00	0.02	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
6	3	0.00	0.00	0.00	0.00	-0.01	0.00	0.00	0.00	0.00
7	3	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
8	12	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
9	6	-0.03	0.21	-0.21	0.03	0.11	0.02	-0.08	-0.02	0.01
10	6	0.00	0.15	0.15	-0.05	0.00	0.17	0.05	-0.01	0.00
11	6	0.02	-0.23	-0.20	0.03	0.09	-0.03	0.08	0.02	0.01
12	1	0.04	0.32	-0.10	-0.28	-0.09	-0.19	0.60	0.05	0.00

13	6	0.00	0.01	0.11	0.05	-0.15	0.01	0.00	0.00	-0.01
14	1	-0.14	-0.25	0.27	0.41	0.15	0.15	-0.33	-0.03	-0.02
15	6	0.00	-0.14	0.17	-0.05	-0.02	-0.16	-0.05	0.01	0.00
16	1	-0.03	-0.31	-0.10	-0.24	-0.09	0.19	-0.61	-0.05	0.01
17	1	-0.01	-0.01	-0.43	-0.39	-0.32	0.01	-0.01	0.00	0.01
18	1	0.12	0.25	0.27	0.40	0.15	-0.15	0.36	0.04	-0.03

	34	35	36
	A	A	A
Frequencies --	1015.3094	1022.4432	1073.9358
Red. masses --	1.3957	1.4866	1.2525
Frc consts --	0.8477	0.9156	0.8511
IR Inten --	7.3099	20.5406	3.8025

Atom	AN	X	Y	Z	X	Y	Z	X	Y	Z
1	13	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
2	13	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
3	13	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
4	13	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
5	3	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
6	3	0.00	0.00	-0.01	0.00	0.01	0.00	0.00	0.00	0.00
7	3	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
8	12	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
9	6	0.01	-0.07	0.01	0.01	-0.04	0.09	0.00	-0.02	-0.03
10	6	0.01	0.00	0.09	-0.01	0.05	-0.05	-0.02	0.08	0.03
11	6	-0.01	0.08	0.02	0.00	-0.04	-0.08	0.00	0.02	-0.04
12	1	-0.01	-0.29	-0.26	-0.03	0.13	0.33	0.04	-0.21	-0.28
13	6	0.00	0.01	-0.09	0.02	-0.12	0.00	0.00	0.00	0.05
14	1	-0.03	-0.02	0.10	-0.01	0.52	-0.21	-0.05	0.49	-0.11
15	6	-0.01	-0.01	0.08	-0.01	0.05	0.06	0.02	-0.09	0.03
16	1	0.01	0.25	-0.22	-0.03	0.16	-0.38	-0.05	0.22	-0.33
17	1	-0.01	-0.02	-0.83	-0.07	-0.16	-0.06	0.01	0.01	0.37
18	1	0.03	-0.06	0.07	-0.01	0.53	0.20	0.05	-0.53	-0.10

	37	38	39
	A	A	A
Frequencies --	1077.1009	1140.0201	1283.2999
Red. masses --	1.2658	5.1133	1.2911
Frc consts --	0.8653	3.9154	1.2527
IR Inten --	0.0985	8.5204	0.0074

Atom	AN	X	Y	Z	X	Y	Z	X	Y	Z
1	13	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
2	13	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
3	13	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
4	13	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
5	3	0.00	0.00	0.00	0.01	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
6	3	0.00	0.00	0.00	-0.01	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00

7	3	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
8	12	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
9	6	-0.01	0.04	0.08	-0.03	0.22	-0.17	0.00	-0.04	-0.05
10	6	0.02	-0.04	0.05	0.00	-0.09	-0.24	0.01	-0.06	0.01
11	6	-0.01	0.03	-0.07	-0.03	0.23	0.16	0.00	0.04	-0.06
12	1	-0.03	0.35	0.49	-0.01	0.36	-0.05	-0.04	0.26	0.34
13	6	-0.01	0.00	0.00	0.04	-0.29	0.01	0.00	0.00	0.10
14	1	-0.01	-0.36	0.17	0.09	-0.28	-0.20	-0.05	0.43	-0.16
15	6	0.01	-0.03	-0.05	0.00	-0.07	0.24	-0.01	0.06	0.01
16	1	-0.03	0.31	-0.47	-0.01	0.37	0.03	0.04	-0.24	0.36
17	1	0.08	0.03	-0.02	0.04	-0.32	0.00	0.00	-0.01	-0.41
18	1	-0.01	-0.33	-0.14	0.09	-0.27	0.22	0.06	-0.44	-0.14

	40	41	42
	A	A	A
Frequencies --	1377.5515	1380.9060	1461.8656
Red. masses --	4.4418	4.7284	2.4018
Frc consts --	4.9662	5.3124	3.0242
IR Inten --	2.8048	0.0549	4.4767

Atom	AN	X	Y	Z	X	Y	Z	X	Y	Z
1	13	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
2	13	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
3	13	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
4	13	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
5	3	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
6	3	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.01	0.00
7	3	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
8	12	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
9	6	-0.02	0.16	0.26	0.00	-0.14	0.02	0.00	-0.02	0.15
10	6	0.05	-0.21	-0.08	-0.01	0.22	-0.19	-0.02	0.15	-0.09
11	6	-0.02	0.16	-0.26	0.00	0.12	0.04	0.00	-0.02	-0.15
12	1	0.04	-0.30	-0.35	0.02	-0.13	0.04	0.04	-0.31	-0.19
13	6	-0.06	0.11	0.02	0.00	0.00	0.37	0.02	-0.12	0.00
14	1	-0.07	0.20	-0.24	0.04	-0.40	0.01	0.07	-0.52	0.14
15	6	0.05	-0.23	0.06	0.00	-0.20	-0.19	-0.02	0.16	0.09
16	1	0.04	-0.26	0.35	-0.02	0.16	-0.01	0.04	-0.30	0.21
17	1	0.16	0.19	-0.04	-0.01	-0.03	-0.57	0.00	-0.15	0.01
18	1	-0.07	0.26	0.22	-0.04	0.36	-0.04	0.07	-0.52	-0.11

	43	44	45
	A	A	A
Frequencies --	1470.1231	3101.6373	3196.6281
Red. masses --	2.7504	1.0899	1.0876
Frc consts --	3.5023	6.1775	6.5477
IR Inten --	0.4716	9.2186	0.4186

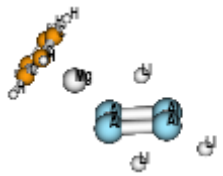
Atom	AN	X	Y	Z	X	Y	Z	X	Y	Z

1	13	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
2	13	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
3	13	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
4	13	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
5	3	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
6	3	0.00	0.00	0.01	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
7	3	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
8	12	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
9	6	-0.02	0.19	0.08	0.00	0.00	0.00	0.00	-0.04	0.03
10	6	0.02	-0.13	-0.08	0.00	0.00	0.00	0.00	-0.01	-0.03
11	6	0.02	-0.19	0.09	0.00	0.00	0.00	0.00	0.04	0.03
12	1	0.01	-0.21	-0.47	0.00	0.00	0.00	-0.05	0.49	-0.37
13	6	0.00	0.00	0.14	0.03	-0.08	0.00	0.00	0.00	0.00
14	1	-0.02	0.14	-0.21	0.01	-0.03	-0.08	-0.02	0.11	0.33
15	6	-0.02	0.13	-0.09	0.00	0.00	0.00	0.00	0.01	-0.03
16	1	-0.01	0.18	-0.48	0.00	0.00	0.00	0.05	-0.52	-0.36
17	1	0.00	-0.02	-0.43	-0.35	0.93	-0.03	0.00	0.00	0.00
18	1	0.02	-0.16	-0.20	0.01	-0.03	0.07	0.02	-0.08	0.30

		46			47			48		
		A			A			A		
Frequencies --		3206.1318			3215.4312			3224.3051		
Red. masses --		1.0920			1.0962			1.1035		
Frc consts --		6.6136			6.6775			6.7589		
IR Inten --		5.1037			7.6171			4.1890		
Atom	AN	X	Y	Z	X	Y	Z	X	Y	Z
1	13	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
2	13	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
3	13	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
4	13	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
5	3	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
6	3	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
7	3	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
8	12	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
9	6	0.00	-0.03	0.02	0.00	0.03	-0.02	0.00	0.04	-0.03
10	6	0.00	-0.01	-0.05	0.00	-0.02	-0.05	0.00	-0.01	-0.04
11	6	0.00	-0.03	-0.03	0.00	-0.02	-0.01	0.00	0.04	0.03
12	1	-0.04	0.33	-0.26	0.03	-0.31	0.23	0.05	-0.42	0.32
13	6	0.00	-0.01	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	-0.01	0.00
14	1	-0.04	0.18	0.55	-0.04	0.19	0.56	-0.03	0.14	0.40
15	6	0.00	-0.01	0.04	0.00	0.02	-0.05	0.00	-0.01	0.04
16	1	-0.04	0.40	0.28	-0.02	0.22	0.15	0.04	-0.44	-0.30
17	1	-0.03	0.08	0.00	0.00	0.00	-0.01	-0.02	0.07	0.00
18	1	-0.04	0.13	-0.46	0.05	-0.18	0.62	-0.04	0.14	-0.47

$CpMgAl_4Li_3 \rightarrow CpLi + Al_4Li_2Mg$ **-18.3512643**

$CpMgAl_4Li_3 \rightarrow Cp^- + Al_4Li_3Mg^+$ **-138.6725714**



Charge = 0 Multiplicity = 1

Al,0,-3.1200211116,1.0597840617,1.2629327501
Al,0,-1.07146842,-0.673476538,1.3377906017
Al,0,-1.1102049867,-0.8402410129,-1.2140741324
Al,0,-3.147598806,0.9036057587,-1.2831673994
Li,0,-5.4443847399,0.9625004044,0.0110708158
Li,0,-3.4147320399,-1.5316872346,0.149656019
Li,0,-0.8957820539,1.9130276978,-0.08294722
Mg,0,1.4195102345,-0.1761900968,-0.0038115522
C,0,3.468202673,-0.0896575327,-1.2447930719
C,0,3.5261978577,0.9606046685,-0.2899828483
C,0,3.4324528242,-1.3224232313,-0.5399471766
H,0,3.4733990146,0.0265754122,-2.3204394016
C,0,3.5273929619,0.3771228375,1.0046465126
H,0,3.5915136993,2.0179680496,-0.5126369562
C,0,3.4684636962,-1.0338043027,0.851429533
H,0,3.4091997179,-2.3085801979,-0.9840675911
H,0,3.5851939446,0.9112761011,1.9439995014
H,0,3.475820449,-1.7612749457,1.6521628782

State=1-A\HF=-1386.1081797

		1			2			3		
		A			A			A		
Frequencies --		-10.2282			34.4966			37.8343		
Red. masses --		4.4221			8.1093			7.7470		
Frc consts --		0.0003			0.0057			0.0065		
IR Inten --		0.0092			0.5478			0.0251		
Atom	AN	X	Y	Z	X	Y	Z	X	Y	Z
1	13	0.00	-0.04	-0.09	0.09	0.00	0.06	-0.16	0.04	-0.06
2	13	0.01	0.06	-0.08	-0.05	0.00	-0.17	-0.06	-0.08	0.02
3	13	0.00	0.06	0.09	-0.05	0.00	-0.16	0.07	-0.08	0.00
4	13	-0.01	-0.04	0.08	0.12	0.00	0.08	0.15	0.04	0.05
5	3	0.00	-0.03	-0.02	0.07	0.02	0.39	0.00	0.34	-0.02
6	3	0.01	0.12	0.00	-0.18	0.01	0.09	0.01	0.02	-0.01
7	3	-0.01	-0.11	0.00	0.17	-0.04	-0.11	-0.01	-0.43	0.00
8	12	0.00	0.01	0.01	-0.02	-0.01	-0.23	0.00	-0.22	0.02
9	6	0.03	0.02	-0.20	-0.09	0.01	0.10	-0.18	0.12	-0.03

10	6	0.02	0.19	-0.03	-0.23	0.02	0.11	-0.01	0.13	-0.01
11	6	0.01	-0.19	-0.10	0.12	-0.01	0.13	-0.10	0.11	-0.02
12	1	0.05	0.05	-0.38	-0.13	0.01	0.09	-0.35	0.12	-0.05
13	6	-0.02	0.07	0.17	-0.12	0.01	0.14	0.17	0.12	0.02
14	1	0.03	0.37	-0.06	-0.40	0.04	0.10	-0.02	0.14	-0.01
15	6	-0.02	-0.16	0.13	0.09	-0.01	0.15	0.12	0.11	0.01
16	1	0.01	-0.35	-0.19	0.27	-0.02	0.14	-0.19	0.11	-0.03
17	1	-0.03	0.15	0.33	-0.19	0.02	0.15	0.34	0.13	0.03
18	1	-0.05	-0.29	0.25	0.23	-0.02	0.18	0.23	0.11	0.02

	4	5	6
	A	A	A
Frequencies --	76.7553	84.1207	94.2089
Red. masses --	8.6406	8.1667	11.4828
Frc consts --	0.0300	0.0340	0.0600
IR Inten --	0.0574	7.0040	1.7971

Atom	AN	X	Y	Z	X	Y	Z	X	Y	Z
1	13	0.10	0.04	0.01	-0.03	0.01	0.13	0.04	0.00	0.06
2	13	-0.08	-0.03	-0.14	-0.03	-0.01	0.09	0.11	0.30	0.08
3	13	0.08	-0.03	0.14	-0.02	0.00	0.09	-0.11	0.30	-0.08
4	13	-0.11	0.04	-0.01	-0.02	-0.01	0.13	-0.05	0.01	-0.05
5	3	0.00	-0.22	-0.01	-0.01	0.02	-0.75	0.00	-0.17	-0.03
6	3	0.00	0.20	0.00	0.15	0.00	0.00	0.00	-0.57	-0.01
7	3	0.01	0.64	0.00	0.09	-0.01	-0.01	0.00	-0.18	0.00
8	12	0.00	-0.28	-0.01	0.03	0.01	-0.26	0.00	-0.25	-0.01
9	6	-0.16	0.03	-0.01	-0.01	0.00	-0.01	-0.16	-0.06	-0.01
10	6	-0.03	0.03	0.00	-0.14	0.00	-0.02	-0.03	-0.06	0.00
11	6	-0.07	0.03	0.00	0.14	0.00	0.01	-0.07	-0.06	-0.01
12	1	-0.33	0.03	-0.03	-0.03	0.00	-0.01	-0.30	-0.06	-0.02
13	6	0.14	0.03	0.02	-0.07	0.00	-0.01	0.15	-0.06	0.01
14	1	-0.06	0.04	0.00	-0.28	0.00	-0.02	-0.05	-0.06	0.00
15	6	0.12	0.03	0.01	0.11	0.00	0.01	0.12	-0.06	0.01
16	1	-0.14	0.03	-0.01	0.28	0.00	0.02	-0.13	-0.06	-0.01
17	1	0.29	0.03	0.03	-0.14	0.00	-0.01	0.27	-0.06	0.02
18	1	0.24	0.03	0.02	0.21	0.00	0.02	0.22	-0.06	0.02

	7	8	9
	A	A	A
Frequencies --	113.6718	127.2874	136.2266
Red. masses --	9.2882	12.1377	9.7566
Frc consts --	0.0707	0.1159	0.1067
IR Inten --	0.1216	0.0211	2.1571

Atom	AN	X	Y	Z	X	Y	Z	X	Y	Z
1	13	0.20	0.01	0.07	0.02	-0.19	0.11	0.02	0.00	-0.14
2	13	0.09	-0.01	-0.07	-0.11	0.12	0.24	0.13	0.00	0.22
3	13	0.09	0.02	-0.07	0.11	0.12	-0.22	0.13	0.00	0.22

4	13	0.20	-0.01	0.06	-0.02	-0.18	-0.12	0.03	0.00	-0.13
5	3	0.18	-0.01	-0.33	0.00	-0.03	0.00	0.07	0.00	0.40
6	3	0.12	0.00	0.02	0.01	0.85	0.01	0.27	-0.03	-0.11
7	3	0.12	0.01	0.04	0.00	-0.05	0.01	-0.11	0.01	0.18
8	12	-0.17	0.00	0.14	0.00	-0.08	-0.01	-0.05	0.00	-0.19
9	6	-0.21	0.00	-0.02	-0.03	0.00	0.00	-0.16	0.00	-0.05
10	6	-0.13	0.00	-0.01	-0.01	0.00	0.00	-0.29	0.00	-0.06
11	6	-0.31	0.00	-0.03	-0.01	0.00	0.00	0.01	0.00	-0.04
12	1	-0.21	0.00	-0.02	-0.07	0.00	-0.01	-0.20	0.00	-0.05
13	6	-0.18	0.00	-0.02	0.02	0.00	0.00	-0.20	0.00	-0.05
14	1	-0.05	0.00	-0.01	-0.02	0.00	0.00	-0.44	0.00	-0.07
15	6	-0.29	0.00	-0.03	0.03	0.00	0.00	-0.02	0.00	-0.04
16	1	-0.41	0.00	-0.04	-0.02	0.00	0.00	0.12	0.00	-0.02
17	1	-0.15	0.00	-0.02	0.06	0.00	0.01	-0.28	0.00	-0.06
18	1	-0.38	0.00	-0.04	0.05	0.00	0.00	0.07	0.00	-0.03

	10	11	12
	A	A	A
Frequencies --	149.7912	159.2607	210.1531
Red. masses --	9.9952	19.4268	8.3372
Frc consts --	0.1321	0.2903	0.2169
IR Inten --	2.0221	0.0610	6.2484

Atom	AN	X	Y	Z	X	Y	Z	X	Y	Z
1	13	0.14	0.19	0.10	-0.07	-0.12	0.39	-0.02	0.01	-0.09
2	13	0.03	-0.07	-0.03	-0.24	0.10	-0.29	-0.17	0.05	0.02
3	13	-0.03	-0.07	0.04	0.25	0.09	0.29	0.20	0.00	-0.12
4	13	-0.14	0.20	-0.10	0.06	-0.11	-0.39	0.07	0.05	0.10
5	3	0.00	-0.54	0.00	0.00	0.20	0.01	0.02	-0.41	-0.08
6	3	0.01	0.32	0.00	0.00	-0.31	0.00	-0.15	-0.21	0.13
7	3	0.00	-0.68	0.00	0.01	-0.26	-0.01	-0.34	-0.01	0.36
8	12	0.00	-0.01	0.00	0.00	0.02	0.00	-0.01	-0.07	0.07
9	6	-0.01	0.00	0.00	0.11	0.04	0.01	0.14	0.04	-0.03
10	6	-0.01	0.00	0.00	0.02	0.05	0.00	-0.07	0.05	-0.04
11	6	0.00	0.00	0.00	0.05	0.05	0.01	0.19	0.05	-0.02
12	1	-0.03	0.00	0.00	0.20	0.04	0.02	0.23	0.04	-0.03
13	6	0.01	0.00	0.00	-0.10	0.04	-0.01	-0.15	0.04	-0.05
14	1	-0.02	0.00	0.00	0.03	0.05	0.00	-0.14	0.05	-0.05
15	6	0.01	0.00	0.00	-0.08	0.04	-0.01	0.01	0.05	-0.04
16	1	-0.01	0.00	0.00	0.09	0.05	0.01	0.31	0.04	-0.01
17	1	0.02	0.00	0.00	-0.18	0.04	-0.01	-0.28	0.04	-0.06
18	1	0.02	0.00	0.00	-0.14	0.04	-0.01	0.00	0.05	-0.04

	13	14	15
	A	A	A
Frequencies --	211.0796	230.2651	235.1270
Red. masses --	7.4544	7.5307	6.8558

Frc consts	--	0.1957			0.2353			0.2233			
IR Inten	--	6.6505			1.3564			0.1632			
Atom	AN	X	Y	Z	X	Y	Z	X	Y	Z	
1	13	-0.06	0.05	-0.08	-0.10	0.02	0.06	-0.06	0.00	-0.02	
2	13	-0.16	-0.01	0.11	0.11	-0.04	-0.03	-0.11	0.01	0.01	
3	13	0.10	0.05	0.01	0.11	0.04	-0.04	0.13	0.00	0.00	
4	13	0.01	-0.01	0.06	-0.10	-0.02	0.07	0.05	0.01	0.01	
5	3	-0.01	-0.30	0.09	-0.17	-0.01	0.08	-0.01	-0.22	-0.01	
6	3	0.18	-0.15	-0.18	0.12	0.00	0.06	-0.05	-0.08	0.04	
7	3	0.41	0.00	-0.43	0.20	0.01	-0.45	0.02	0.01	-0.03	
8	12	0.01	-0.05	-0.10	0.02	-0.02	0.25	0.00	0.30	0.01	
9	6	0.10	0.03	0.06	-0.05	0.01	-0.09	-0.27	-0.08	-0.02	
10	6	0.15	0.04	0.06	-0.25	0.01	-0.09	-0.05	-0.10	0.00	
11	6	-0.11	0.04	0.04	0.18	0.00	-0.06	-0.12	-0.09	-0.02	
12	1	0.19	0.03	0.07	-0.08	0.01	-0.09	-0.47	-0.08	-0.03	
13	6	-0.05	0.03	0.05	-0.14	0.00	-0.09	0.24	-0.08	0.01	
14	1	0.26	0.03	0.07	-0.42	0.01	-0.10	-0.08	-0.10	-0.01	
15	6	-0.20	0.03	0.03	0.13	0.01	-0.07	0.19	-0.09	0.02	
16	1	-0.17	0.04	0.04	0.32	0.00	-0.04	-0.21	-0.09	-0.03	
17	1	-0.07	0.03	0.05	-0.23	0.00	-0.10	0.42	-0.08	0.02	
18	1	-0.34	0.02	0.02	0.23	0.01	-0.06	0.32	-0.08	0.03	

			16			17			18		
			A			A			A		
Frequencies	--	236.6127			246.5796			265.7402			
Red. masses	--	8.2096			11.5446			15.3034			
Frc consts	--	0.2708			0.4136			0.6367			
IR Inten	--	0.3259			5.5404			3.7214			
Atom	AN	X	Y	Z	X	Y	Z	X	Y	Z	
1	13	0.00	0.04	0.09	0.15	-0.03	-0.09	0.39	-0.01	-0.10	
2	13	-0.11	-0.04	-0.09	-0.25	0.06	0.12	-0.20	-0.02	0.06	
3	13	-0.08	0.05	-0.09	-0.25	-0.07	0.13	0.20	-0.02	-0.06	
4	13	0.01	-0.05	0.09	0.16	0.03	-0.10	-0.39	-0.02	0.10	
5	3	-0.04	-0.02	0.17	0.36	0.00	-0.07	-0.01	0.66	0.01	
6	3	0.75	0.00	-0.48	-0.17	0.01	-0.33	0.00	-0.27	-0.01	
7	3	-0.18	0.00	0.24	0.31	0.00	-0.11	0.02	-0.24	0.00	
8	12	-0.03	0.03	0.04	-0.03	0.00	0.22	0.00	0.04	0.00	
9	6	0.00	-0.01	-0.01	0.01	0.00	-0.06	-0.03	-0.01	0.00	
10	6	0.00	-0.01	-0.01	-0.14	0.00	-0.06	-0.01	-0.01	0.00	
11	6	0.04	-0.01	-0.01	0.19	-0.01	-0.04	-0.01	-0.01	0.00	
12	1	-0.01	-0.01	-0.01	-0.01	0.00	-0.06	-0.06	0.00	-0.01	
13	6	0.04	-0.01	-0.01	-0.03	-0.01	-0.06	0.02	-0.01	0.00	
14	1	0.00	-0.01	-0.01	-0.25	0.00	-0.07	-0.01	-0.01	0.00	
15	6	0.06	-0.01	0.00	0.16	0.01	-0.04	0.02	-0.01	0.00	
16	1	0.05	-0.01	-0.01	0.30	-0.01	-0.03	-0.03	0.00	0.00	

17	1	0.06	-0.01	-0.01	-0.08	-0.01	-0.07	0.05	0.00	0.00
18	1	0.09	-0.01	0.00	0.26	0.01	-0.03	0.05	0.00	0.00

	19	20	21
	A	A	A
Frequencies --	285.2317	313.6534	333.9521
Red. masses --	17.0284	16.8842	8.1021
Frc consts --	0.8162	0.9787	0.5324
IR Inten --	28.2287	0.4425	47.7180

Atom	AN	X	Y	Z	X	Y	Z	X	Y	Z
1	13	0.05	0.42	-0.07	-0.04	0.21	0.06	-0.05	0.01	-0.09
2	13	-0.02	-0.26	0.02	0.09	0.43	-0.02	-0.07	0.10	-0.04
3	13	-0.02	0.26	0.02	0.08	-0.43	-0.02	-0.07	-0.10	-0.04
4	13	0.06	-0.42	-0.08	-0.03	-0.21	0.05	-0.05	-0.01	-0.09
5	3	-0.35	-0.01	-0.05	-0.31	-0.01	0.02	0.06	0.00	-0.01
6	3	-0.29	0.00	0.07	-0.19	0.01	-0.48	0.47	-0.01	0.68
7	3	0.31	0.00	0.38	0.24	0.00	0.21	0.42	0.00	0.27
8	12	-0.07	0.00	0.02	0.10	0.00	0.01	0.00	0.00	0.02
9	6	0.03	0.00	-0.01	-0.04	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
10	6	0.00	0.00	-0.01	-0.04	0.00	0.00	-0.01	0.00	0.00
11	6	0.07	0.00	0.00	-0.05	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
12	1	0.03	0.00	-0.01	-0.07	0.00	0.00	-0.01	0.00	0.00
13	6	0.02	0.00	-0.01	-0.04	0.00	0.00	-0.01	0.00	0.00
14	1	-0.03	0.00	-0.01	-0.03	0.00	0.00	-0.01	0.00	0.00
15	6	0.06	0.00	0.00	-0.05	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
16	1	0.11	0.00	0.00	-0.09	0.00	-0.01	0.01	0.00	0.00
17	1	0.01	0.00	-0.01	-0.06	0.00	0.00	-0.01	0.00	0.00
18	1	0.10	0.00	0.00	-0.09	0.00	-0.01	0.01	0.00	0.00

	22	23	24
	A	A	A
Frequencies --	346.4975	380.4852	398.0298
Red. masses --	9.1671	8.7147	11.6987
Frc consts --	0.6485	0.7433	1.0920
IR Inten --	4.3789	132.6513	111.6261

Atom	AN	X	Y	Z	X	Y	Z	X	Y	Z
1	13	0.09	0.18	-0.01	-0.15	0.11	0.03	0.06	-0.02	-0.02
2	13	-0.06	0.09	0.04	0.03	-0.03	-0.03	-0.09	-0.06	0.00
3	13	-0.06	-0.08	0.03	0.03	0.03	-0.03	-0.08	0.06	0.00
4	13	0.09	-0.18	-0.01	-0.15	-0.11	0.03	0.06	0.02	-0.02
5	3	0.10	0.00	0.00	0.93	0.00	0.02	-0.25	0.00	-0.02
6	3	0.20	-0.01	0.37	-0.09	0.00	-0.08	0.01	0.00	0.03
7	3	-0.62	0.00	-0.56	0.01	0.00	0.08	-0.08	0.00	0.05
8	12	0.00	0.00	-0.01	0.13	0.00	0.00	0.59	0.00	0.05
9	6	0.01	0.00	0.00	-0.04	0.00	0.00	-0.15	0.01	0.00
10	6	0.02	0.00	0.01	-0.03	0.00	0.00	-0.14	0.00	0.00

11	6	0.00	0.00	0.00	-0.04	0.00	0.00	-0.16	0.00	-0.01
12	1	0.02	0.00	0.01	-0.06	0.00	0.00	-0.28	0.01	-0.01
13	6	0.02	0.00	0.01	-0.04	0.00	0.00	-0.15	-0.01	0.00
14	1	0.03	0.00	0.01	-0.05	0.00	0.00	-0.26	0.00	-0.01
15	6	0.00	0.00	0.00	-0.04	0.00	0.00	-0.16	-0.01	-0.01
16	1	0.00	0.00	0.00	-0.07	0.00	-0.01	-0.31	0.00	-0.03
17	1	0.03	0.00	0.01	-0.06	0.00	0.00	-0.28	-0.01	-0.01
18	1	0.00	0.00	0.00	-0.07	0.00	0.00	-0.31	-0.01	-0.03

	25	26	27
	A	A	A
Frequencies --	626.6996	627.6537	764.2310
Red. masses --	4.6504	4.5378	1.2601
Frc consts --	1.0761	1.0533	0.4336
IR Inten --	0.2461	0.0053	5.8616

Atom	AN	X	Y	Z	X	Y	Z	X	Y	Z
1	13	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
2	13	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
3	13	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
4	13	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
5	3	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
6	3	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
7	3	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
8	12	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
9	6	0.29	-0.01	0.01	-0.21	0.01	-0.02	0.09	0.00	0.01
10	6	-0.37	0.00	-0.01	0.01	-0.01	0.00	0.06	0.00	0.00
11	6	-0.10	0.01	-0.01	0.34	-0.01	0.05	-0.01	0.00	0.00
12	1	0.43	-0.02	0.02	-0.31	0.02	-0.04	-0.58	0.01	-0.05
13	6	0.30	0.02	0.01	0.20	0.02	0.02	-0.04	0.00	0.00
14	1	-0.48	0.00	-0.01	0.01	-0.01	0.00	-0.46	-0.01	-0.02
15	6	-0.12	-0.01	-0.01	-0.34	-0.01	-0.05	-0.09	0.00	-0.01
16	1	-0.16	0.02	-0.01	0.49	0.00	0.06	0.05	-0.01	0.00
17	1	0.44	0.02	0.02	0.29	0.02	0.03	0.29	0.00	0.01
18	1	-0.19	-0.02	-0.01	-0.49	-0.01	-0.06	0.58	0.01	0.06

	28	29	30
	A	A	A
Frequencies --	766.1160	788.0241	865.5428
Red. masses --	1.2590	1.1234	4.4893
Frc consts --	0.4354	0.4110	1.9815
IR Inten --	4.0247	482.5055	0.0036

Atom	AN	X	Y	Z	X	Y	Z	X	Y	Z
1	13	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
2	13	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
3	13	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
4	13	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00

5	3	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
6	3	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
7	3	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
8	12	0.00	0.00	0.00	-0.02	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
9	6	-0.04	0.00	0.00	0.04	0.01	0.00	0.00	0.13	0.13
10	6	0.07	0.00	0.00	0.04	0.00	0.01	0.00	0.12	0.04
11	6	-0.09	0.00	-0.01	0.04	0.00	0.00	-0.03	-0.19	0.23
12	1	0.27	0.00	0.01	-0.42	0.01	-0.03	0.03	0.21	-0.31
13	6	0.09	0.00	0.01	0.05	0.00	0.01	0.01	0.18	-0.18
14	1	-0.47	0.01	-0.03	-0.42	0.00	-0.02	0.03	-0.37	0.11
15	6	-0.02	0.00	0.00	0.05	0.00	0.00	0.03	-0.24	-0.23
16	1	0.60	0.00	0.06	-0.44	0.01	-0.05	-0.09	0.02	0.34
17	1	-0.55	-0.01	-0.04	-0.45	-0.02	-0.03	-0.09	0.34	0.13
18	1	0.12	0.01	0.00	-0.48	-0.01	-0.05	0.11	-0.19	-0.27

	31	32	33
	A	A	A
Frequencies --	865.8697	873.1060	875.3546
Red. masses --	4.2364	1.1894	1.1758
Frc consts --	1.8713	0.5342	0.5308
IR Inten --	0.0083	0.0609	0.0489

Atom	AN	X	Y	Z	X	Y	Z	X	Y	Z
1	13	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
2	13	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
3	13	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
4	13	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
5	3	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
6	3	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
7	3	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
8	12	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
9	6	0.00	-0.30	0.00	0.05	0.02	-0.01	-0.05	0.00	-0.02
10	6	-0.03	0.02	0.32	-0.07	-0.01	-0.03	0.01	-0.02	0.01
11	6	0.02	-0.01	-0.18	-0.01	0.02	0.01	0.08	0.00	0.00
12	1	-0.14	-0.26	-0.22	-0.43	0.03	-0.03	0.44	-0.01	0.02
13	6	0.01	0.24	-0.02	0.07	-0.02	0.00	0.03	0.01	0.02
14	1	0.15	0.11	0.32	0.61	0.00	0.01	-0.11	-0.02	0.00
15	6	0.00	0.05	-0.11	-0.04	-0.01	0.02	-0.07	0.01	-0.01
16	1	0.07	0.37	0.03	0.09	-0.01	0.01	-0.63	0.01	-0.07
17	1	-0.13	0.08	-0.35	-0.57	-0.03	-0.03	-0.27	0.00	0.00
18	1	0.04	-0.30	0.23	0.30	0.02	0.03	0.55	0.02	0.05

	34	35	36
	A	A	A
Frequencies --	1024.3634	1025.0430	1075.4387
Red. masses --	1.4657	1.4674	1.2541
Frc consts --	0.9061	0.9084	0.8546

IR Inten --		12.9576			13.4130			0.0331		
Atom	AN	X	Y	Z	X	Y	Z	X	Y	Z
1	13	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
2	13	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
3	13	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
4	13	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
5	3	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
6	3	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
7	3	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
8	12	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
9	6	0.00	-0.11	-0.01	-0.01	0.00	0.07	0.00	0.03	-0.04
10	6	0.00	0.06	-0.05	0.01	-0.04	-0.10	0.01	0.00	-0.02
11	6	0.00	0.05	0.05	0.01	0.07	-0.09	0.00	0.07	0.05
12	1	-0.01	-0.13	0.04	-0.04	-0.09	0.59	0.05	0.08	-0.32
13	6	0.00	-0.06	0.07	0.00	0.09	0.01	0.00	-0.04	-0.05
14	1	0.00	0.56	-0.12	0.00	-0.26	-0.07	-0.04	0.05	-0.03
15	6	0.01	-0.04	-0.09	0.00	-0.08	0.00	0.00	-0.06	0.07
16	1	-0.03	0.51	0.30	0.01	0.18	-0.03	-0.04	0.50	0.28
17	1	-0.02	0.09	0.39	-0.04	0.27	0.38	0.06	-0.20	-0.36
18	1	0.03	0.15	-0.28	-0.02	-0.42	0.32	-0.04	-0.43	0.42

		37			38			39		
		A			A			A		
Frequencies --		1075.7503			1137.4084			1287.0506		
Red. masses --		1.2509			5.8301			1.2795		
Frc consts --		0.8529			4.4438			1.2488		
IR Inten --		0.0077			21.5416			0.0002		
Atom	AN	X	Y	Z	X	Y	Z	X	Y	Z
1	13	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
2	13	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
3	13	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
4	13	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
5	3	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
6	3	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
7	3	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
8	12	0.00	0.00	0.00	-0.01	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
9	6	-0.01	0.00	0.08	-0.01	0.29	0.05	0.01	0.01	-0.07
10	6	0.00	0.09	-0.01	-0.03	0.04	0.29	0.00	0.07	-0.01
11	6	0.01	-0.04	0.00	0.02	0.14	-0.26	0.00	-0.06	-0.03
12	1	-0.02	-0.08	0.53	0.04	0.33	0.07	-0.03	-0.08	0.44
13	6	0.01	-0.01	-0.07	-0.01	-0.27	0.13	0.00	0.03	0.06
14	1	0.01	0.61	-0.08	0.02	0.05	0.33	0.00	-0.43	0.06
15	6	-0.01	-0.03	0.00	0.02	-0.21	-0.21	0.00	-0.05	0.05
16	1	-0.03	-0.23	-0.10	0.07	0.15	-0.29	-0.02	0.39	0.21
17	1	0.01	-0.19	-0.44	0.04	-0.30	0.15	0.03	-0.19	-0.40

18	1	0.03	-0.13	0.09	0.07	-0.22	-0.24	0.02	0.32	-0.30

	40	41	42
	A	A	A
Frequencies --	1373.3187	1376.3355	1461.9078
Red. masses --	4.5857	4.6487	2.4823
Frc consts --	5.0957	5.1883	3.1257
IR Inten --	0.0417	0.0169	0.9326

Atom	AN	X	Y	Z	X	Y	Z	X	Y	Z
1	13	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
2	13	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
3	13	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
4	13	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
5	3	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
6	3	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
7	3	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
8	12	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
9	6	0.00	-0.07	-0.24	-0.03	-0.14	0.22	-0.01	-0.13	0.06
10	6	0.01	-0.02	0.15	0.00	0.33	-0.02	0.00	0.12	-0.11
11	6	-0.01	0.30	0.13	0.04	0.02	-0.16	-0.01	0.17	0.07
12	1	0.00	-0.17	0.31	0.05	-0.05	-0.37	0.03	-0.10	-0.27
13	6	-0.01	0.05	-0.20	0.03	-0.19	-0.23	-0.01	0.02	0.18
14	1	-0.05	0.08	0.14	-0.01	-0.47	0.09	0.01	-0.41	-0.06
15	6	0.00	-0.26	0.16	-0.04	-0.01	0.19	0.02	-0.07	-0.12
16	1	0.02	-0.42	-0.26	-0.03	0.15	-0.10	0.02	-0.48	-0.28
17	1	0.02	0.23	0.14	-0.05	0.12	0.42	0.03	-0.29	-0.42
18	1	0.01	0.28	-0.36	0.03	0.25	-0.04	0.00	-0.18	-0.05

	43	44	45
	A	A	A
Frequencies --	1462.8472	3199.3520	3204.3509
Red. masses --	2.4886	1.0883	1.0883
Frc consts --	3.1376	6.5630	6.5837
IR Inten --	1.1348	0.5920	0.1425

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

12	1	-0.03	-0.16	0.49	0.00	-0.37	-0.07	0.00	0.43	0.08
13	6	0.01	-0.14	-0.03	0.00	-0.04	0.02	0.00	-0.03	0.01
14	1	-0.02	-0.38	0.17	-0.04	0.10	0.74	0.01	-0.02	-0.11
15	6	0.01	0.15	-0.11	0.00	0.01	0.01	0.00	0.03	0.04
16	1	0.00	-0.15	0.10	0.01	0.04	-0.06	-0.05	-0.27	0.50
17	1	-0.03	-0.01	0.30	0.01	0.45	-0.22	0.00	0.33	-0.16
18	1	-0.03	-0.38	0.40	0.01	-0.13	-0.13	0.05	-0.40	-0.41

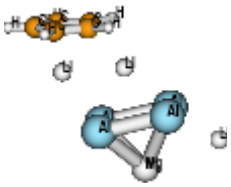
	46	47	48
	A	A	A
Frequencies --	3217.3475	3219.4789	3231.7883
Red. masses --	1.0957	1.0957	1.1045
Frc consts --	6.6825	6.6914	6.7965
IR Inten --	7.3394	6.2669	4.2630

Atom	AN	X	Y	Z	X	Y	Z	X	Y	Z
1	13	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
2	13	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
3	13	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
4	13	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
5	3	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
6	3	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
7	3	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
8	12	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
9	6	0.00	0.03	0.00	0.00	-0.05	-0.01	0.00	-0.04	-0.01
10	6	0.00	0.01	0.05	0.00	0.00	-0.01	0.00	0.00	-0.03
11	6	0.00	-0.02	0.04	0.00	-0.01	0.02	0.00	-0.02	0.04
12	1	0.00	-0.28	-0.04	0.00	0.61	0.11	0.00	0.45	0.08
13	6	0.00	-0.04	0.01	0.00	-0.04	0.02	0.00	0.03	-0.02
14	1	0.03	-0.08	-0.55	0.00	0.00	0.05	-0.02	0.04	0.31
15	6	0.00	0.02	0.02	0.00	-0.03	-0.03	0.00	0.03	0.03
16	1	0.05	0.26	-0.47	0.03	0.13	-0.25	0.05	0.26	-0.47
17	1	0.00	0.39	-0.18	0.01	0.47	-0.23	0.00	-0.34	0.17
18	1	0.03	-0.25	-0.25	-0.04	0.35	0.37	0.04	-0.34	-0.36

$CpMgAl_4Li_3 \rightarrow CpMg^+ + Al_4Li_3^-$ **-165.743708**

$CpMgAl_4Li_3 \rightarrow Cp^- + Al_4Li_3Mg^+$ **-135.8666627**

CpMgAl4Li3-C1-f-f-306-slope-b36311+gx.frq+24.4 △E=4.97kcal



Charge = 0 Multiplicity = 1

Al,0,-0.7740370818,-1.0495334575,1.4857069006

Al,0,-2.1156429643,1.39139954,0.9691709128
Al,0,-2.0105977258,0.8464472509,-1.6088090627
Al,0,-0.6736668068,-1.5725209452,-0.9895779015
Li,0,-4.2454112793,1.8578463,-0.5649261148
Li,0,1.9793270864,-0.9613539132,0.2824495018
Li,0,0.4552353077,0.9952479051,-0.1905070336
Mg,0,-3.1706421944,-1.0875856302,0.1017634265
C,0,3.495908978,0.3022776947,1.2499356065
C,0,4.0796142549,-0.5468892896,0.2796043337
C,0,2.6563597018,1.2260246174,0.5766032624
H,0,3.6801325916,0.2790454607,2.3158803025
C,0,3.5858847168,-0.1706286282,-0.9923856903
H,0,4.788188383,-1.3418043694,0.4756676815
C,0,2.7121778106,0.932473231,-0.8152650294
H,0,2.1678991831,2.0773517439,1.0440654254
H,0,3.8508683725,-0.6186650623,-1.9409461592
H,0,2.2747712078,1.5150321153,-1.622213365

State=1-A\HF=-1386.1053808

		1			2			3		
		A			A			A		
Frequencies --		24.4304			34.6561			52.7155		
Red. masses --		4.8650			5.5742			19.2469		
Frc consts --		0.0017			0.0039			0.0315		
IR Inten --		0.1692			0.0000			0.0082		
Atom	AN	X	Y	Z	X	Y	Z	X	Y	Z
1	13	0.03	0.00	-0.05	-0.05	-0.09	0.00	-0.18	0.16	0.28
2	13	0.08	-0.05	0.05	-0.10	-0.05	0.06	0.01	-0.11	0.14
3	13	-0.09	0.05	0.05	0.10	0.05	0.06	-0.01	0.11	0.14
4	13	-0.03	0.00	-0.05	0.05	0.09	0.00	0.18	-0.16	0.28
5	3	0.00	0.00	0.21	0.00	0.00	-0.08	0.00	0.00	0.07
6	3	0.00	0.00	-0.03	0.00	0.00	0.08	0.00	0.00	-0.02
7	3	0.00	0.00	-0.38	0.00	0.00	0.44	0.00	0.00	-0.35
8	12	0.00	0.00	-0.02	0.00	0.00	-0.05	0.00	0.00	-0.58
9	6	-0.15	0.10	0.08	0.00	0.17	-0.03	0.05	-0.03	-0.12
10	6	0.00	0.00	0.21	0.00	0.00	0.06	0.00	0.00	-0.16
11	6	-0.09	0.06	-0.12	0.00	0.11	-0.20	0.03	-0.02	-0.05
12	1	-0.28	0.19	0.13	0.01	0.34	0.00	0.10	-0.06	-0.14
13	6	0.15	-0.10	0.08	-0.01	-0.17	-0.03	-0.05	0.03	-0.12
14	1	0.00	0.00	0.37	0.00	0.00	0.19	0.00	0.00	-0.22
15	6	0.09	-0.06	-0.12	0.00	-0.11	-0.20	-0.03	0.02	-0.05
16	1	-0.17	0.12	-0.24	0.05	0.24	-0.31	0.03	-0.05	-0.01
17	1	0.28	-0.19	0.13	-0.01	-0.34	0.00	-0.10	0.06	-0.14
18	1	0.17	-0.12	-0.24	-0.05	-0.24	-0.31	-0.03	0.05	-0.01

		4			5			6		
		A			A			A		
Frequencies --		66.1208			85.5889			98.0765		
Red. masses --		10.2193			4.8608			8.0713		
Frc consts --		0.0263			0.0210			0.0457		
IR Inten --		1.2428			0.6685			0.7475		
Atom	AN	X	Y	Z	X	Y	Z	X	Y	Z
1	13	0.08	0.20	0.01	0.02	0.02	0.06	0.13	0.05	0.02
2	13	-0.19	0.06	-0.02	-0.03	0.04	0.01	0.10	0.02	-0.01
3	13	-0.19	0.06	0.02	0.02	-0.04	0.01	0.10	0.02	0.01
4	13	0.08	0.20	0.00	-0.02	-0.02	0.06	0.13	0.05	-0.02
5	3	-0.40	-0.44	0.00	0.00	0.00	-0.08	0.08	-0.03	0.00
6	3	-0.01	0.03	0.00	0.00	0.00	-0.42	-0.28	0.03	0.00
7	3	0.04	0.11	0.00	0.00	0.00	0.27	-0.07	0.21	0.00
8	12	0.08	-0.14	0.00	0.00	0.00	-0.01	0.20	-0.08	0.00
9	6	0.08	-0.15	0.00	-0.21	-0.13	-0.02	-0.27	-0.07	0.00
10	6	0.02	-0.20	0.00	0.00	0.00	0.02	-0.33	-0.12	0.00
11	6	0.17	-0.07	0.00	-0.13	-0.08	-0.07	-0.16	0.02	0.00
12	1	0.06	-0.17	0.00	-0.40	-0.24	0.00	-0.30	-0.10	0.00
13	6	0.08	-0.15	0.00	0.21	0.13	-0.02	-0.27	-0.07	0.00
14	1	-0.06	-0.27	0.00	0.00	0.00	0.06	-0.41	-0.20	0.00
15	6	0.17	-0.07	0.00	0.13	0.08	-0.07	-0.16	0.02	0.00
16	1	0.24	-0.03	0.00	-0.20	-0.11	-0.08	-0.10	0.06	0.00
17	1	0.06	-0.17	0.00	0.40	0.24	0.00	-0.30	-0.09	0.00
18	1	0.24	-0.03	0.00	0.20	0.11	-0.08	-0.10	0.06	0.00

		7			8			9		
		A			A			A		
Frequencies --		119.0806			124.8508			136.5099		
Red. masses --		10.8878			7.7225			20.5820		
Frc consts --		0.0910			0.0709			0.2260		
IR Inten --		5.6993			5.7915			0.0362		
Atom	AN	X	Y	Z	X	Y	Z	X	Y	Z
1	13	0.04	0.10	-0.03	0.02	0.07	-0.01	0.26	0.39	-0.20
2	13	0.26	0.04	-0.09	-0.10	-0.16	0.01	-0.13	-0.04	0.23
3	13	-0.26	-0.04	-0.09	-0.10	-0.16	-0.01	0.14	0.04	0.23
4	13	-0.04	-0.10	-0.03	0.02	0.07	0.01	-0.27	-0.40	-0.20
5	3	0.00	0.00	0.44	0.33	0.61	0.00	0.00	0.00	-0.47
6	3	0.00	0.00	0.05	-0.08	0.16	0.00	0.00	0.00	0.06
7	3	0.00	0.00	0.70	0.00	0.25	0.00	0.00	0.00	0.17
8	12	0.00	0.00	-0.18	-0.06	-0.09	0.00	0.00	0.00	-0.08
9	6	0.04	0.05	0.04	0.02	-0.03	0.00	0.05	0.04	0.03
10	6	0.00	0.00	0.06	-0.06	-0.10	0.00	0.00	0.00	0.04
11	6	0.03	0.03	0.02	0.15	0.08	0.00	0.03	0.03	0.03
12	1	0.08	0.10	0.05	-0.01	-0.06	0.00	0.08	0.07	0.03

13	6	-0.04	-0.05	0.04	0.02	-0.03	0.00	-0.04	-0.04	0.03
14	1	0.00	0.00	0.07	-0.17	-0.20	0.00	0.00	0.00	0.04
15	6	-0.03	-0.03	0.02	0.15	0.08	0.00	-0.03	-0.02	0.03
16	1	0.09	0.09	0.01	0.26	0.15	0.00	0.06	0.05	0.02
17	1	-0.08	-0.10	0.05	-0.01	-0.06	0.00	-0.08	-0.07	0.03
18	1	-0.09	-0.09	0.01	0.26	0.15	0.00	-0.05	-0.05	0.02

	10	11	12
	A	A	A
Frequencies --	145.0468	181.0041	182.0813
Red. masses --	5.4628	19.8740	15.3448
Frc consts --	0.0677	0.3836	0.2997
IR Inten --	0.7664	1.9847	10.7374

Atom	AN	X	Y	Z	X	Y	Z	X	Y	Z
1	13	0.05	0.07	0.03	-0.11	-0.14	-0.11	0.07	0.28	-0.10
2	13	-0.07	0.04	-0.03	0.18	0.41	0.26	0.09	-0.24	0.15
3	13	-0.07	0.04	0.03	-0.18	-0.41	0.26	0.09	-0.24	-0.15
4	13	0.05	0.07	-0.03	0.11	0.14	-0.11	0.08	0.28	0.10
5	3	0.10	0.35	0.00	0.00	0.00	-0.57	0.19	-0.37	0.00
6	3	0.14	-0.16	0.00	0.00	0.00	0.04	0.05	-0.20	0.00
7	3	-0.08	-0.17	0.00	0.00	0.00	-0.11	0.11	-0.19	0.00
8	12	0.10	-0.12	0.00	0.00	0.00	-0.17	-0.27	0.21	0.00
9	6	0.02	0.00	0.00	0.02	0.02	0.01	-0.05	0.00	0.00
10	6	0.15	0.11	0.00	0.00	0.00	0.00	0.03	0.06	0.00
11	6	-0.18	-0.18	0.00	0.02	0.01	0.01	-0.15	-0.09	0.00
12	1	0.07	0.04	0.00	0.05	0.04	0.01	-0.02	0.02	0.00
13	6	0.02	0.00	0.00	-0.02	-0.02	0.01	-0.05	0.00	0.00
14	1	0.31	0.25	0.00	0.00	0.00	0.00	0.12	0.14	0.00
15	6	-0.18	-0.18	0.00	-0.01	-0.01	0.01	-0.15	-0.09	0.00
16	1	-0.34	-0.28	0.01	0.02	0.01	0.01	-0.23	-0.15	0.01
17	1	0.07	0.04	0.00	-0.05	-0.04	0.01	-0.02	0.02	0.00
18	1	-0.34	-0.28	-0.01	-0.01	-0.01	0.01	-0.23	-0.15	-0.01

	13	14	15
	A	A	A
Frequencies --	197.6034	206.8896	233.9231
Red. masses --	23.4589	23.1614	12.1171
Frc consts --	0.5397	0.5841	0.3907
IR Inten --	3.9834	3.2885	0.5127

Atom	AN	X	Y	Z	X	Y	Z	X	Y	Z
1	13	-0.31	0.22	0.05	0.50	-0.26	0.21	0.04	0.01	-0.05
2	13	0.29	0.02	-0.15	0.01	0.02	-0.06	-0.25	0.24	0.00
3	13	0.29	0.02	0.15	0.00	-0.02	-0.06	0.25	-0.24	0.00
4	13	-0.30	0.22	-0.06	-0.50	0.26	0.21	-0.04	-0.01	-0.05
5	3	0.16	-0.16	0.00	0.00	0.00	-0.28	0.00	0.00	0.85
6	3	-0.01	-0.06	0.00	0.00	0.00	-0.02	0.00	0.00	0.02

7	3	0.11	0.08	0.00	0.00	0.00	-0.10	0.00	0.00	-0.09
8	12	-0.15	-0.60	0.00	0.00	0.00	-0.32	0.00	0.00	-0.13
9	6	0.04	0.04	0.00	0.06	0.05	0.03	0.01	0.01	0.00
10	6	0.03	0.04	0.00	0.00	0.00	0.03	0.00	0.00	0.00
11	6	0.04	0.04	0.00	0.04	0.03	0.04	0.00	0.00	0.00
12	1	0.05	0.04	0.00	0.11	0.09	0.03	0.02	0.01	0.00
13	6	0.04	0.04	0.00	-0.06	-0.05	0.03	-0.01	-0.01	0.00
14	1	0.04	0.04	0.00	0.00	0.00	0.03	0.00	0.00	0.00
15	6	0.04	0.04	0.00	-0.04	-0.03	0.04	0.00	0.00	0.00
16	1	0.06	0.06	0.00	0.06	0.05	0.03	0.01	0.00	0.00
17	1	0.05	0.05	0.00	-0.11	-0.09	0.03	-0.02	-0.01	0.00
18	1	0.06	0.06	0.00	-0.06	-0.05	0.03	-0.01	-0.01	0.00

	16	17	18
	A	A	A
Frequencies --	238.0117	263.3885	280.7449
Red. masses --	6.1206	21.7688	24.2537
Frc consts --	0.2043	0.8898	1.1263
IR Inten --	5.8310	8.2748	0.6155

Atom	AN	X	Y	Z	X	Y	Z	X	Y	Z
1	13	-0.03	-0.02	-0.01	-0.23	0.03	0.04	-0.22	0.11	0.19
2	13	0.03	-0.02	0.04	-0.04	0.02	0.48	-0.02	-0.27	-0.30
3	13	0.03	-0.02	-0.04	-0.04	0.02	-0.48	-0.02	-0.27	0.30
4	13	-0.03	-0.02	0.01	-0.23	0.03	-0.04	-0.22	0.11	-0.19
5	3	-0.01	-0.10	0.00	0.32	-0.12	0.00	-0.07	-0.10	0.00
6	3	-0.07	0.35	0.00	0.01	-0.08	0.00	-0.01	-0.18	0.00
7	3	-0.21	0.65	0.00	-0.08	-0.18	0.00	0.11	0.04	0.00
8	12	0.01	0.03	0.00	0.45	-0.08	0.00	0.50	0.40	0.00
9	6	0.08	-0.03	0.00	0.02	0.01	0.00	0.01	0.02	0.00
10	6	0.16	0.04	0.00	-0.01	-0.01	0.00	0.02	0.03	0.00
11	6	-0.08	-0.17	0.00	0.06	0.05	0.00	0.00	0.01	0.00
12	1	0.10	-0.02	0.00	0.02	0.01	0.00	0.03	0.03	0.00
13	6	0.08	-0.03	0.00	0.02	0.01	0.00	0.01	0.02	0.00
14	1	0.25	0.13	0.00	-0.04	-0.04	0.00	0.05	0.05	0.00
15	6	-0.08	-0.17	0.00	0.06	0.05	0.00	0.00	0.01	0.00
16	1	-0.18	-0.24	0.02	0.11	0.09	-0.01	0.01	0.01	0.00
17	1	0.10	-0.02	0.00	0.02	0.01	0.00	0.03	0.03	0.00
18	1	-0.18	-0.24	-0.02	0.11	0.09	0.01	0.01	0.01	0.00

	19	20	21
	A	A	A
Frequencies --	314.0339	318.0672	327.7436
Red. masses --	6.0069	7.3043	22.3787
Frc consts --	0.3490	0.4354	1.4163
IR Inten --	0.3297	13.0484	1.2003

Atom	AN	X	Y	Z	X	Y	Z	X	Y	Z

1	13	0.03	0.00	0.00	0.01	0.03	0.09	0.10	-0.01	0.57
2	13	0.01	0.00	0.00	0.04	-0.02	-0.01	0.02	-0.01	0.14
3	13	-0.01	0.00	0.00	0.04	-0.02	0.01	0.02	-0.01	-0.14
4	13	-0.03	0.01	0.00	0.01	0.03	-0.09	0.10	-0.01	-0.57
5	3	0.00	0.00	-0.01	0.01	-0.01	0.00	-0.18	0.04	0.00
6	3	0.00	0.01	0.75	-0.08	0.70	-0.01	0.02	-0.31	0.00
7	3	0.00	-0.01	0.06	-0.41	-0.53	0.00	0.06	0.27	0.00
8	12	0.00	0.00	-0.02	-0.01	0.02	0.00	-0.27	0.01	0.00
9	6	-0.13	-0.12	-0.07	0.03	-0.03	0.00	0.00	0.01	0.00
10	6	0.00	0.00	-0.08	0.00	-0.05	0.00	0.01	0.02	0.00
11	6	-0.12	-0.09	-0.09	0.02	-0.03	0.00	0.01	0.01	0.00
12	1	-0.24	-0.20	-0.07	0.00	-0.06	0.00	0.02	0.03	0.00
13	6	0.13	0.12	-0.07	0.03	-0.03	0.00	0.00	0.01	0.00
14	1	0.00	0.00	-0.09	-0.07	-0.11	0.00	0.05	0.05	0.00
15	6	0.12	0.09	-0.09	0.01	-0.03	0.00	0.01	0.01	0.00
16	1	-0.14	-0.12	-0.07	-0.01	-0.04	-0.01	0.03	0.03	0.00
17	1	0.24	0.20	-0.07	-0.01	-0.07	0.00	0.02	0.03	0.00
18	1	0.14	0.12	-0.07	-0.01	-0.04	0.01	0.03	0.03	0.00

	22	23	24
	A	A	A
Frequencies --	362.3719	400.4457	504.8802
Red. masses --	8.0627	6.7453	5.6243
Frc consts --	0.6238	0.6373	0.8447
IR Inten --	74.6017	95.6391	62.3773

Atom	AN	X	Y	Z	X	Y	Z	X	Y	Z
1	13	0.01	-0.03	0.05	-0.02	-0.02	0.02	-0.02	0.00	0.01
2	13	-0.11	0.07	-0.08	-0.03	0.00	0.02	0.00	0.00	0.00
3	13	-0.11	0.07	0.08	-0.03	0.00	-0.02	0.00	0.00	0.00
4	13	0.01	-0.03	-0.05	-0.02	-0.02	-0.02	-0.02	0.00	-0.01
5	3	0.87	-0.44	0.00	-0.02	0.03	0.00	-0.01	-0.01	0.00
6	3	0.00	0.01	0.00	-0.14	0.42	0.00	0.81	0.18	0.00
7	3	0.00	0.04	0.00	0.83	-0.07	0.00	0.03	0.10	0.00
8	12	-0.04	0.02	0.00	0.01	-0.02	0.00	0.00	0.00	0.00
9	6	0.00	0.00	0.00	-0.01	0.00	0.00	-0.10	-0.05	0.01
10	6	0.00	0.00	0.00	0.01	0.03	0.00	-0.09	-0.05	0.00
11	6	0.00	0.00	0.00	-0.08	-0.06	0.01	-0.02	0.02	0.00
12	1	0.00	0.00	0.00	-0.05	-0.03	0.00	-0.23	-0.14	0.01
13	6	0.00	0.00	0.00	-0.01	0.00	0.00	-0.10	-0.05	-0.01
14	1	0.00	0.00	0.00	-0.01	0.02	0.00	-0.24	-0.18	0.00
15	6	0.00	0.00	0.00	-0.08	-0.06	-0.01	-0.02	0.02	0.00
16	1	0.01	0.00	0.00	-0.15	-0.11	0.02	-0.11	-0.05	0.01
17	1	0.00	0.00	0.00	-0.05	-0.03	0.00	-0.23	-0.14	-0.01
18	1	0.01	0.00	0.00	-0.15	-0.11	-0.02	-0.11	-0.05	-0.01

	25	26	27

		A			A			A		
Frequencies --		620.7023			635.7050			735.8304		
Red. masses --		5.3694			4.0360			1.2368		
Frc consts --		1.2188			0.9610			0.3946		
IR Inten --		0.0099			0.4209			0.7980		
Atom	AN	X	Y	Z	X	Y	Z	X	Y	Z
1	13	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
2	13	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
3	13	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
4	13	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
5	3	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
6	3	0.00	0.00	0.05	0.05	-0.02	0.00	0.00	0.00	0.01
7	3	0.00	0.00	0.00	0.01	0.01	0.00	0.00	0.00	0.01
8	12	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
9	6	-0.17	-0.13	0.01	0.19	0.18	-0.01	0.06	0.07	0.00
10	6	0.00	0.00	-0.02	-0.25	-0.23	0.00	0.00	0.00	0.00
11	6	0.31	0.23	-0.01	-0.08	-0.06	0.01	0.04	0.01	-0.01
12	1	-0.36	-0.30	0.01	0.31	0.29	-0.01	-0.35	-0.27	0.01
13	6	0.17	0.13	0.01	0.19	0.18	0.01	-0.06	-0.07	0.00
14	1	0.00	0.00	-0.03	-0.40	-0.37	0.00	0.00	0.00	-0.01
15	6	-0.31	-0.23	-0.01	-0.08	-0.06	-0.01	-0.04	-0.01	-0.01
16	1	0.22	0.18	-0.02	-0.16	-0.10	0.00	-0.44	-0.32	0.03
17	1	0.36	0.30	0.01	0.31	0.29	0.01	0.35	0.27	0.02
18	1	-0.22	-0.18	-0.02	-0.16	-0.10	0.00	0.44	0.32	0.03

		28			29			30		
		A			A			A		
Frequencies --		756.0050			773.7677			845.6156		
Red. masses --		1.2532			1.1540			1.4064		
Frc consts --		0.4220			0.4071			0.5925		
IR Inten --		103.2641			284.9711			0.3751		
Atom	AN	X	Y	Z	X	Y	Z	X	Y	Z
1	13	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
2	13	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
3	13	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
4	13	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
5	3	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
6	3	-0.02	0.00	0.00	-0.04	-0.03	0.00	0.00	0.00	0.00
7	3	0.00	0.00	0.00	-0.01	0.00	0.00	0.00	0.00	0.01
8	12	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
9	6	-0.01	-0.01	-0.01	0.04	0.03	0.00	-0.03	-0.06	0.05
10	6	-0.04	-0.05	0.00	0.06	0.05	0.00	0.00	0.00	0.02
11	6	0.07	0.06	0.00	0.01	0.01	0.00	0.08	-0.04	-0.06
12	1	0.05	0.05	0.00	-0.37	-0.32	0.01	0.31	0.40	0.08
13	6	-0.01	-0.01	0.01	0.04	0.03	0.00	0.03	0.06	0.05

14	1	0.28	0.24	0.00	-0.45	-0.40	0.00	0.00	0.00	-0.10
15	6	0.07	0.06	0.00	0.01	0.01	0.00	-0.08	0.04	-0.06
16	1	-0.51	-0.39	0.10	-0.21	-0.15	0.03	-0.29	-0.36	0.04
17	1	0.05	0.05	0.00	-0.37	-0.32	-0.01	-0.31	-0.40	0.08
18	1	-0.51	-0.39	-0.10	-0.21	-0.15	-0.03	0.29	0.36	0.04

	31	32	33
	A	A	A
Frequencies --	861.6209	866.4333	883.3863
Red. masses --	4.1970	2.7537	1.2352
Frc consts --	1.8358	1.2179	0.5679
IR Inten --	4.2711	0.0694	0.1247

Atom	AN	X	Y	Z	X	Y	Z	X	Y	Z
1	13	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
2	13	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
3	13	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
4	13	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
5	3	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
6	3	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.01	0.00	0.00	0.00
7	3	-0.01	0.00	0.00	0.00	0.00	0.02	0.00	0.00	0.00
8	12	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
9	6	0.00	-0.02	0.27	-0.12	0.06	-0.11	-0.05	-0.05	-0.02
10	6	-0.20	0.25	0.00	0.00	0.00	-0.09	0.09	0.04	0.00
11	6	0.10	-0.10	0.02	-0.06	0.14	0.14	0.00	0.02	-0.01
12	1	0.30	-0.11	0.18	0.33	0.15	-0.19	0.36	0.34	-0.02
13	6	0.00	-0.02	-0.27	0.12	-0.06	-0.11	-0.05	-0.05	0.02
14	1	-0.34	0.13	0.00	0.00	0.00	0.27	-0.49	-0.47	0.00
15	6	0.10	-0.10	-0.02	0.06	-0.14	0.14	0.00	0.02	0.01
16	1	-0.19	0.03	-0.34	-0.43	-0.09	0.14	-0.10	-0.08	0.03
17	1	0.30	-0.11	-0.18	-0.33	-0.15	-0.19	0.36	0.34	0.02
18	1	-0.19	0.03	0.34	0.43	0.09	0.14	-0.10	-0.08	-0.03

	34	35	36
	A	A	A
Frequencies --	1025.5390	1030.6782	1076.5841
Red. masses --	1.4805	1.4419	1.2380
Frc consts --	0.9174	0.9025	0.8454
IR Inten --	34.2844	14.5152	0.7482

Atom	AN	X	Y	Z	X	Y	Z	X	Y	Z
1	13	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
2	13	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
3	13	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
4	13	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
5	3	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
6	3	0.01	0.00	0.00	0.00	0.00	0.01	0.00	0.00	0.00
7	3	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00

8	12	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
9	6	0.03	-0.03	-0.04	-0.03	0.05	-0.09	0.04	-0.06	-0.01
10	6	-0.07	0.08	0.00	0.00	0.00	0.06	0.00	0.00	0.09
11	6	-0.03	0.03	0.10	0.05	-0.07	0.00	0.01	0.00	-0.04
12	1	0.33	-0.37	-0.19	-0.18	0.15	-0.04	0.33	-0.34	-0.14
13	6	0.03	-0.03	0.04	0.03	-0.04	-0.09	-0.04	0.06	-0.01
14	1	-0.09	0.08	0.00	0.00	0.00	0.57	0.00	0.00	0.65
15	6	-0.03	0.03	-0.10	-0.05	0.07	0.01	-0.01	0.00	-0.03
16	1	0.13	-0.12	0.39	0.29	-0.23	0.35	-0.11	0.02	-0.15
17	1	0.34	-0.37	0.19	0.18	-0.14	-0.04	-0.33	0.34	-0.14
18	1	0.13	-0.12	-0.39	-0.29	0.23	0.35	0.11	-0.02	-0.14

	37	38	39
	A	A	A
Frequencies --	1077.8816	1141.0934	1289.7403
Red. masses --	1.2464	5.7998	1.2781
Frc consts --	0.8532	4.4495	1.2526
IR Inten --	4.2110	10.2800	0.0312

Atom	AN	X	Y	Z	X	Y	Z	X	Y	Z
1	13	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
2	13	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
3	13	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
4	13	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
5	3	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
6	3	0.00	0.00	0.00	-0.01	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
7	3	0.01	0.00	0.00	0.01	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
8	12	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
9	6	0.03	-0.03	-0.04	0.05	-0.07	0.28	-0.04	0.05	0.02
10	6	0.01	-0.01	0.00	0.20	-0.23	0.00	0.00	0.00	0.07
11	6	-0.04	0.05	-0.06	-0.15	0.18	0.18	-0.03	0.03	-0.06
12	1	0.25	-0.31	-0.16	0.08	-0.03	0.32	0.27	-0.33	-0.13
13	6	0.03	-0.04	0.04	0.05	-0.07	-0.28	0.04	-0.05	0.02
14	1	0.03	0.00	0.00	0.24	-0.24	0.00	0.00	0.00	-0.44
15	6	-0.04	0.05	0.06	-0.15	0.18	-0.18	0.03	-0.03	-0.06
16	1	-0.24	0.25	-0.43	-0.16	0.26	0.14	0.18	-0.20	0.35
17	1	0.25	-0.31	0.16	0.07	-0.03	-0.32	-0.27	0.33	-0.13
18	1	-0.24	0.25	0.43	-0.16	0.26	-0.14	-0.18	0.20	0.35

	40	41	42
	A	A	A
Frequencies --	1373.7252	1386.9261	1467.7280
Red. masses --	4.4545	4.6818	2.4933
Frc consts --	4.9528	5.3060	3.1646
IR Inten --	0.0697	5.0646	3.0048

Atom	AN	X	Y	Z	X	Y	Z	X	Y	Z
1	13	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00

2	13	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
3	13	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
4	13	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
5	3	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
6	3	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.01	0.00	0.00
7	3	0.00	0.00	0.00	-0.01	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
8	12	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
9	6	0.14	-0.18	-0.15	-0.15	0.15	-0.06	0.11	-0.13	-0.10
10	6	0.00	0.00	0.31	0.10	-0.09	0.00	-0.10	0.11	0.00
11	6	-0.09	0.16	-0.01	0.11	-0.11	0.29	-0.01	0.02	0.14
12	1	-0.26	0.33	0.05	0.11	-0.10	-0.19	-0.35	0.41	0.12
13	6	-0.14	0.18	-0.15	-0.15	0.15	0.06	0.11	-0.13	0.09
14	1	0.00	0.00	-0.41	0.08	-0.11	0.00	-0.11	0.14	-0.01
15	6	0.09	-0.16	-0.01	0.11	-0.11	-0.29	-0.01	0.02	-0.13
16	1	-0.07	-0.06	0.25	-0.25	0.25	-0.37	-0.19	0.22	-0.18
17	1	0.26	-0.33	0.05	0.11	-0.10	0.19	-0.35	0.41	-0.12
18	1	0.07	0.06	0.25	-0.25	0.25	0.37	-0.19	0.22	0.17

	43	44	45
	A	A	A
Frequencies --	1469.2101	3146.0383	3162.8008
Red. masses --	2.5408	1.0875	1.0958
Frc consts --	3.2314	6.3420	6.4584
IR Inten --	0.2738	0.3072	5.1596

Atom	AN	X	Y	Z	X	Y	Z	X	Y	Z
1	13	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
2	13	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
3	13	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
4	13	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
5	3	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
6	3	0.00	0.00	0.01	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
7	3	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
8	12	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
9	6	-0.06	0.06	-0.11	0.00	0.00	-0.01	0.00	0.00	0.01
10	6	0.00	0.00	0.21	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
11	6	0.09	-0.12	0.08	-0.03	0.04	0.03	0.03	-0.04	-0.04
12	1	0.08	-0.08	-0.20	0.01	-0.02	0.08	-0.02	0.03	-0.12
13	6	0.06	-0.06	-0.11	0.00	0.00	-0.01	0.00	0.00	-0.01
14	1	0.00	0.00	-0.59	0.00	0.00	0.00	0.02	-0.02	0.00
15	6	-0.09	0.12	0.08	0.03	-0.04	0.03	0.03	-0.04	0.04
16	1	-0.13	0.15	-0.41	0.30	-0.48	-0.42	-0.29	0.47	0.42
17	1	-0.07	0.07	-0.20	-0.01	0.02	0.08	-0.02	0.02	0.12
18	1	0.13	-0.15	-0.41	-0.30	0.48	-0.42	-0.29	0.47	-0.42

	46	47	48
	A	A	A

Frequencies --		3198.7006			3214.7758			3223.9474		
Red. masses --		1.0894			1.0945			1.1023		
Frc consts --		6.5675			6.6648			6.7501		
IR Inten --		4.9561			7.3824			7.6423		
Atom	AN	X	Y	Z	X	Y	Z	X	Y	Z
1	13	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
2	13	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
3	13	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
4	13	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
5	3	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
6	3	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
7	3	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
8	12	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
9	6	0.01	-0.01	0.03	-0.01	0.01	-0.06	-0.01	0.01	-0.05
10	6	-0.05	0.05	0.00	0.00	0.00	0.00	-0.03	0.04	0.00
11	6	0.00	0.00	0.01	0.00	-0.01	0.00	0.01	-0.01	-0.01
12	1	-0.08	0.09	-0.36	0.15	-0.16	0.67	0.12	-0.13	0.56
13	6	0.01	-0.01	-0.03	0.01	-0.01	-0.06	-0.01	0.01	0.05
14	1	0.55	-0.63	0.00	0.00	0.00	-0.01	0.36	-0.40	0.00
15	6	0.00	0.01	-0.01	0.00	0.01	0.00	0.01	-0.01	0.01
16	1	0.03	-0.05	-0.05	-0.03	0.05	0.04	-0.04	0.06	0.05
17	1	-0.08	0.09	0.36	-0.15	0.15	0.67	0.12	-0.13	-0.56
18	1	0.03	-0.05	0.05	0.03	-0.05	0.04	-0.04	0.06	-0.05

$CpMgAl_4Li_3 \rightarrow CpLi + Al_4Li_2Mg$ **-20.5541364**

$CpMgAl_4Li_3 \rightarrow Cp^- + Al_4Li_3Mg^+$ **-140.3500925**

Charge = 0 Multiplicity = 1

Al,0,-0.9326166495,-1.4602630143,1.249761958

Al,0,-1.6003515571,1.2164076547,1.3332480838

Al,0,-1.6078564193,1.2138111553,-1.3401355456

Al,0,-0.9385664351,-1.4606643719,-1.2541950073

Li,0,-3.6082995793,2.4014101472,0.0011312473

Li,0,1.5420794053,-2.0982307226,-0.0234713694

Li,0,1.1764485258,0.35236406,0.0176251579

Mg,0,-3.334839833,-0.575517394,0.0035996989

C,0,2.9731351053,1.5169960892,0.067769992

C,0,3.0637512702,0.6335601554,1.1683095122

C,0,3.0348710046,0.7523263853,-1.1213813581
H,0,2.8699653222,2.5931647215,0.1255000087
C,0,3.2189785159,-0.683692638,0.660975841
H,0,3.0571813292,0.9095085207,2.2144505288
C,0,3.2004121194,-0.6098225446,-0.7587143189
H,0,3.0019556413,1.1356516256,-2.1326644984
H,0,3.4468103898,-1.5576019464,1.2671049657
H,0,3.3966759589,-1.4181378398,-1.4580338651

State=1-A\HF=-1386.0994315

		1			2			3		
		A			A			A		
Frequencies --		17.6749			33.1167			44.8570		
Red. masses --		4.1334			10.6164			9.8284		
Frc consts --		0.0008			0.0069			0.0117		
IR Inten --		0.0183			1.0450			0.0473		
Atom	AN	X	Y	Z	X	Y	Z	X	Y	Z
1	13	-0.01	0.05	-0.05	-0.08	0.16	0.01	-0.13	0.01	0.11
2	13	0.00	0.06	0.07	0.22	0.05	0.00	-0.19	0.07	0.13
3	13	0.02	-0.06	0.07	0.25	0.06	0.00	0.18	-0.07	0.13
4	13	0.01	-0.05	-0.05	-0.08	0.17	0.00	0.14	-0.02	0.11
5	3	0.01	-0.01	0.11	0.43	-0.22	-0.02	-0.01	0.01	-0.14
6	3	0.00	0.00	0.00	-0.02	0.00	0.00	0.00	0.01	0.36
7	3	-0.01	0.00	-0.11	-0.17	-0.01	0.00	0.00	0.00	0.12
8	12	0.00	0.00	-0.03	0.07	-0.13	0.00	0.00	0.01	-0.27
9	6	-0.02	-0.01	-0.20	-0.24	-0.11	0.01	0.01	0.00	-0.12
10	6	-0.09	-0.18	-0.06	-0.19	-0.10	0.00	0.18	0.00	-0.13
11	6	0.06	0.17	-0.08	-0.21	-0.13	0.00	-0.16	0.01	-0.12
12	1	-0.03	-0.02	-0.38	-0.31	-0.10	0.03	0.02	0.00	-0.10
13	6	-0.05	-0.11	0.16	-0.13	-0.11	-0.02	0.10	0.00	-0.15
14	1	-0.16	-0.35	-0.10	-0.20	-0.08	0.00	0.34	0.00	-0.13
15	6	0.05	0.12	0.15	-0.14	-0.13	-0.02	-0.11	0.00	-0.15
16	1	0.13	0.33	-0.14	-0.24	-0.14	0.01	-0.32	0.01	-0.12
17	1	-0.11	-0.20	0.31	-0.08	-0.12	-0.03	0.22	0.00	-0.18
18	1	0.12	0.22	0.29	-0.11	-0.15	-0.03	-0.24	0.01	-0.17

		4			5			6		
		A			A			A		
Frequencies --		61.6974			86.9929			90.1789		
Red. masses --		5.6904			14.6435			8.5128		
Frc consts --		0.0128			0.0653			0.0408		
IR Inten --		0.0283			3.5534			4.2299		
Atom	AN	X	Y	Z	X	Y	Z	X	Y	Z
1	13	0.01	-0.08	0.10	-0.06	-0.01	0.13	0.12	-0.08	0.02
2	13	0.02	0.01	0.06	0.34	0.12	-0.11	0.06	-0.13	-0.03

3	13	-0.02	-0.01	0.06	-0.34	-0.10	-0.11	0.02	-0.13	0.00
4	13	-0.01	0.07	0.10	0.05	0.03	0.13	0.15	-0.11	-0.02
5	3	-0.01	0.00	0.05	0.02	-0.02	0.51	-0.17	0.14	0.03
6	3	0.00	0.01	0.00	0.00	-0.01	-0.02	0.05	0.13	0.05
7	3	0.00	0.01	-0.44	0.01	-0.01	0.23	-0.21	0.18	0.00
8	12	0.00	0.00	-0.16	-0.01	-0.01	-0.35	0.20	0.11	0.01
9	6	-0.02	0.01	0.03	0.02	-0.01	0.00	-0.33	0.11	0.01
10	6	-0.23	0.08	-0.02	0.14	-0.05	0.03	-0.22	0.10	0.00
11	6	0.22	-0.07	-0.01	-0.12	0.03	0.03	-0.25	0.10	0.00
12	1	-0.04	0.01	0.09	0.03	-0.01	-0.03	-0.48	0.12	0.01
13	6	-0.12	0.05	-0.08	0.07	-0.03	0.06	-0.05	0.08	-0.01
14	1	-0.44	0.16	0.00	0.25	-0.09	0.01	-0.26	0.11	0.00
15	6	0.15	-0.05	-0.08	-0.09	0.02	0.06	-0.06	0.08	0.00
16	1	0.42	-0.15	0.01	-0.23	0.07	0.01	-0.30	0.10	0.00
17	1	-0.19	0.08	-0.10	0.11	-0.05	0.07	0.07	0.06	-0.01
18	1	0.26	-0.09	-0.10	-0.15	0.04	0.07	0.03	0.05	-0.01

	7	8	9
	A	A	A
Frequencies --	100.9090	118.9206	142.3218
Red. masses --	9.7056	5.6951	13.7352
Frc consts --	0.0582	0.0475	0.1639
IR Inten --	3.1730	8.3144	4.8326

Atom	AN	X	Y	Z	X	Y	Z	X	Y	Z
1	13	-0.18	0.13	-0.06	-0.05	0.05	0.02	0.20	-0.28	-0.21
2	13	0.07	0.03	-0.08	0.04	-0.07	-0.04	0.05	0.04	0.11
3	13	-0.08	0.01	-0.09	0.03	-0.08	0.04	-0.05	-0.04	0.11
4	13	0.16	-0.12	-0.05	-0.03	0.04	-0.03	-0.20	0.28	-0.21
5	3	0.03	-0.02	0.20	-0.11	0.10	0.02	-0.02	0.02	0.03
6	3	-0.01	0.02	0.80	-0.18	-0.08	0.06	-0.01	0.02	0.71
7	3	0.02	0.01	-0.24	0.00	-0.26	-0.03	0.00	0.02	-0.01
8	12	-0.04	-0.02	0.18	0.19	0.15	0.00	0.00	0.00	-0.08
9	6	0.00	-0.01	0.01	0.22	-0.03	0.00	-0.01	0.00	0.05
10	6	-0.06	0.03	-0.02	0.03	-0.01	0.00	0.08	0.00	0.04
11	6	0.09	-0.05	-0.02	0.07	-0.02	0.00	-0.08	0.00	0.04
12	1	-0.01	-0.01	0.05	0.45	-0.05	0.00	-0.02	0.00	0.06
13	6	-0.01	0.01	-0.07	-0.25	0.02	0.00	0.06	0.00	0.03
14	1	-0.13	0.07	-0.01	0.08	-0.01	0.00	0.15	0.00	0.04
15	6	0.08	-0.04	-0.07	-0.23	0.01	0.00	-0.05	0.00	0.03
16	1	0.15	-0.09	-0.01	0.15	-0.03	0.00	-0.16	0.00	0.04
17	1	0.06	0.02	-0.09	-0.45	0.06	0.01	0.18	-0.02	0.01
18	1	0.04	-0.05	-0.08	-0.42	0.05	-0.01	-0.14	0.01	0.02

	10	11	12
	A	A	A
Frequencies --	157.5688	160.5311	174.4550

Red. masses --		8.6676			9.2534			21.3520		
Frc consts --		0.1268			0.1405			0.3829		
IR Inten --		7.9308			13.6015			0.6528		
Atom	AN	X	Y	Z	X	Y	Z	X	Y	Z
1	13	0.19	-0.15	-0.03	0.00	-0.04	-0.02	0.25	0.00	0.15
2	13	-0.03	0.16	0.05	0.18	0.04	0.01	-0.26	0.35	-0.28
3	13	-0.03	0.16	-0.04	0.19	0.03	-0.02	0.25	-0.35	-0.29
4	13	0.19	-0.14	0.02	0.00	-0.05	0.03	-0.24	-0.01	0.15
5	3	0.34	-0.16	-0.01	-0.51	0.63	0.00	0.02	-0.02	0.49
6	3	-0.11	0.04	0.01	-0.11	0.16	-0.01	-0.01	-0.01	0.18
7	3	0.02	-0.04	-0.01	0.19	0.21	0.01	-0.01	-0.01	-0.05
8	12	-0.11	-0.01	0.00	-0.20	-0.14	0.00	0.00	0.01	0.11
9	6	0.08	-0.01	0.00	0.04	-0.05	0.00	-0.01	0.00	0.01
10	6	-0.07	0.01	0.00	-0.01	-0.05	0.00	-0.03	0.01	0.00
11	6	-0.05	0.00	0.00	0.00	-0.05	0.00	0.02	-0.01	0.00
12	1	0.25	-0.02	0.00	0.08	-0.06	0.00	-0.01	0.00	0.02
13	6	-0.29	0.03	0.00	-0.10	-0.04	0.00	-0.01	0.01	-0.01
14	1	-0.03	0.01	0.00	-0.01	-0.05	0.00	-0.05	0.02	0.01
15	6	-0.28	0.02	0.00	-0.09	-0.04	0.00	0.01	0.00	0.00
16	1	0.00	0.00	0.00	0.01	-0.05	0.00	0.04	-0.01	0.01
17	1	-0.46	0.06	0.01	-0.17	-0.03	0.01	-0.01	0.01	-0.01
18	1	-0.45	0.06	-0.01	-0.16	-0.03	0.00	0.02	-0.01	-0.01

			13			14			15	
			A			A			A	
Frequencies --		204.2204			211.2206			216.7751		
Red. masses --		12.1316			7.8634			16.1762		
Frc consts --		0.2981			0.2067			0.4479		
IR Inten --		0.9992			29.7071			5.7975		
Atom	AN	X	Y	Z	X	Y	Z	X	Y	Z
1	13	-0.21	-0.23	-0.08	-0.06	-0.04	0.02	0.16	0.24	-0.02
2	13	-0.14	-0.07	-0.02	-0.03	-0.05	-0.07	-0.20	-0.07	0.12
3	13	0.14	0.08	-0.03	-0.02	-0.05	0.07	-0.20	-0.07	-0.13
4	13	0.21	0.23	-0.07	-0.05	-0.02	-0.02	0.15	0.24	0.03
5	3	-0.01	0.01	0.82	0.18	-0.20	0.02	-0.28	-0.05	0.00
6	3	0.01	-0.03	-0.26	-0.04	0.55	-0.02	0.17	0.28	0.00
7	3	-0.02	-0.02	0.05	0.38	0.57	0.02	0.14	0.23	-0.01
8	12	0.00	-0.01	0.07	0.01	0.16	0.00	0.21	-0.44	0.00
9	6	0.00	0.00	-0.01	0.04	-0.09	0.00	0.08	-0.04	0.00
10	6	0.00	0.00	-0.01	0.03	-0.10	0.00	0.00	-0.03	0.00
11	6	-0.01	0.01	-0.01	0.03	-0.09	0.00	0.01	-0.03	0.00
12	1	0.00	0.00	-0.02	0.02	-0.09	-0.01	0.16	-0.04	0.00
13	6	0.00	0.00	0.00	-0.05	-0.08	0.00	-0.15	-0.02	0.00
14	1	0.01	0.00	-0.01	0.01	-0.10	0.00	0.00	-0.03	0.00
15	6	0.00	0.01	0.00	-0.04	-0.08	0.00	-0.14	-0.02	0.00

16	1	-0.01	0.01	-0.01	0.01	-0.09	0.00	0.02	-0.04	0.00
17	1	-0.01	0.00	0.00	-0.08	-0.08	0.01	-0.25	0.00	0.02
18	1	0.01	0.01	0.00	-0.07	-0.08	-0.01	-0.25	0.00	-0.01

	16	17	18
	A	A	A
Frequencies --	229.6522	244.2035	273.8588
Red. masses --	16.7504	21.5342	20.1931
Frc consts --	0.5205	0.7566	0.8923
IR Inten --	2.7397	16.4466	2.1197

Atom	AN	X	Y	Z	X	Y	Z	X	Y	Z
1	13	0.22	0.21	0.00	-0.18	-0.12	-0.05	-0.12	-0.18	0.08
2	13	-0.10	-0.34	-0.02	0.00	0.03	0.52	-0.08	0.30	-0.21
3	13	0.10	0.34	-0.01	-0.01	0.04	-0.52	-0.08	0.30	0.21
4	13	-0.21	-0.21	0.00	-0.18	-0.13	0.05	-0.12	-0.18	-0.08
5	3	0.00	-0.01	0.65	0.28	0.34	0.00	-0.09	0.19	0.01
6	3	-0.01	0.01	0.23	-0.11	0.10	0.00	-0.37	-0.01	0.00
7	3	0.00	0.00	-0.04	0.06	0.08	0.01	0.11	0.08	0.06
8	12	0.00	0.00	-0.26	0.28	0.11	0.00	0.50	-0.30	-0.01
9	6	0.00	0.00	0.02	0.00	-0.02	0.00	-0.05	-0.01	-0.01
10	6	0.03	0.00	0.01	0.02	-0.02	0.00	-0.01	-0.01	-0.01
11	6	-0.03	0.00	0.01	0.02	-0.02	0.00	0.01	-0.01	-0.01
12	1	0.00	0.00	0.02	-0.04	-0.02	0.00	-0.14	0.00	-0.01
13	6	0.02	0.00	0.01	0.05	-0.02	0.00	0.06	-0.01	-0.01
14	1	0.06	0.00	0.01	0.03	-0.02	0.00	-0.03	-0.02	-0.01
15	6	-0.02	0.00	0.01	0.05	-0.02	0.00	0.08	-0.02	0.00
16	1	-0.06	0.00	0.01	0.01	-0.02	0.00	-0.01	-0.01	0.00
17	1	0.06	-0.01	0.00	0.08	-0.03	0.00	0.12	-0.03	-0.02
18	1	-0.06	0.00	0.00	0.08	-0.02	0.01	0.15	-0.03	0.01

	19	20	21
	A	A	A
Frequencies --	291.6812	330.1923	344.2823
Red. masses --	5.9328	12.4279	9.8161
Frc consts --	0.2974	0.7983	0.6855
IR Inten --	0.2520	29.2836	25.4782

Atom	AN	X	Y	Z	X	Y	Z	X	Y	Z
1	13	0.02	0.00	-0.01	0.09	0.05	0.34	-0.05	-0.05	0.27
2	13	0.01	-0.01	0.01	0.02	-0.01	0.10	0.01	0.04	0.02
3	13	0.00	0.00	0.00	0.02	-0.01	-0.11	0.01	0.04	-0.02
4	13	-0.01	0.01	-0.01	0.09	0.05	-0.34	-0.06	-0.05	-0.27
5	3	0.00	-0.01	0.01	-0.19	-0.25	0.00	0.00	0.07	0.00
6	3	-0.03	-0.01	0.11	-0.70	-0.13	-0.02	0.75	0.32	0.01
7	3	0.01	-0.01	0.72	0.14	0.06	-0.03	-0.26	-0.14	0.03
8	12	-0.01	0.01	-0.02	-0.08	0.02	0.00	-0.03	-0.03	0.00
9	6	-0.01	0.00	-0.08	-0.06	-0.01	0.00	0.08	0.00	0.00

10	6	-0.19	0.02	-0.07	0.02	-0.01	0.00	0.00	0.00	0.00
11	6	0.18	-0.01	-0.08	-0.01	-0.01	0.00	0.03	0.00	0.00
12	1	-0.02	0.00	-0.09	-0.14	0.00	0.00	0.20	-0.01	0.00
13	6	-0.14	0.02	-0.09	0.09	-0.01	0.00	-0.07	0.00	0.00
14	1	-0.33	0.04	-0.07	0.01	-0.01	0.00	0.04	0.00	0.00
15	6	0.16	-0.02	-0.09	0.07	-0.01	0.01	-0.06	0.00	0.00
16	1	0.31	-0.03	-0.07	-0.04	0.00	0.00	0.08	-0.01	0.00
17	1	-0.17	0.02	-0.07	0.14	-0.02	-0.02	-0.12	0.01	0.02
18	1	0.21	-0.02	-0.07	0.13	-0.01	0.03	-0.12	0.00	-0.02

	22	23	24
	A	A	A
Frequencies --	360.1130	368.2672	487.5687
Red. masses --	8.1543	6.6570	5.7079
Frc consts --	0.6230	0.5319	0.7995
IR Inten --	40.8790	70.9411	84.9451

Atom	AN	X	Y	Z	X	Y	Z	X	Y	Z
1	13	0.02	0.04	0.08	0.03	0.01	-0.04	-0.01	0.00	0.01
2	13	-0.08	-0.09	-0.06	0.00	-0.01	-0.01	0.00	0.00	0.00
3	13	-0.08	-0.09	0.06	-0.01	-0.01	0.01	0.00	0.00	0.00
4	13	0.02	0.04	-0.08	0.03	0.01	0.04	-0.01	0.00	-0.01
5	3	0.66	0.68	0.00	0.04	0.06	0.00	-0.01	-0.01	0.00
6	3	-0.11	-0.12	0.00	-0.32	0.69	-0.02	0.13	0.09	0.00
7	3	0.06	0.04	0.00	-0.29	-0.46	0.00	0.68	-0.46	-0.01
8	12	-0.05	-0.07	0.00	-0.02	-0.02	0.00	0.00	0.00	0.00
9	6	-0.02	0.00	0.00	0.00	-0.03	0.00	-0.10	0.03	0.00
10	6	0.00	0.00	0.00	0.03	-0.02	0.00	-0.12	0.05	0.01
11	6	-0.01	0.00	0.00	0.01	-0.02	0.00	-0.12	0.04	-0.01
12	1	-0.03	0.01	0.00	0.04	-0.03	0.00	-0.29	0.05	0.00
13	6	0.01	0.00	0.00	0.09	-0.02	0.00	0.02	0.03	0.00
14	1	-0.01	0.00	0.00	0.09	-0.03	0.00	-0.27	0.07	0.01
15	6	0.01	0.00	0.00	0.09	-0.02	0.01	0.00	0.03	0.00
16	1	-0.01	0.00	0.00	0.06	-0.02	0.00	-0.27	0.07	-0.01
17	1	0.01	0.00	0.00	0.20	-0.05	-0.01	-0.06	0.04	0.01
18	1	0.01	0.00	0.00	0.19	-0.04	0.02	-0.08	0.04	-0.01

	25	26	27
	A	A	A
Frequencies --	619.2202	636.0379	724.8341
Red. masses --	5.2888	3.8881	1.2301
Frc consts --	1.1948	0.9267	0.3808
IR Inten --	0.3581	0.3999	2.8526

Atom	AN	X	Y	Z	X	Y	Z	X	Y	Z
1	13	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
2	13	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
3	13	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00

4	13	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
5	3	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
6	3	-0.01	0.01	0.00	-0.02	-0.01	0.00	0.00	0.00	0.02
7	3	-0.01	0.01	0.05	-0.03	0.06	0.00	0.00	0.00	0.01
8	12	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
9	6	0.01	0.00	-0.02	0.34	-0.02	0.00	0.00	0.00	0.00
10	6	-0.21	0.03	0.01	-0.25	0.01	0.01	0.09	0.00	0.00
11	6	0.20	-0.03	0.01	-0.26	0.01	-0.01	-0.09	0.00	0.00
12	1	0.02	-0.01	-0.03	0.57	-0.04	0.00	0.01	0.00	-0.01
13	6	0.39	-0.07	-0.01	0.08	-0.01	-0.01	0.04	-0.02	-0.01
14	1	-0.50	0.06	0.02	-0.39	0.03	0.01	-0.40	0.06	0.02
15	6	-0.38	0.06	0.00	0.10	-0.01	0.01	-0.02	0.02	-0.01
16	1	0.48	-0.06	0.01	-0.42	0.03	-0.01	0.38	-0.06	0.01
17	1	0.23	-0.03	-0.02	0.18	-0.05	0.00	-0.64	0.11	0.05
18	1	-0.26	0.03	-0.01	0.20	-0.05	0.00	0.49	-0.07	0.02

	28	29	30
	A	A	A
Frequencies --	740.0310	769.5064	837.9271
Red. masses --	1.2454	1.1626	1.3007
Frc consts --	0.4018	0.4056	0.5381
IR Inten --	112.4925	312.8285	1.5136

Atom	AN	X	Y	Z	X	Y	Z	X	Y	Z
1	13	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
2	13	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
3	13	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
4	13	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
5	3	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
6	3	-0.01	0.01	0.00	-0.01	0.01	0.00	0.00	0.00	0.01
7	3	-0.02	0.01	0.00	-0.05	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
8	12	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
9	6	-0.05	0.00	0.00	0.08	-0.01	0.00	0.00	0.00	0.01
10	6	-0.03	0.00	0.00	0.05	-0.01	0.00	-0.07	0.00	0.04
11	6	-0.01	0.00	0.00	0.06	-0.01	0.00	0.07	0.01	0.03
12	1	0.27	-0.03	0.00	-0.64	0.05	0.01	-0.03	0.00	-0.07
13	6	0.09	-0.01	0.00	0.00	0.00	0.00	0.03	-0.07	-0.04
14	1	0.07	0.00	0.00	-0.50	0.05	0.02	0.54	0.04	0.05
15	6	0.10	-0.01	0.00	0.01	0.00	0.00	-0.03	0.06	-0.05
16	1	-0.05	0.01	0.00	-0.51	0.05	-0.01	-0.54	-0.03	0.06
17	1	-0.61	0.10	0.10	-0.15	0.03	0.02	-0.42	-0.02	0.05
18	1	-0.70	0.10	-0.09	-0.19	0.03	-0.02	0.45	0.02	0.04

	31	32	33
	A	A	A
Frequencies --	860.1600	864.9471	882.6451
Red. masses --	4.1225	3.3511	1.2513

Frc consts --	1.7971			1.4771			0.5743		
IR Inten --	3.2857			0.1375			0.2110		
Atom AN	X	Y	Z	X	Y	Z	X	Y	Z
1 13	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
2 13	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
3 13	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
4 13	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
5 3	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
6 3	0.00	0.01	0.00	0.00	0.00	-0.02	0.00	0.00	0.00
7 3	-0.01	0.00	0.00	0.00	0.00	-0.01	0.00	0.00	0.00
8 12	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
9 6	0.04	0.31	-0.01	0.00	0.00	0.10	-0.10	0.04	0.00
10 6	-0.01	-0.01	0.27	0.03	-0.14	0.13	0.07	0.00	0.02
11 6	-0.02	-0.02	-0.26	-0.03	0.15	0.13	0.07	-0.01	-0.03
12 1	-0.18	0.33	-0.03	0.03	-0.03	-0.31	0.69	-0.03	-0.01
13 6	0.00	-0.15	0.02	-0.06	-0.18	-0.16	-0.02	-0.01	0.01
14 1	0.11	-0.28	0.20	-0.28	0.18	0.22	-0.48	0.02	0.03
15 6	0.00	-0.14	-0.02	0.05	0.17	-0.18	-0.02	-0.01	-0.01
16 1	0.13	-0.30	-0.16	0.27	-0.14	0.24	-0.50	0.02	-0.02
17 1	-0.08	0.14	-0.36	0.30	-0.29	-0.13	0.11	-0.01	-0.03
18 1	-0.10	0.19	0.33	-0.29	0.27	-0.16	0.13	-0.02	0.03

		34			35			36		
		A			A			A		
Frequencies --	1025.6534			1027.6063			1075.8291		
Red. masses --	1.4735			1.4433			1.2401		
Frc consts --	0.9133			0.8980			0.8457		
IR Inten --	13.3096			12.4096			0.1968		
Atom AN	X	Y	Z	X	Y	Z	X	Y	Z
1 13	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
2 13	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
3 13	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
4 13	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
5 3	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
6 3	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
7 3	0.00	-0.01	0.00	0.00	0.00	0.01	0.00	0.00	0.00
8 12	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
9 6	0.01	0.11	-0.01	0.00	0.02	0.06	0.00	0.00	0.09
10 6	-0.01	-0.05	-0.02	0.01	0.05	-0.09	-0.01	-0.08	-0.02
11 6	0.00	-0.03	0.05	-0.01	-0.07	-0.08	0.01	0.06	-0.01
12 1	-0.01	0.11	-0.08	0.01	0.04	0.53	0.01	0.02	0.66
13 6	0.01	0.06	0.09	-0.02	-0.08	0.02	0.01	0.00	-0.04
14 1	-0.04	-0.54	-0.16	-0.02	0.18	-0.06	-0.03	-0.54	-0.14
15 6	0.00	0.03	-0.10	0.02	0.09	-0.01	-0.01	0.02	-0.02
16 1	-0.03	-0.45	0.21	0.01	-0.31	0.01	0.00	0.37	-0.13

17	1	0.01	-0.11	0.34	0.05	-0.39	0.43	-0.05	0.14	-0.22
18	1	0.01	-0.25	-0.42	-0.03	0.36	0.28	0.05	0.00	-0.04

	37	38	39
	A	A	A
Frequencies --	1076.3726	1141.2307	1288.4786
Red. masses --	1.2487	5.8165	1.2790
Frc consts --	0.8524	4.4633	1.2510
IR Inten --	1.4925	7.8272	0.0054

Atom	AN	X	Y	Z	X	Y	Z	X	Y	Z
1	13	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
2	13	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
3	13	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
4	13	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
5	3	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
6	3	-0.01	0.00	0.00	-0.01	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
7	3	0.00	0.00	0.00	0.01	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
8	12	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
9	6	0.01	0.02	0.02	0.03	0.30	-0.01	0.00	0.00	0.07
10	6	0.00	0.03	0.04	0.01	0.08	-0.29	0.01	0.06	0.02
11	6	0.01	0.06	-0.05	0.02	0.10	0.28	-0.01	-0.06	0.03
12	1	-0.02	0.03	0.13	0.00	0.33	0.00	-0.01	-0.02	-0.44
13	6	-0.01	-0.06	0.05	-0.02	-0.24	-0.17	0.01	0.04	-0.06
14	1	0.05	0.29	0.11	-0.04	0.02	-0.34	-0.05	-0.43	-0.11
15	6	-0.01	-0.06	-0.06	-0.02	-0.22	0.19	-0.01	-0.05	-0.05
16	1	0.06	0.47	-0.21	-0.03	0.08	0.33	0.05	0.41	-0.15
17	1	-0.01	-0.31	0.40	-0.07	-0.28	-0.16	-0.01	-0.25	0.36
18	1	0.00	-0.39	-0.43	-0.07	-0.27	0.17	0.02	0.28	0.34

	40	41	42
	A	A	A
Frequencies --	1372.4023	1386.0790	1466.7361
Red. masses --	4.4263	4.7530	2.5337
Frc consts --	4.9119	5.3801	3.2115
IR Inten --	0.1310	3.3422	0.3056

Atom	AN	X	Y	Z	X	Y	Z	X	Y	Z
1	13	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
2	13	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
3	13	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
4	13	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
5	3	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
6	3	0.00	0.00	0.00	0.00	0.01	0.00	0.00	0.00	0.00
7	3	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
8	12	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
9	6	0.00	0.01	0.30	0.01	-0.14	0.00	0.00	-0.02	0.21
10	6	-0.03	-0.23	-0.14	0.00	0.22	-0.07	0.01	0.11	-0.09

11	6	0.03	0.23	-0.16	0.00	0.21	0.05	0.00	-0.05	-0.13
12	1	-0.01	-0.02	-0.38	-0.02	-0.15	0.01	-0.01	-0.07	-0.58
13	6	0.05	0.17	-0.01	0.00	-0.15	0.30	-0.02	-0.14	0.05
14	1	0.06	0.43	0.03	0.00	-0.19	-0.19	-0.01	-0.23	-0.21
15	6	-0.05	-0.18	0.00	-0.01	-0.16	-0.28	0.02	0.14	0.10
16	1	-0.06	-0.43	0.08	0.00	-0.15	0.20	-0.02	-0.04	-0.16
17	1	-0.09	0.02	0.26	0.00	0.34	-0.38	0.01	0.11	-0.35
18	1	0.09	0.02	0.27	0.02	0.37	0.33	-0.03	-0.29	-0.42

	43	44	45
	A	A	A
Frequencies --	1468.3858	3141.5600	3162.7842
Red. masses --	2.5097	1.0878	1.0954
Frc consts --	3.1882	6.3255	6.4557
IR Inten --	0.6932	1.6836	6.0030

Atom	AN	X	Y	Z	X	Y	Z	X	Y	Z
1	13	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
2	13	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
3	13	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
4	13	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
5	3	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
6	3	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
7	3	0.00	-0.01	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
8	12	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
9	6	0.01	0.14	0.04	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
10	6	-0.02	-0.15	-0.11	0.00	0.00	-0.01	0.00	0.00	-0.01
11	6	-0.02	-0.18	0.08	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.01
12	1	0.02	0.16	-0.15	0.00	0.00	0.00	0.00	0.02	0.00
13	6	0.00	-0.01	0.15	0.01	0.06	0.04	0.01	0.03	0.03
14	1	0.05	0.50	0.04	0.00	-0.02	0.09	0.00	-0.02	0.09
15	6	0.01	0.05	-0.12	-0.01	-0.03	0.02	0.01	0.06	-0.05
16	1	0.05	0.54	-0.19	0.00	0.02	0.05	0.00	-0.05	-0.14
17	1	0.02	0.31	-0.28	-0.18	-0.69	-0.48	-0.10	-0.38	-0.27
18	1	0.02	0.24	0.07	0.09	0.37	-0.31	-0.15	-0.64	0.55

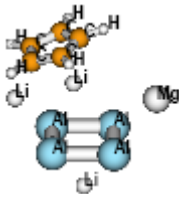
	46	47	48
	A	A	A
Frequencies --	3199.9658	3216.0052	3225.0654
Red. masses --	1.0894	1.0945	1.1022
Frc consts --	6.5723	6.6696	6.7544
IR Inten --	1.9946	5.5395	3.0097

Atom	AN	X	Y	Z	X	Y	Z	X	Y	Z
1	13	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
2	13	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
3	13	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
4	13	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00

5	3	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
6	3	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
7	3	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
8	12	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
9	6	-0.01	-0.07	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.05	0.00
10	6	0.00	0.01	-0.03	0.00	-0.02	0.06	0.00	0.01	-0.05
11	6	0.00	0.01	0.03	0.00	0.02	0.06	0.00	0.02	0.05
12	1	0.07	0.83	-0.04	0.00	0.02	0.01	-0.04	-0.54	0.03
13	6	0.00	-0.01	0.00	0.00	0.01	0.00	0.00	-0.01	0.00
14	1	0.00	-0.10	0.37	0.00	0.19	-0.69	0.00	-0.15	0.55
15	6	0.00	-0.01	0.01	0.00	-0.01	0.00	0.00	-0.01	0.01
16	1	-0.01	-0.13	-0.34	-0.02	-0.24	-0.65	-0.02	-0.21	-0.56
17	1	0.01	0.05	0.04	-0.01	-0.06	-0.04	0.02	0.07	0.04
18	1	0.01	0.06	-0.05	0.01	0.06	-0.05	0.02	0.07	-0.06

$CpMgAl_4Li_3 \rightarrow CpLi + Al_4Li_2Mg$ **-16.8208942**

$CpMgAl_4Li_3 \rightarrow Cp^- + Al_4Li_3Mg^+$ **-136.6168503**



Charge = 0 Multiplicity = 1

Al,0,-1.6445324305,-0.7343714698,1.6004774822
Al,0,0.2662230907,-2.3905187974,1.0231350441
Al,0,-0.3144741736,-2.0966751947,-1.5276686393
Al,0,-2.2046406867,-0.4522340497,-0.8581412244
Li,0,-1.8417009697,1.9132978022,0.6385727669
Li,0,-2.2949428534,-3.1121663051,0.1640991962
Li,0,0.4490838441,0.8986929142,-0.0004141023
Mg,0,2.5641401271,-1.8850016076,-0.7997873237
C,0,1.9847370965,2.3981786803,-0.180027007
C,0,0.9667124632,2.7758259866,-1.0861716087
C,0,1.4770788299,2.518070776,1.1345675392
H,0,2.9820900758,2.0728745777,-0.4470037433
C,0,-0.1696458715,3.1638410176,-0.3306916306
H,0,1.0445347853,2.8016405564,-2.1649380744
C,0,0.1470868905,3.0038658875,1.047456645
H,0,2.0135388649,2.312190919,2.0512523635
H,0,-1.0625278466,3.6215418023,-0.7503158306
H,0,-0.4539393184,3.3129977637,1.8994413456

State=1-A\HF=-1386.1110748

1 2 3

			A			A			A	
Frequencies --			23.0684			46.1338			47.5759	
Red. masses --			4.0522			11.9090			10.2967	
Frc consts --			0.0013			0.0149			0.0137	
IR Inten --			0.0155			0.9414			0.0148	
Atom	AN	X	Y	Z	X	Y	Z	X	Y	Z
1	13	0.02	0.04	-0.03	-0.08	-0.15	0.00	0.15	-0.02	0.14
2	13	0.03	0.04	0.02	0.16	-0.01	0.00	0.22	0.01	-0.08
3	13	-0.03	-0.04	0.02	0.16	-0.01	0.00	-0.22	-0.01	-0.07
4	13	-0.01	-0.04	-0.03	-0.07	-0.15	0.00	-0.15	0.02	0.14
5	3	0.00	0.00	0.03	-0.05	0.03	0.00	0.00	0.00	0.36
6	3	0.00	0.00	-0.09	-0.07	0.16	0.00	0.00	0.00	-0.33
7	3	0.00	0.00	-0.09	-0.16	0.02	0.00	0.00	0.00	0.02
8	12	0.00	0.00	0.13	0.42	-0.11	0.00	0.00	0.00	0.22
9	6	0.00	0.00	-0.22	-0.24	0.14	0.00	0.00	0.00	-0.08
10	6	-0.07	0.18	-0.09	-0.21	0.15	0.00	0.13	-0.04	-0.12
11	6	0.07	-0.18	-0.09	-0.21	0.15	0.00	-0.13	0.04	-0.12
12	1	0.00	0.00	-0.40	-0.28	0.14	0.00	0.00	0.00	-0.02
13	6	-0.04	0.11	0.14	-0.16	0.15	0.00	0.08	-0.03	-0.19
14	1	-0.13	0.35	-0.14	-0.23	0.15	0.00	0.25	-0.08	-0.10
15	6	0.04	-0.11	0.14	-0.16	0.15	0.00	-0.08	0.03	-0.19
16	1	0.13	-0.35	-0.14	-0.22	0.15	0.00	-0.25	0.08	-0.10
17	1	-0.11	0.21	0.29	-0.13	0.16	0.00	0.20	-0.04	-0.25
18	1	0.11	-0.21	0.29	-0.13	0.16	0.00	-0.21	0.04	-0.25

			4			5			6	
			A			A			A	
Frequencies --			69.0564			72.8895			85.9894	
Red. masses --			5.9147			18.4976			10.2508	
Frc consts --			0.0166			0.0579			0.0447	
IR Inten --			0.8099			0.7026			0.9016	
Atom	AN	X	Y	Z	X	Y	Z	X	Y	Z
1	13	-0.06	-0.09	0.08	0.01	-0.16	-0.01	0.06	0.06	0.01
2	13	0.03	-0.06	-0.06	0.34	0.00	0.00	0.07	0.08	0.24
3	13	-0.03	0.06	-0.06	0.34	0.01	-0.01	-0.06	-0.07	0.24
4	13	0.06	0.09	0.08	0.01	-0.16	0.01	-0.06	-0.07	0.01
5	3	0.00	0.00	-0.23	-0.01	-0.12	0.00	0.00	0.00	0.19
6	3	0.00	0.00	-0.02	-0.07	0.46	0.01	0.00	0.00	-0.45
7	3	0.00	0.00	-0.38	-0.06	-0.05	0.00	0.00	0.00	-0.34
8	12	0.00	0.00	0.16	-0.46	0.38	0.00	-0.01	-0.01	-0.30
9	6	0.00	0.00	0.03	-0.08	-0.04	0.00	0.00	0.00	0.01
10	6	-0.23	-0.07	0.00	-0.09	-0.04	0.00	-0.17	-0.07	-0.02
11	6	0.23	0.07	0.00	-0.09	-0.04	0.00	0.17	0.07	-0.02
12	1	0.00	0.00	0.07	-0.08	-0.04	0.00	0.00	0.00	0.06
13	6	-0.14	-0.04	-0.04	-0.12	-0.04	0.00	-0.10	-0.04	-0.08

14	1	-0.43	-0.13	0.02	-0.10	-0.04	0.00	-0.31	-0.13	-0.01
15	6	0.14	0.04	-0.04	-0.12	-0.04	0.00	0.10	0.04	-0.08
16	1	0.43	0.13	0.01	-0.09	-0.04	0.00	0.31	0.13	-0.01
17	1	-0.26	-0.07	-0.04	-0.13	-0.05	0.00	-0.15	-0.07	-0.10
18	1	0.26	0.07	-0.04	-0.13	-0.04	0.00	0.15	0.07	-0.10

		7			8			9		
		A			A			A		
Frequencies --		96.3295			118.8113			123.0025		
Red. masses --		7.2178			11.2471			11.9362		
Frc consts --		0.0395			0.0935			0.1064		
IR Inten --		5.9990			3.3776			2.1173		
Atom	AN	X	Y	Z	X	Y	Z	X	Y	Z
1	13	0.16	0.11	-0.01	-0.07	0.12	0.24	0.09	0.24	0.10
2	13	-0.01	0.02	0.01	-0.08	0.14	-0.09	-0.16	0.08	-0.15
3	13	-0.01	0.02	-0.01	0.09	-0.13	-0.09	0.15	-0.10	-0.16
4	13	0.16	0.11	0.01	0.07	-0.12	0.24	-0.09	-0.25	0.10
5	3	0.09	-0.15	0.00	0.00	0.00	-0.59	-0.01	0.00	0.51
6	3	0.17	-0.18	0.00	0.00	0.00	-0.58	0.00	-0.03	0.44
7	3	-0.15	-0.25	0.00	0.00	0.00	0.18	0.01	0.01	-0.26
8	12	0.06	0.11	0.00	0.00	-0.01	-0.08	0.01	0.03	0.01
9	6	-0.34	-0.11	0.00	0.00	0.00	-0.02	0.02	0.00	0.00
10	6	-0.22	-0.10	0.00	0.06	0.03	0.01	-0.12	-0.04	-0.02
11	6	-0.22	-0.09	0.00	-0.06	-0.03	0.01	0.13	0.04	-0.02
12	1	-0.51	-0.13	0.00	0.00	0.00	-0.05	0.03	0.01	0.03
13	6	0.00	-0.07	0.00	0.04	0.02	0.04	-0.09	-0.02	-0.06
14	1	-0.27	-0.10	0.00	0.11	0.06	0.00	-0.22	-0.08	-0.01
15	6	0.00	-0.07	0.00	-0.04	-0.02	0.04	0.06	0.03	-0.06
16	1	-0.27	-0.10	0.00	-0.11	-0.07	0.00	0.24	0.09	-0.01
17	1	0.12	-0.03	0.00	0.00	0.02	0.06	-0.10	-0.04	-0.07
18	1	0.12	-0.03	0.00	0.00	-0.03	0.05	0.04	0.03	-0.07

		10			11			12		
		A			A			A		
Frequencies --		126.6321			144.8468			146.8093		
Red. masses --		6.8253			11.4797			7.9653		
Frc consts --		0.0645			0.1419			0.1011		
IR Inten --		0.7302			0.1881			0.0568		
Atom	AN	X	Y	Z	X	Y	Z	X	Y	Z
1	13	-0.05	0.04	0.03	0.06	-0.05	-0.03	-0.09	-0.12	-0.02
2	13	0.03	0.09	-0.04	-0.25	-0.11	0.00	-0.15	-0.09	0.02
3	13	0.06	0.09	0.02	0.31	0.15	0.01	-0.02	-0.03	-0.01
4	13	-0.06	0.01	-0.03	0.00	0.11	-0.04	-0.10	-0.08	0.01
5	3	0.13	0.02	0.04	-0.04	0.01	0.44	0.11	-0.02	0.08
6	3	-0.06	0.33	0.02	0.06	-0.03	-0.67	-0.17	0.01	-0.17
7	3	-0.03	-0.17	-0.01	-0.02	0.06	-0.04	0.05	-0.16	0.00

8	12	-0.12	-0.29	0.01	-0.03	-0.09	0.14	0.11	0.31	0.03
9	6	-0.19	-0.04	0.00	0.04	0.00	0.02	-0.11	0.01	0.00
10	6	-0.03	-0.02	0.00	0.00	-0.01	0.01	0.05	0.02	0.00
11	6	-0.02	-0.02	0.00	-0.03	-0.01	0.01	0.04	0.02	0.00
12	1	-0.40	-0.06	0.00	0.10	0.00	0.03	-0.29	-0.01	0.00
13	6	0.24	0.01	0.00	-0.09	-0.02	0.00	0.29	0.05	0.00
14	1	-0.09	-0.03	0.00	0.04	-0.02	0.01	0.00	0.02	0.00
15	6	0.25	0.01	0.00	-0.11	-0.02	0.00	0.28	0.05	0.00
16	1	-0.08	-0.02	0.00	-0.03	0.00	0.01	-0.02	0.02	0.00
17	1	0.43	0.05	-0.02	-0.09	-0.03	-0.01	0.48	0.10	-0.01
18	1	0.43	0.05	0.01	-0.23	-0.04	-0.01	0.45	0.09	0.01

	13	14	15
	A	A	A
Frequencies --	175.9583	188.1494	224.5265
Red. masses --	16.1731	9.3609	6.9009
Frc consts --	0.2950	0.1952	0.2050
IR Inten --	1.6941	4.1210	35.2738

Atom	AN	X	Y	Z	X	Y	Z	X	Y	Z
1	13	0.38	0.13	0.01	0.14	0.06	0.00	0.02	-0.01	-0.01
2	13	-0.06	-0.28	0.07	-0.11	-0.15	-0.04	0.01	-0.04	0.00
3	13	0.05	0.26	0.07	-0.10	-0.16	0.04	0.01	-0.04	0.00
4	13	-0.36	-0.12	0.01	0.15	0.07	0.00	0.02	-0.01	0.01
5	3	0.00	0.00	-0.68	0.02	-0.07	0.02	-0.05	0.58	0.00
6	3	-0.01	0.04	0.11	-0.37	0.83	-0.02	-0.03	0.03	0.00
7	3	0.00	0.00	0.11	0.03	-0.03	0.00	-0.40	0.57	0.00
8	12	0.00	0.00	0.02	0.06	0.00	0.00	0.02	0.02	0.00
9	6	0.00	0.00	-0.04	0.03	0.01	0.00	-0.07	-0.10	0.00
10	6	-0.03	0.00	-0.03	-0.01	0.00	0.00	-0.03	-0.10	0.00
11	6	0.03	0.00	-0.03	-0.01	0.00	0.00	-0.03	-0.10	0.00
12	1	0.00	0.00	-0.05	0.08	0.01	0.00	-0.08	-0.10	0.00
13	6	-0.03	0.00	-0.01	-0.07	-0.01	0.00	0.09	-0.08	0.00
14	1	-0.07	0.01	-0.03	0.01	0.00	0.00	-0.02	-0.11	0.00
15	6	0.02	0.00	-0.01	-0.07	-0.01	0.00	0.09	-0.08	0.00
16	1	0.07	-0.01	-0.03	0.01	0.00	0.00	-0.02	-0.11	0.00
17	1	-0.11	-0.01	0.00	-0.12	-0.01	0.01	0.15	-0.08	-0.01
18	1	0.10	0.01	0.00	-0.12	-0.02	0.00	0.15	-0.08	0.01

	16	17	18
	A	A	A
Frequencies --	264.1264	264.6006	288.5100
Red. masses --	20.3101	20.4522	16.7142
Frc consts --	0.8348	0.8437	0.8197
IR Inten --	18.4733	7.3668	43.8726

Atom	AN	X	Y	Z	X	Y	Z	X	Y	Z
1	13	0.07	0.01	-0.12	-0.28	0.39	-0.07	-0.12	0.25	0.15

2	13	0.04	0.04	0.46	0.19	-0.37	0.21	0.19	-0.23	-0.24
3	13	0.17	-0.25	-0.46	-0.09	0.27	-0.21	0.19	-0.23	0.24
4	13	-0.16	0.30	0.13	0.24	-0.25	0.05	-0.12	0.25	-0.16
5	3	-0.17	-0.07	-0.07	-0.08	-0.04	0.16	-0.29	-0.01	0.01
6	3	-0.44	-0.10	0.09	-0.22	-0.04	-0.20	-0.46	-0.40	0.00
7	3	0.05	-0.03	0.11	0.02	-0.02	-0.24	0.09	-0.05	0.05
8	12	-0.02	-0.09	0.00	-0.01	-0.04	0.01	0.00	0.03	0.00
9	6	-0.03	0.01	-0.02	-0.01	0.01	0.04	-0.03	0.01	-0.01
10	6	-0.04	0.01	-0.02	0.09	0.02	0.04	-0.01	0.01	-0.01
11	6	0.05	0.02	-0.02	-0.09	0.00	0.04	0.01	0.01	0.00
12	1	-0.08	0.00	-0.02	-0.04	0.00	0.04	-0.10	0.00	-0.01
13	6	0.02	0.01	-0.02	0.09	0.02	0.04	0.04	0.01	-0.01
14	1	-0.08	0.00	-0.02	0.16	0.03	0.03	-0.03	0.01	-0.01
15	6	0.08	0.02	-0.02	-0.04	0.00	0.04	0.06	0.02	-0.01
16	1	0.07	0.02	-0.02	-0.16	-0.01	0.03	0.01	0.02	0.00
17	1	0.05	0.02	-0.02	0.16	0.03	0.03	0.09	0.02	-0.02
18	1	0.15	0.03	-0.01	-0.07	0.00	0.03	0.12	0.02	0.01

	19	20	21
	A	A	A
Frequencies --	289.9274	316.7460	331.2098
Red. masses --	6.2349	14.0049	9.5103
Frc consts --	0.3088	0.8279	0.6147
IR Inten --	0.1439	0.6226	57.5774

Atom	AN	X	Y	Z	X	Y	Z	X	Y	Z
1	13	-0.05	0.02	-0.01	0.04	-0.04	0.39	-0.06	0.03	0.20
2	13	0.01	-0.03	0.00	-0.02	0.07	0.13	-0.01	-0.10	0.10
3	13	-0.02	0.04	-0.01	-0.02	0.07	-0.13	-0.01	-0.10	-0.10
4	13	0.05	-0.04	0.00	0.04	-0.05	-0.39	-0.06	0.03	-0.20
5	3	0.01	0.00	0.12	0.58	-0.06	0.00	-0.35	0.26	0.00
6	3	0.01	0.01	-0.05	-0.42	-0.14	0.00	0.72	0.29	-0.01
7	3	0.00	0.00	0.73	-0.15	0.10	0.00	0.18	-0.18	0.00
8	12	0.00	0.00	0.00	0.01	0.02	0.00	0.01	0.04	0.00
9	6	0.00	0.00	-0.08	0.04	-0.02	0.00	-0.03	0.00	0.00
10	6	-0.18	-0.02	-0.07	-0.01	-0.02	0.00	0.00	0.00	0.00
11	6	0.18	0.02	-0.07	-0.01	-0.02	0.00	-0.01	0.00	0.00
12	1	0.00	0.00	-0.08	0.12	-0.01	0.00	-0.07	-0.01	0.00
13	6	-0.15	-0.02	-0.09	-0.07	-0.02	0.00	0.01	0.00	0.00
14	1	-0.31	-0.05	-0.07	0.00	-0.02	0.00	-0.03	0.00	0.00
15	6	0.15	0.02	-0.09	-0.07	-0.02	0.00	0.01	0.00	0.00
16	1	0.31	0.04	-0.07	0.01	-0.02	0.00	-0.03	0.00	0.00
17	1	-0.18	-0.02	-0.07	-0.13	-0.02	0.02	0.02	0.00	-0.01
18	1	0.18	0.02	-0.07	-0.13	-0.02	-0.02	0.01	0.00	0.01

	22	23	24
	A	A	A

Frequencies --		350.6576			365.2622			476.5702		
Red. masses --		7.2973			7.8273			5.6689		
Frc consts --		0.5287			0.6153			0.7586		
IR Inten --		13.0835			73.5173			68.8254		
Atom	AN	X	Y	Z	X	Y	Z	X	Y	Z
1	13	0.08	-0.06	0.00	-0.12	0.08	-0.08	-0.02	0.00	-0.01
2	13	-0.01	0.06	-0.01	0.03	-0.08	-0.01	-0.01	0.00	0.00
3	13	-0.01	0.06	0.01	0.03	-0.08	0.01	-0.01	0.00	0.00
4	13	0.08	-0.06	0.00	-0.11	0.08	0.08	-0.02	0.00	0.01
5	3	-0.19	0.66	0.00	0.77	0.33	0.00	0.15	-0.03	0.00
6	3	-0.34	-0.12	0.00	0.18	0.05	0.00	0.00	0.00	0.00
7	3	0.33	-0.46	0.00	-0.01	-0.24	0.00	0.69	0.43	0.00
8	12	-0.01	0.00	0.00	0.01	0.02	0.00	0.00	0.00	0.00
9	6	-0.02	-0.02	0.00	0.06	-0.02	0.00	-0.11	-0.04	0.00
10	6	-0.01	-0.01	0.00	0.00	-0.02	0.00	-0.11	-0.05	0.01
11	6	-0.01	-0.01	0.00	0.00	-0.02	0.00	-0.11	-0.05	-0.01
12	1	-0.09	-0.03	0.00	0.11	-0.01	0.00	-0.30	-0.06	0.00
13	6	-0.05	-0.01	0.01	-0.10	-0.02	0.01	0.01	-0.03	0.00
14	1	-0.07	-0.02	0.00	-0.01	-0.02	0.00	-0.27	-0.08	0.01
15	6	-0.05	-0.01	-0.01	-0.10	-0.02	-0.01	0.01	-0.03	0.00
16	1	-0.07	-0.02	0.00	0.00	-0.02	0.00	-0.27	-0.08	-0.01
17	1	-0.11	-0.03	0.00	-0.21	-0.04	0.03	-0.08	-0.04	0.01
18	1	-0.11	-0.03	0.00	-0.21	-0.04	-0.03	-0.08	-0.04	-0.01

			25			26			27	
			A			A			A	
Frequencies --		619.4932			634.6002			721.0542		
Red. masses --		5.3299			3.8944			1.2286		
Frc consts --		1.2052			0.9240			0.3764		
IR Inten --		0.0394			0.3761			0.8654		
Atom	AN	X	Y	Z	X	Y	Z	X	Y	Z
1	13	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
2	13	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
3	13	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
4	13	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
5	3	0.00	0.00	0.00	-0.02	0.00	0.00	0.00	0.00	0.02
6	3	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
7	3	0.00	0.00	0.05	-0.03	-0.05	0.00	0.00	0.00	0.01
8	12	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
9	6	0.00	0.00	-0.02	0.34	0.03	0.00	0.00	0.00	0.00
10	6	-0.20	-0.04	0.01	-0.25	-0.02	0.01	0.09	0.00	0.00
11	6	0.20	0.04	0.01	-0.25	-0.02	-0.01	-0.09	0.00	0.00
12	1	0.00	0.00	-0.03	0.56	0.05	0.00	0.00	0.00	-0.01
13	6	0.39	0.08	-0.01	0.09	0.01	-0.01	0.03	0.02	-0.01
14	1	-0.49	-0.07	0.01	-0.41	-0.04	0.01	-0.38	-0.07	0.02

15	6	-0.38	-0.07	-0.01	0.09	0.01	0.01	-0.03	-0.02	-0.01
16	1	0.49	0.07	0.01	-0.41	-0.04	-0.01	0.38	0.07	0.01
17	1	0.24	0.03	-0.01	0.18	0.05	0.00	-0.57	-0.10	0.04
18	1	-0.24	-0.03	-0.01	0.19	0.05	0.00	0.57	0.10	0.04

	28	29	30
	A	A	A
Frequencies --	737.8293	768.7720	838.0160
Red. masses --	1.2392	1.1642	1.2985
Frc consts --	0.3975	0.4054	0.5373
IR Inten --	108.4533	273.9702	2.5284

Atom	AN	X	Y	Z	X	Y	Z	X	Y	Z
1	13	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
2	13	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
3	13	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
4	13	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
5	3	-0.01	-0.01	0.00	-0.01	-0.01	0.00	0.00	0.00	0.01
6	3	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
7	3	-0.02	-0.01	0.00	-0.05	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
8	12	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
9	6	-0.05	0.01	0.00	0.08	0.01	0.00	0.00	0.00	0.01
10	6	-0.01	0.00	0.00	0.05	0.01	0.00	-0.07	0.00	0.03
11	6	-0.01	0.00	0.00	0.05	0.01	0.00	0.07	0.00	0.03
12	1	0.25	0.04	0.00	-0.66	-0.07	0.00	0.00	0.00	-0.07
13	6	0.09	0.01	0.00	0.00	0.00	0.00	0.03	0.06	-0.05
14	1	-0.01	-0.01	0.00	-0.50	-0.06	0.01	0.55	-0.02	0.05
15	6	0.09	0.01	0.00	0.00	0.00	0.00	-0.03	-0.06	-0.05
16	1	-0.01	-0.01	0.00	-0.50	-0.06	-0.01	-0.55	0.02	0.05
17	1	-0.66	-0.11	0.10	-0.15	-0.03	0.02	-0.42	0.01	0.05
18	1	-0.66	-0.11	-0.10	-0.15	-0.03	-0.02	0.43	-0.01	0.05

	31	32	33
	A	A	A
Frequencies --	860.6044	864.8023	881.7098
Red. masses --	4.1202	3.3923	1.2535
Frc consts --	1.7979	1.4948	0.5741
IR Inten --	1.9780	0.2604	1.0383

Atom	AN	X	Y	Z	X	Y	Z	X	Y	Z
1	13	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
2	13	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
3	13	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
4	13	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
5	3	0.00	0.01	0.00	0.00	0.00	-0.02	0.00	0.00	0.00
6	3	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
7	3	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	-0.01	0.00	0.00	0.00
8	12	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00

9	6	-0.05	0.31	0.00	0.00	0.01	0.10	-0.09	-0.04	0.00
10	6	0.02	-0.02	-0.27	0.03	0.15	0.13	0.07	0.00	0.03
11	6	0.02	-0.02	0.26	-0.03	-0.15	0.14	0.07	0.01	-0.03
12	1	0.17	0.34	0.01	0.01	0.01	-0.32	0.68	0.04	0.00
13	6	0.00	-0.15	-0.01	-0.06	0.17	-0.17	-0.02	0.01	0.01
14	1	-0.13	-0.29	-0.19	-0.28	-0.17	0.23	-0.49	-0.04	0.03
15	6	0.00	-0.14	0.02	0.06	-0.18	-0.17	-0.02	0.01	-0.01
16	1	-0.14	-0.30	0.18	0.27	0.16	0.23	-0.49	-0.04	-0.03
17	1	0.09	0.16	0.34	0.29	0.29	-0.14	0.12	0.02	-0.04
18	1	0.10	0.17	-0.33	-0.28	-0.28	-0.16	0.12	0.02	0.04

	34	35	36
	A	A	A
Frequencies --	1025.0012	1030.8422	1076.1359
Red. masses --	1.4832	1.4395	1.2371
Frc consts --	0.9181	0.9013	0.8441
IR Inten --	7.2500	10.9528	0.1800

Atom	AN	X	Y	Z	X	Y	Z	X	Y	Z
1	13	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
2	13	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
3	13	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
4	13	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
5	3	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
6	3	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
7	3	0.00	0.01	0.00	0.00	0.00	0.01	0.00	0.00	0.00
8	12	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
9	6	0.01	-0.11	0.00	0.00	0.00	0.06	0.00	0.00	0.09
10	6	-0.01	0.04	-0.04	0.01	-0.05	-0.09	-0.01	0.07	-0.02
11	6	-0.01	0.04	0.04	-0.01	0.05	-0.08	0.01	-0.07	-0.02
12	1	0.00	-0.12	0.00	0.00	0.00	0.54	0.00	0.00	0.67
13	6	0.00	-0.04	0.10	-0.02	0.08	0.01	0.01	0.01	-0.03
14	1	-0.05	0.51	-0.19	-0.01	-0.24	-0.03	-0.03	0.47	-0.14
15	6	0.00	-0.04	-0.10	0.02	-0.08	0.00	-0.01	-0.01	-0.03
16	1	-0.05	0.50	0.19	0.01	0.25	-0.03	0.03	-0.46	-0.14
17	1	0.01	0.17	0.38	0.03	0.38	0.36	-0.05	-0.08	-0.14
18	1	0.01	0.18	-0.38	-0.03	-0.38	0.35	0.05	0.08	-0.13

	37	38	39
	A	A	A
Frequencies --	1078.5878	1142.2399	1289.7815
Red. masses --	1.2491	5.7919	1.2783
Frc consts --	0.8561	4.4523	1.2529
IR Inten --	1.5448	5.7475	0.0541

Atom	AN	X	Y	Z	X	Y	Z	X	Y	Z
1	13	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
2	13	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00

3	13	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
4	13	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
5	3	-0.01	0.00	0.00	0.01	0.01	0.00	0.00	0.00	0.00
6	3	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
7	3	0.00	0.00	0.00	-0.01	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
8	12	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
9	6	0.01	-0.02	0.00	-0.03	0.30	0.00	0.00	0.00	-0.07
10	6	0.01	-0.05	0.04	-0.02	0.09	0.28	-0.01	0.06	-0.02
11	6	0.01	-0.05	-0.04	-0.02	0.09	-0.28	0.01	-0.06	-0.02
12	1	-0.02	-0.02	0.00	-0.01	0.34	0.00	0.00	0.00	0.45
13	6	-0.01	0.06	0.06	0.02	-0.23	0.18	-0.01	0.04	0.06
14	1	0.07	-0.39	0.16	0.03	0.06	0.33	0.06	-0.42	0.13
15	6	-0.01	0.06	-0.06	0.02	-0.23	-0.18	0.01	-0.04	0.06
16	1	0.07	-0.39	-0.16	0.03	0.06	-0.33	-0.06	0.42	0.13
17	1	-0.01	0.35	0.43	0.08	-0.30	0.14	0.02	-0.27	-0.35
18	1	-0.01	0.35	-0.43	0.08	-0.30	-0.14	-0.02	0.27	-0.35

	40	41	42
	A	A	A
Frequencies --	1373.6708	1386.7595	1468.2377
Red. masses --	4.4533	4.6576	2.4909
Frc consts --	4.9511	5.2774	3.1638
IR Inten --	0.0146	2.3624	0.7233

Atom	AN	X	Y	Z	X	Y	Z	X	Y	Z
1	13	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
2	13	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
3	13	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
4	13	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
5	3	0.00	0.00	0.00	0.00	-0.01	0.00	0.00	0.00	0.00
6	3	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
7	3	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.01	0.00
8	12	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
9	6	0.00	0.00	0.30	0.00	0.14	0.00	0.01	-0.14	-0.01
10	6	-0.04	0.23	-0.15	0.01	-0.21	-0.06	-0.02	0.17	-0.09
11	6	0.04	-0.23	-0.15	0.01	-0.21	0.06	-0.02	0.17	0.10
12	1	0.00	0.00	-0.39	-0.02	0.14	0.00	0.03	-0.17	0.02
13	6	0.05	-0.17	-0.01	-0.01	0.16	0.29	0.01	-0.03	0.13
14	1	0.07	-0.43	0.06	0.00	0.15	-0.19	0.07	-0.53	0.13
15	6	-0.05	0.18	-0.01	-0.01	0.16	-0.29	0.01	-0.02	-0.14
16	1	-0.07	0.43	0.06	0.00	0.15	0.19	0.07	-0.53	-0.12
17	1	-0.09	-0.01	0.27	0.01	-0.36	-0.37	0.03	-0.28	-0.16
18	1	0.09	0.00	0.27	0.02	-0.36	0.37	0.03	-0.29	0.19

	43	44	45
	A	A	A
Frequencies --	1469.4350	3139.2710	3157.5528

Red. masses --		2.5537			1.0872			1.0961		
Frc consts --		3.2488			6.3127			6.4386		
IR Inten --		0.5090			0.4973			4.5501		
Atom	AN	X	Y	Z	X	Y	Z	X	Y	Z
1	13	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
2	13	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
3	13	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
4	13	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
5	3	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
6	3	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
7	3	0.00	0.00	0.01	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
8	12	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
9	6	0.00	0.00	0.22	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
10	6	0.01	-0.08	-0.12	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.01
11	6	-0.01	0.09	-0.11	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	-0.01
12	1	0.00	0.00	-0.59	0.00	0.00	0.00	0.00	0.01	0.00
13	6	-0.02	0.14	0.08	0.01	-0.05	0.04	-0.01	0.05	-0.04
14	1	0.00	0.08	-0.20	0.00	0.02	0.07	0.00	-0.03	-0.10
15	6	0.02	-0.14	0.07	-0.01	0.05	0.03	-0.01	0.05	0.04
16	1	0.00	-0.11	-0.20	0.00	-0.02	0.07	0.00	-0.03	0.11
17	1	0.02	-0.21	-0.41	-0.15	0.55	-0.43	0.14	-0.52	0.42
18	1	-0.02	0.20	-0.40	0.14	-0.53	-0.42	0.15	-0.54	-0.43

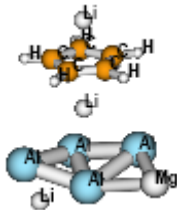
			46			47			48	
			A			A			A	
Frequencies --		3200.3988			3216.8876			3225.7631		
Red. masses --		1.0893			1.0945			1.1022		
Frc consts --		6.5735			6.6735			6.7573		
IR Inten --		1.3388			5.7406			0.9399		
Atom	AN	X	Y	Z	X	Y	Z	X	Y	Z
1	13	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
2	13	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
3	13	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
4	13	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
5	3	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
6	3	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
7	3	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
8	12	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
9	6	0.01	-0.07	0.00	0.00	0.00	0.00	0.01	-0.05	0.00
10	6	0.00	0.01	0.03	0.00	-0.02	-0.06	0.00	-0.01	-0.05
11	6	0.00	0.01	-0.03	0.00	0.02	-0.06	0.00	-0.01	0.05
12	1	-0.09	0.84	0.00	0.00	0.00	-0.01	-0.06	0.53	0.00
13	6	0.00	0.00	0.00	0.00	0.01	0.00	0.00	0.01	0.00
14	1	0.01	-0.12	-0.35	-0.01	0.21	0.67	-0.01	0.18	0.57
15	6	0.00	0.00	0.00	0.00	-0.01	0.00	0.00	0.01	0.00

16	1	0.01	-0.12	0.35	0.02	-0.22	0.67	-0.01	0.18	-0.56
17	1	-0.01	0.05	-0.04	0.01	-0.05	0.04	0.02	-0.07	0.05
18	1	-0.01	0.05	0.04	-0.02	0.06	0.04	0.02	-0.07	-0.05

$CpMgAl_4Li_3 \rightarrow CpLi + Al_4Li_2Mg$ **-17.3620583**

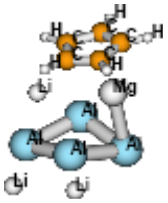
$CpMgAl_4Li_3 \rightarrow Cp^- + Al_4Li_3Mg^+$ **-137.6461541**

CpMgAl4Li3-fusion7891-b36311+gx.frq 3.174635841



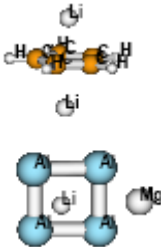
State=1-A\HF=-1386.108239

CpMgAl4Li3-fusion7890-b36311+gx.frq 2.305785495



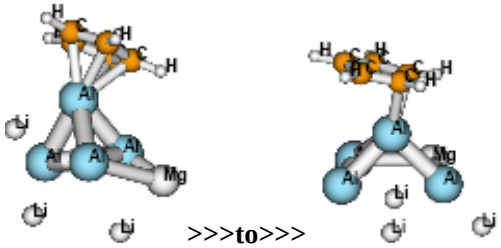
State=1-A\HF=-1386.1096236

CpMgAl4Li3-fusion9000-b36311+gx.frq -0.52924193



HF=-1386.1141415

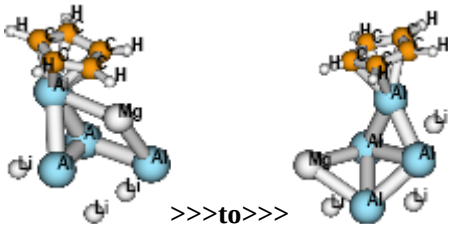
CpMgAl4Li3-fusion10000-b36311+gx.frq 26.07975486



>>>to>>>

State=1-A\HF=-1386.0717374

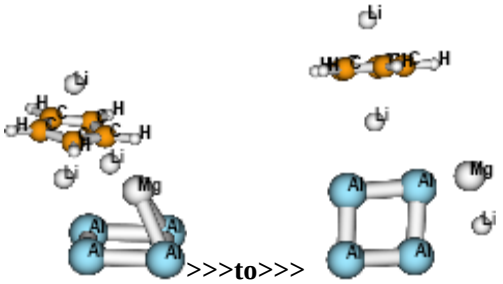
CpMgAl4Li3-fusion10001-b36311+gx.frq 27.51204643



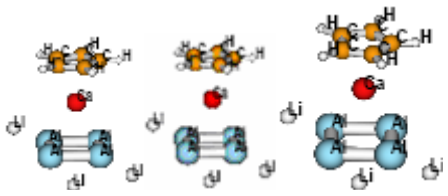
>>>to>>>

State=1-A\HF=-1386.0694549

CpMgAl4Li3-fusion10002-b36311+gx.frq 3.006776916



State=1-A\HF=-1386.1085065



Charge = 0 Multiplicity = 1

Al,0,-2.1319951255,-0.9933326588,1.2540048244
Al,0,0.1456997467,-2.3755418951,1.2784213063
Al,0,0.165813279,-2.3953697575,-1.2509829023
Al,0,-2.1126859061,-1.0132249159,-1.2821794826
Li,0,2.4659075987,-2.3048165116,0.0312550692
Li,0,-4.4314107244,-1.4377856138,-0.0278268495
Li,0,-2.0450048343,-3.5500464442,0.0025402373
Ca,0,0.3506404205,0.7102198359,-0.0093043641
C,0,0.5716388114,3.3586274098,0.0274004275
C,0,1.2974946049,2.9084113316,1.158998713
C,0,1.2683381651,2.942116065,-1.1351398072
H,0,-0.3352052729,3.9504511399,0.0476390623
C,0,2.4443596873,2.2150540322,0.6958082123
H,0,1.042783953,3.096806571,2.1947953931
C,0,2.426302184,2.2358711634,-0.7218757917
H,0,0.9878946388,3.1612729202,-2.1581588867
H,0,3.2201247025,1.7865579199,1.3184283794
H,0,3.1855008097,1.8250803815,-1.3761012553

State=1-A\HF=-1863.6335597

		1			2			3		
		A			A			A		
Frequencies --		13.5200			40.6162			41.1462		
Red. masses --		3.9782			8.6638			8.0487		
Frc consts --		0.0004			0.0084			0.0080		
IR Inten --		0.0210			0.7602			1.5705		
Atom	AN	X	Y	Z	X	Y	Z	X	Y	Z
1	13	-0.01	0.05	0.05	-0.18	-0.02	-0.03	0.03	-0.03	-0.01
2	13	-0.01	0.05	-0.05	-0.08	-0.02	0.02	-0.15	-0.03	0.01
3	13	0.01	-0.05	-0.05	0.18	0.03	0.02	-0.04	0.00	0.02
4	13	0.01	-0.05	0.05	0.08	0.04	-0.03	0.15	-0.01	-0.01
5	3	0.00	0.00	-0.13	0.19	0.10	-0.08	-0.37	-0.18	-0.03
6	3	0.00	0.00	0.12	-0.12	-0.06	0.11	0.24	0.12	0.06
7	3	0.00	0.00	0.01	0.01	-0.08	0.24	-0.02	0.15	0.11
8	20	0.00	0.00	-0.02	-0.01	0.10	-0.23	0.02	-0.19	-0.12
9	6	0.00	-0.01	-0.19	0.09	-0.07	0.15	-0.15	0.13	0.07
10	6	0.02	-0.19	-0.04	0.20	-0.03	0.13	0.05	0.15	0.06

11	6	-0.02	0.19	-0.05	-0.15	-0.11	0.13	-0.13	0.12	0.06
12	1	0.00	-0.01	-0.37	0.17	-0.07	0.19	-0.30	0.13	0.09
13	6	0.02	-0.11	0.18	0.03	-0.05	0.09	0.19	0.15	0.05
14	1	0.05	-0.37	-0.09	0.39	-0.01	0.14	0.09	0.17	0.07
15	6	-0.01	0.12	0.18	-0.18	-0.10	0.09	0.08	0.13	0.05
16	1	-0.05	0.36	-0.11	-0.28	-0.14	0.15	-0.26	0.11	0.07
17	1	0.04	-0.22	0.33	0.07	-0.04	0.07	0.35	0.16	0.04
18	1	-0.03	0.23	0.32	-0.34	-0.12	0.08	0.14	0.13	0.04

	4	5	6
	A	A	A
Frequencies --	60.9896	73.5030	104.0072
Red. masses --	13.8367	9.0201	16.0534
Frc consts --	0.0303	0.0287	0.1023
IR Inten --	0.0414	15.6307	3.5149

Atom	AN	X	Y	Z	X	Y	Z	X	Y	Z
1	13	0.08	0.08	0.14	0.05	-0.10	-0.01	0.41	-0.02	0.15
2	13	0.28	0.01	0.11	-0.12	-0.11	0.01	-0.19	0.01	0.02
3	13	-0.27	0.00	0.11	-0.13	-0.11	-0.01	0.18	-0.01	0.03
4	13	-0.09	-0.08	0.14	0.05	-0.10	0.01	-0.40	0.02	0.14
5	3	-0.01	0.00	0.38	0.52	0.21	0.01	0.01	0.01	-0.23
6	3	-0.02	-0.01	0.11	0.63	0.33	0.00	0.00	0.00	-0.57
7	3	0.00	-0.01	-0.48	-0.02	0.20	-0.01	0.00	0.00	0.31
8	20	0.00	0.00	-0.30	-0.04	0.11	0.00	0.00	0.00	-0.12
9	6	0.01	0.00	-0.02	0.01	0.02	0.00	0.00	0.00	-0.01
10	6	0.15	0.01	-0.03	-0.03	0.03	0.00	0.07	0.00	-0.01
11	6	-0.14	-0.02	-0.02	-0.03	0.02	0.00	-0.07	0.00	-0.01
12	1	0.02	0.00	0.00	0.04	0.02	0.00	0.00	0.00	-0.01
13	6	0.08	0.00	-0.04	-0.08	0.02	0.00	0.04	0.00	-0.02
14	1	0.28	0.02	-0.02	-0.01	0.03	0.00	0.13	0.01	-0.01
15	6	-0.09	-0.01	-0.03	-0.08	0.02	0.00	-0.04	0.00	-0.02
16	1	-0.27	-0.03	-0.02	-0.02	0.02	0.00	-0.13	-0.01	-0.01
17	1	0.15	0.01	-0.04	-0.10	0.02	0.00	0.09	0.01	-0.02
18	1	-0.18	-0.02	-0.04	-0.10	0.02	0.00	-0.08	0.00	-0.02

	7	8	9
	A	A	A
Frequencies --	111.5159	117.6902	118.8361
Red. masses --	8.5764	19.2859	9.8972
Frc consts --	0.0628	0.1574	0.0823
IR Inten --	0.3568	0.0313	3.0600

Atom	AN	X	Y	Z	X	Y	Z	X	Y	Z
1	13	0.11	0.10	0.00	0.09	0.20	-0.31	0.09	0.00	-0.02
2	13	0.04	0.04	0.00	0.07	0.25	0.29	0.25	0.02	0.01
3	13	0.04	0.03	0.00	-0.12	-0.26	0.29	0.24	-0.01	0.02
4	13	0.12	0.10	-0.01	-0.11	-0.20	-0.31	0.08	-0.03	-0.01

5	3	0.58	0.31	0.00	0.02	0.02	-0.37	-0.32	-0.29	-0.02
6	3	-0.21	-0.14	0.00	-0.03	-0.01	0.19	0.34	0.15	0.01
7	3	0.10	0.02	0.00	-0.02	0.00	0.45	0.15	-0.07	0.03
8	20	-0.09	-0.20	0.00	0.02	0.00	-0.01	-0.14	0.06	0.00
9	6	-0.26	-0.02	0.00	0.02	0.00	-0.01	-0.16	0.00	0.00
10	6	-0.16	-0.01	0.00	0.03	0.00	0.00	-0.19	-0.01	0.00
11	6	-0.17	-0.02	0.00	0.02	0.00	0.00	-0.19	0.00	0.00
12	1	-0.40	-0.02	0.00	0.02	0.00	-0.01	-0.13	0.00	0.00
13	6	-0.01	-0.01	0.00	0.03	0.00	0.00	-0.25	-0.01	0.00
14	1	-0.20	-0.01	0.00	0.03	0.00	0.00	-0.19	-0.01	0.00
15	6	-0.02	-0.01	0.00	0.02	0.00	0.00	-0.25	-0.01	0.00
16	1	-0.22	-0.01	0.00	0.02	0.00	0.00	-0.19	0.00	0.00
17	1	0.10	0.00	0.00	0.04	0.00	0.00	-0.30	-0.01	0.00
18	1	0.09	0.00	0.00	0.02	0.00	0.00	-0.31	-0.01	0.00

	10	11	12
	A	A	A
Frequencies --	134.1123	139.4116	174.6780
Red. masses --	12.2287	9.8002	10.5069
Frc consts --	0.1296	0.1122	0.1889
IR Inten --	1.6779	0.2793	8.5050

Atom	AN	X	Y	Z	X	Y	Z	X	Y	Z
1	13	0.30	-0.01	0.00	-0.01	-0.08	0.02	-0.16	-0.14	0.10
2	13	-0.15	-0.09	0.00	0.21	0.03	-0.14	0.11	0.13	0.09
3	13	-0.16	-0.09	-0.01	-0.20	-0.03	-0.14	-0.11	-0.13	0.09
4	13	0.30	-0.01	0.01	0.00	0.08	0.02	0.15	0.14	0.10
5	3	-0.16	-0.14	0.00	0.00	0.00	0.25	0.00	0.00	-0.62
6	3	-0.44	-0.47	0.00	0.00	0.00	-0.09	0.00	0.00	-0.65
7	3	0.10	0.08	0.01	-0.01	0.00	0.89	0.00	0.00	-0.13
8	20	-0.03	0.17	0.00	0.00	0.00	-0.02	0.00	0.00	0.00
9	6	0.08	0.04	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
10	6	-0.01	0.03	0.00	0.02	0.00	-0.01	0.00	0.00	0.00
11	6	-0.01	0.03	0.00	-0.02	0.00	-0.01	0.00	0.00	0.00
12	1	0.19	0.03	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
13	6	-0.16	0.03	0.00	0.01	0.00	-0.01	0.00	0.00	0.00
14	1	0.01	0.03	0.00	0.03	0.00	0.00	0.01	0.00	0.00
15	6	-0.16	0.03	0.00	-0.01	0.00	-0.01	0.00	0.00	0.00
16	1	0.03	0.03	0.00	-0.03	0.00	0.00	-0.01	0.00	0.00
17	1	-0.26	0.02	0.00	0.02	0.00	-0.01	0.01	0.00	0.00
18	1	-0.26	0.02	0.00	-0.02	0.00	-0.01	-0.01	0.00	0.00

	13	14	15
	A	A	A
Frequencies --	229.7357	232.9196	235.2924
Red. masses --	7.6981	4.8664	4.8707
Frc consts --	0.2394	0.1555	0.1589

IR Inten --		2.6408			0.0616			0.3546		
Atom	AN	X	Y	Z	X	Y	Z	X	Y	Z
1	13	-0.06	-0.03	-0.04	0.02	-0.06	-0.01	0.02	-0.01	0.00
2	13	0.08	-0.07	0.04	0.01	-0.01	0.00	-0.01	0.00	0.00
3	13	0.08	-0.07	-0.04	-0.01	0.01	0.00	-0.02	0.00	0.00
4	13	-0.06	-0.02	0.04	-0.02	0.06	-0.01	0.02	0.00	0.00
5	3	0.02	-0.12	0.00	0.00	0.00	-0.09	-0.06	-0.03	-0.01
6	3	-0.19	-0.08	0.00	0.00	0.00	0.15	0.02	0.00	0.01
7	3	0.03	0.93	0.00	0.00	0.00	-0.03	0.01	-0.10	0.00
8	20	0.00	0.02	0.00	0.00	-0.01	0.15	-0.02	0.17	0.01
9	6	-0.05	-0.02	0.00	0.02	0.00	-0.09	-0.27	-0.09	0.00
10	6	-0.01	-0.02	0.00	0.27	0.01	-0.09	-0.06	-0.09	-0.01
11	6	-0.02	-0.02	0.00	-0.26	0.00	-0.08	-0.10	-0.09	0.00
12	1	-0.09	-0.02	0.00	0.04	0.00	-0.09	-0.51	-0.09	0.00
13	6	0.04	-0.02	0.00	0.15	0.01	-0.09	0.25	-0.08	0.00
14	1	-0.02	-0.02	0.00	0.50	0.02	-0.08	-0.11	-0.09	-0.01
15	6	0.04	-0.02	0.00	-0.18	0.00	-0.09	0.23	-0.08	-0.01
16	1	-0.03	-0.02	0.00	-0.48	-0.01	-0.08	-0.18	-0.09	0.00
17	1	0.07	-0.01	0.00	0.27	0.02	-0.09	0.46	-0.06	0.00
18	1	0.07	-0.01	0.00	-0.33	-0.01	-0.08	0.41	-0.07	-0.01

	16	17	18
	A	A	A
Frequencies --	238.3606	246.1410	268.4353
Red. masses --	9.9959	14.6129	16.6530
Frc consts --	0.3346	0.5216	0.7070
IR Inten --	1.1192	0.5363	6.4175

Atom	AN	X	Y	Z	X	Y	Z	X	Y	Z
1	13	-0.12	0.24	0.02	-0.04	0.31	0.01	-0.03	0.25	0.03
2	13	-0.08	0.08	-0.02	-0.02	-0.30	-0.01	0.12	-0.41	0.03
3	13	0.08	-0.08	-0.02	-0.02	-0.30	0.01	-0.12	0.40	0.03
4	13	0.11	-0.24	0.02	-0.04	0.31	-0.01	0.03	-0.24	0.02
5	3	0.00	0.00	0.50	0.12	-0.47	0.01	0.00	0.00	-0.64
6	3	0.00	0.00	-0.63	-0.16	0.47	0.00	0.00	0.01	-0.16
7	3	0.00	0.00	0.04	0.29	-0.16	0.00	0.00	0.00	0.27
8	20	0.00	0.00	0.08	-0.04	0.00	0.00	0.00	0.00	0.03
9	6	0.00	0.00	-0.04	0.05	0.00	0.00	0.00	0.00	-0.01
10	6	0.11	0.00	-0.04	0.05	0.00	0.00	0.02	0.00	-0.01
11	6	-0.12	0.00	-0.04	0.05	0.00	0.00	-0.02	0.00	-0.01
12	1	-0.01	0.00	-0.04	0.07	0.00	0.00	0.00	0.00	-0.01
13	6	0.07	0.00	-0.04	0.04	0.00	0.00	0.01	0.00	-0.01
14	1	0.21	0.00	-0.03	0.06	0.00	0.00	0.03	0.00	-0.01
15	6	-0.07	-0.01	-0.04	0.04	0.00	0.00	-0.01	0.00	-0.01
16	1	-0.21	-0.01	-0.03	0.06	0.00	0.00	-0.03	0.00	-0.01
17	1	0.13	0.00	-0.04	0.04	0.00	0.00	0.02	0.00	-0.01

18	1	-0.12	-0.01	-0.03	0.04	0.00	0.00	-0.02	0.00	-0.01

	19	20	21
	A	A	A
Frequencies --	290.8567	313.9586	316.8326
Red. masses --	17.6386	11.9101	11.9239
Frc consts --	0.8792	0.6917	0.7052
IR Inten --	49.0417	111.2429	1.2879

Atom	AN	X	Y	Z	X	Y	Z	X	Y	Z
1	13	0.02	-0.07	0.36	-0.05	0.03	-0.05	-0.06	0.00	-0.23
2	13	0.03	-0.06	-0.35	-0.04	-0.02	-0.02	-0.03	0.00	-0.24
3	13	0.03	-0.06	0.35	-0.04	-0.02	0.02	-0.03	0.00	0.24
4	13	0.02	-0.07	-0.36	-0.05	0.03	0.05	-0.06	0.00	0.23
5	3	-0.18	0.39	0.00	0.01	0.00	0.00	-0.14	0.23	0.00
6	3	-0.29	0.38	0.00	0.03	-0.03	0.00	0.18	-0.27	0.00
7	3	0.10	0.19	0.00	0.19	-0.02	0.00	0.74	0.03	0.00
8	20	0.03	0.02	0.00	0.44	0.02	0.00	-0.09	-0.01	0.00
9	6	-0.03	-0.01	0.00	-0.23	-0.01	0.00	0.05	0.00	0.00
10	6	-0.03	-0.01	0.00	-0.22	-0.01	0.00	0.04	0.00	0.00
11	6	-0.03	-0.01	0.00	-0.22	-0.01	0.00	0.04	0.00	0.00
12	1	-0.04	-0.01	0.00	-0.36	-0.01	0.00	0.07	0.00	0.00
13	6	-0.01	-0.01	0.00	-0.19	-0.01	0.00	0.04	0.00	0.00
14	1	-0.04	-0.01	0.00	-0.33	-0.02	0.00	0.07	0.00	0.00
15	6	-0.01	-0.01	0.00	-0.20	-0.01	0.00	0.04	0.00	0.00
16	1	-0.04	-0.01	0.00	-0.33	-0.02	0.01	0.07	0.00	0.00
17	1	-0.03	-0.01	0.00	-0.29	-0.02	0.00	0.05	0.00	0.00
18	1	-0.03	-0.01	0.00	-0.30	-0.02	0.00	0.06	0.00	0.00

	22	23	24
	A	A	A
Frequencies --	340.1071	363.6276	389.9128
Red. masses --	10.8261	8.7637	9.1233
Frc consts --	0.7378	0.6827	0.8172
IR Inten --	4.7375	95.9252	22.0756

Atom	AN	X	Y	Z	X	Y	Z	X	Y	Z
1	13	-0.06	-0.04	0.20	0.05	-0.11	-0.13	-0.02	0.11	0.04
2	13	-0.06	0.06	0.20	0.01	-0.02	0.11	0.05	-0.16	0.11
3	13	-0.06	0.07	-0.20	0.01	-0.02	-0.11	0.05	-0.16	-0.11
4	13	-0.06	-0.04	-0.20	0.05	-0.11	0.13	-0.01	0.11	-0.04
5	3	0.01	-0.05	0.00	-0.20	0.39	0.00	-0.42	0.73	0.00
6	3	0.07	-0.11	0.00	-0.47	0.67	0.00	0.25	-0.32	0.00
7	3	0.89	0.01	0.00	0.19	-0.08	0.00	-0.12	0.00	0.00
8	20	-0.03	-0.01	0.00	0.00	-0.01	0.00	0.00	0.00	0.00
9	6	0.01	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
10	6	0.01	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
11	6	0.01	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00

12	1	0.02	0.00	0.00	-0.01	0.00	0.00	0.01	0.00	0.00
13	6	0.01	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
14	1	0.02	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.01	0.00	0.00
15	6	0.01	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
16	1	0.02	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.01	0.00	0.00
17	1	0.02	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.01	0.00	0.00
18	1	0.02	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.01	0.00	0.00

	25	26	27
	A	A	A
Frequencies --	624.9072	625.3489	755.4641
Red. masses --	4.6596	4.5709	1.2700
Frc consts --	1.0721	1.0532	0.4271
IR Inten --	0.0078	0.1401	19.5418

Atom	AN	X	Y	Z	X	Y	Z	X	Y	Z
1	13	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
2	13	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
3	13	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
4	13	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
5	3	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
6	3	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
7	3	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
8	20	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
9	6	-0.07	0.00	-0.02	0.35	-0.01	0.00	-0.09	0.00	0.00
10	6	0.27	0.01	0.01	-0.24	0.01	-0.01	-0.04	0.00	0.00
11	6	-0.15	-0.02	0.01	-0.33	0.00	0.01	-0.01	0.00	0.00
12	1	-0.10	0.00	-0.01	0.52	-0.01	0.00	0.53	0.00	0.00
13	6	-0.36	-0.03	-0.01	0.04	-0.01	0.01	0.08	0.00	0.00
14	1	0.39	0.01	0.01	-0.35	0.00	-0.01	0.20	0.01	0.01
15	6	0.32	0.03	0.00	0.18	0.00	-0.02	0.09	0.00	0.00
16	1	-0.22	-0.01	0.01	-0.47	0.00	0.02	0.05	0.01	0.00
17	1	-0.50	-0.03	-0.01	0.06	0.00	0.01	-0.52	-0.03	-0.02
18	1	0.44	0.03	-0.01	0.25	0.01	-0.01	-0.62	-0.03	0.03

	28	29	30
	A	A	A
Frequencies --	755.9389	771.4670	857.2985
Red. masses --	1.2708	1.1201	2.4795
Frc consts --	0.4279	0.3928	1.0737
IR Inten --	2.0254	350.1650	0.0019

Atom	AN	X	Y	Z	X	Y	Z	X	Y	Z
1	13	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
2	13	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
3	13	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
4	13	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
5	3	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00

6	3	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
7	3	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
8	20	0.00	0.00	0.00	-0.01	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
9	6	-0.01	0.00	0.00	0.06	0.01	0.00	0.00	-0.01	-0.06
10	6	0.09	0.00	0.00	0.05	0.00	0.00	-0.04	0.08	-0.11
11	6	-0.09	0.00	0.00	0.05	0.00	0.00	0.03	-0.09	-0.10
12	1	0.05	0.00	0.01	-0.53	0.01	0.00	-0.01	0.00	0.26
13	6	0.07	0.01	0.00	0.03	0.00	0.00	0.04	0.16	0.13
14	1	-0.58	-0.01	-0.02	-0.45	-0.01	-0.02	0.31	-0.16	-0.18
15	6	-0.05	0.00	0.00	0.03	0.00	0.00	-0.04	-0.15	0.14
16	1	0.58	0.01	-0.02	-0.48	-0.01	0.02	-0.30	0.16	-0.18
17	1	-0.47	-0.03	0.00	-0.35	-0.03	-0.01	-0.46	0.19	0.04
18	1	0.30	0.02	0.00	-0.38	-0.03	0.02	0.46	-0.19	0.04

	31	32	33
	A	A	A
Frequencies --	859.1362	868.6751	871.1578
Red. masses --	3.6373	1.4867	1.2567
Frc consts --	1.5818	0.6610	0.5619
IR Inten --	0.0764	0.0594	0.2994

Atom	AN	X	Y	Z	X	Y	Z	X	Y	Z
1	13	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
2	13	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
3	13	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
4	13	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
5	3	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
6	3	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
7	3	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
8	20	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
9	6	-0.04	0.29	-0.01	0.01	0.01	0.05	-0.08	-0.05	0.01
10	6	0.02	-0.01	0.24	-0.05	-0.06	0.05	0.06	-0.01	-0.04
11	6	0.02	-0.03	-0.25	0.03	0.06	0.03	0.07	0.00	0.05
12	1	0.33	0.29	0.00	-0.10	0.01	-0.09	0.62	-0.05	-0.01
13	6	-0.01	-0.12	0.03	0.07	-0.07	-0.06	-0.01	0.02	-0.02
14	1	-0.25	-0.27	0.16	0.43	0.05	0.10	-0.45	0.03	-0.04
15	6	0.00	-0.13	-0.01	-0.07	0.06	-0.07	-0.03	0.04	0.01
16	1	-0.25	-0.27	-0.15	-0.29	-0.05	0.08	-0.55	0.02	0.06
17	1	0.10	0.12	-0.32	-0.58	-0.12	-0.06	0.11	-0.01	0.03
18	1	0.10	0.13	0.31	0.53	0.12	-0.05	0.25	0.02	-0.05

	34	35	36
	A	A	A
Frequencies --	1025.8799	1027.0847	1074.6389
Red. masses --	1.4549	1.4538	1.2386
Frc consts --	0.9022	0.9036	0.8428
IR Inten --	12.9326	15.6335	0.0820

Atom	AN	X	Y	Z	X	Y	Z	X	Y	Z
1	13	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
2	13	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
3	13	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
4	13	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
5	3	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
6	3	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
7	3	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
8	20	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
9	6	0.00	-0.11	0.01	0.00	0.02	0.06	0.00	-0.01	0.08
10	6	0.00	0.06	0.03	0.00	0.04	-0.10	0.00	-0.08	-0.02
11	6	0.00	0.04	-0.06	0.00	-0.06	-0.08	-0.01	0.05	0.01
12	1	-0.01	-0.11	0.09	0.00	0.03	0.60	-0.01	0.00	0.57
13	6	0.00	-0.06	-0.08	0.00	-0.08	0.02	-0.01	0.02	-0.06
14	1	-0.01	0.57	0.19	0.01	0.13	-0.08	0.00	-0.59	-0.17
15	6	0.00	-0.03	0.09	0.00	0.09	-0.01	0.01	0.03	-0.01
16	1	-0.01	0.49	-0.23	0.00	-0.29	-0.01	0.03	0.30	-0.08
17	1	0.00	0.08	-0.30	0.00	-0.35	0.42	0.02	0.22	-0.36
18	1	0.00	0.20	0.39	0.00	0.33	0.29	-0.04	0.06	0.04

	37	38	39
	A	A	A
Frequencies --	1075.1647	1140.8426	1288.1631
Red. masses --	1.2402	5.8558	1.2797
Frc consts --	0.8447	4.4904	1.2512
IR Inten --	0.5145	3.8713	0.0001

Atom	AN	X	Y	Z	X	Y	Z	X	Y	Z
1	13	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
2	13	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
3	13	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
4	13	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
5	3	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
6	3	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
7	3	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
8	20	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
9	6	-0.01	0.02	0.04	-0.01	0.30	-0.01	0.00	0.00	0.07
10	6	0.01	0.01	0.03	-0.01	0.08	-0.28	0.00	0.07	0.02
11	6	0.00	0.07	-0.04	0.00	0.10	0.28	0.00	-0.07	0.02
12	1	0.03	0.03	0.26	0.03	0.33	-0.01	0.00	-0.01	-0.44
13	6	0.00	-0.05	0.04	0.00	-0.25	-0.17	0.00	0.04	-0.06
14	1	-0.04	0.12	0.06	0.03	0.10	-0.32	0.01	-0.42	-0.12
15	6	0.00	-0.05	-0.07	0.00	-0.24	0.18	0.00	-0.04	-0.06
16	1	-0.03	0.51	-0.20	0.04	0.12	0.31	-0.01	0.41	-0.15
17	1	0.03	-0.27	0.36	0.04	-0.28	-0.18	0.01	-0.25	0.36
18	1	0.00	-0.37	-0.49	0.05	-0.27	0.19	0.00	0.27	0.35

		40			41			42		
		A			A			A		
Frequencies --		1382.5890			1384.1661			1467.2725		
Red. masses --		4.7579			4.7726			2.5211		
Frc consts --		5.3586			5.3874			3.1979		
IR Inten --		0.0034			0.0814			0.0507		
Atom	AN	X	Y	Z	X	Y	Z	X	Y	Z
1	13	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
2	13	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
3	13	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
4	13	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
5	3	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
6	3	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
7	3	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
8	20	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
9	6	0.00	0.02	0.33	-0.02	-0.15	0.03	0.00	-0.05	0.18
10	6	0.02	-0.25	-0.16	0.02	0.21	-0.07	0.00	0.15	-0.06
11	6	-0.02	0.21	-0.17	0.01	0.24	0.03	0.00	-0.03	-0.13
12	1	0.00	0.00	-0.47	0.04	-0.16	-0.03	0.00	-0.08	-0.52
13	6	-0.03	0.19	-0.03	0.00	-0.13	0.29	0.01	-0.15	0.02
14	1	-0.03	0.43	0.04	-0.03	-0.21	-0.20	0.00	-0.31	-0.22
15	6	0.03	-0.16	0.02	0.00	-0.17	-0.28	0.00	0.14	0.13
16	1	0.04	-0.39	0.03	-0.02	-0.26	0.22	0.01	-0.10	-0.14
17	1	0.04	0.02	0.24	0.01	0.31	-0.33	-0.01	0.06	-0.32
18	1	-0.04	-0.05	0.19	0.00	0.32	0.35	0.01	-0.31	-0.46

		43			44			45		
		A			A			A		
Frequencies --		1468.0836			3186.6003			3188.2011		
Red. masses --		2.5226			1.0869			1.0872		
Frc consts --		3.2033			6.5030			6.5109		
IR Inten --		0.2465			0.0225			0.2531		
Atom	AN	X	Y	Z	X	Y	Z	X	Y	Z
1	13	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
2	13	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
3	13	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
4	13	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
5	3	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
6	3	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
7	3	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
8	20	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
9	6	0.00	0.13	0.07	0.00	-0.01	0.00	0.00	-0.05	0.00
10	6	0.01	-0.12	-0.12	0.00	0.01	-0.03	0.00	0.01	-0.04
11	6	0.01	-0.18	0.06	0.00	-0.01	-0.02	0.00	0.02	0.04
12	1	-0.01	0.14	-0.22	0.00	0.06	0.00	0.00	0.59	-0.02

13	6	0.00	-0.03	0.18	0.00	0.04	0.03	0.00	0.01	0.01
14	1	-0.02	0.44	0.02	-0.01	-0.12	0.40	-0.01	-0.14	0.47
15	6	-0.01	0.07	-0.12	0.00	-0.04	0.03	0.00	0.02	-0.02
16	1	-0.02	0.53	-0.20	0.01	0.09	0.27	-0.02	-0.19	-0.52
17	1	-0.01	0.34	-0.35	0.04	-0.52	-0.36	0.01	-0.11	-0.08
18	1	0.00	0.21	0.01	-0.04	0.46	-0.35	0.02	-0.23	0.18

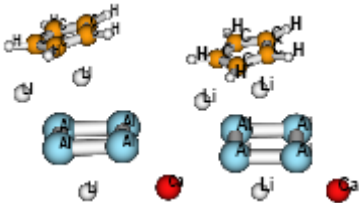
	46	47	48
	A	A	A
Frequencies --	3204.5826	3204.8653	3219.0117
Red. masses --	1.0955	1.0955	1.1047
Frc consts --	6.6286	6.6296	6.7445
IR Inten --	10.9634	9.7378	0.7996

Atom	AN	X	Y	Z	X	Y	Z	X	Y	Z
1	13	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
2	13	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
3	13	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
4	13	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
5	3	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
6	3	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
7	3	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
8	20	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
9	6	0.00	0.00	0.00	0.00	-0.06	0.00	0.00	-0.05	0.00
10	6	0.00	-0.02	0.05	0.00	0.00	0.01	0.00	-0.01	0.04
11	6	0.00	0.02	0.05	0.00	0.00	-0.01	0.00	-0.01	-0.04
12	1	0.00	0.00	0.01	0.00	0.63	-0.02	0.00	0.49	-0.01
13	6	0.00	0.03	0.02	0.00	-0.04	-0.03	0.00	0.03	0.02
14	1	0.01	0.17	-0.58	0.00	0.04	-0.14	0.01	0.12	-0.42
15	6	0.00	-0.03	0.02	0.00	-0.04	0.03	0.00	0.03	-0.02
16	1	-0.02	-0.21	-0.58	0.00	0.04	0.12	0.01	0.15	0.43
17	1	0.02	-0.31	-0.21	-0.03	0.42	0.29	0.02	-0.34	-0.23
18	1	-0.02	0.26	-0.20	-0.04	0.42	-0.33	0.03	-0.33	0.26

$CpCaAl_4Li_3 \rightarrow CpLi + Al_4Li_2Ca$ **-31.1891047**

$CpCaAl_4Li_3 \rightarrow Cp^- + Al_4Li_3Ca^+$ **-141.5690297**

$CpCaAl_4Li_3 \rightarrow CpCa^+ + Al_4Li_3^-$ **-132.068912**



Charge = 0 Multiplicity = 1

Al,0,-0.8114673051,1.4731281561,1.3845869571

Al,0,1.5413952871,0.3889791314,1.2312507518

Al,0,1.3551177952,0.4857098951,-1.3646124738

Al,0,-0.9863124221,1.5782359002,-1.134443426
Li,0,-3.054821148,0.3033897362,0.2338688269
Li,0,-1.0996635258,-1.275758422,-0.0121617515
Li,0,1.0139487438,3.1984368547,0.0401973682
Ca,0,4.0141553006,1.7401295327,-0.2037103188
C,0,-1.6322810913,-3.2438071224,0.7185722022
C,0,-2.6612886627,-2.4198139195,1.2175863624
C,0,-1.7010163641,-3.230743661,-0.7018594913
H,0,-0.9222280142,-3.8001767278,1.3170053039
C,0,-3.372024869,-1.8860466299,0.1026597322
H,0,-2.8943625734,-2.25755462,2.2620687007
C,0,-2.7703014827,-2.3965096827,-1.0845734998
H,0,-1.0518207224,-3.7757281417,-1.3753124897
H,0,-4.3561921691,-1.416804082,0.1504650014
H,0,-3.0989535407,-2.2076955724,-2.0982088257

State=1-A\HF=-1863.6073159

		1			2			3		
		A			A			A		
Frequencies --		-2.1512			21.6098			33.8707		
Red. masses --		4.0098			12.8528			18.2073		
Frc consts --		0.0000			0.0035			0.0123		
IR Inten --		0.0228			0.8278			0.5001		
Atom	AN	X	Y	Z	X	Y	Z	X	Y	Z
1	13	0.00	-0.05	0.06	-0.04	-0.22	0.01	0.06	0.07	0.04
2	13	0.01	-0.05	-0.01	0.16	-0.09	0.03	0.24	0.17	0.38
3	13	-0.01	0.05	-0.01	0.12	-0.11	0.04	-0.25	-0.13	0.38
4	13	-0.01	0.05	0.06	-0.04	-0.22	0.00	-0.05	-0.02	0.04
5	3	0.00	-0.01	0.11	0.01	0.04	0.02	0.00	-0.02	0.23
6	3	0.01	0.00	-0.06	-0.16	-0.03	-0.04	0.01	0.00	-0.18
7	3	0.00	0.00	0.05	-0.06	0.03	-0.03	0.01	0.00	-0.23
8	20	0.00	0.00	-0.05	0.23	0.22	-0.02	-0.03	-0.03	-0.25
9	6	-0.02	0.13	0.14	-0.27	0.11	-0.01	0.03	-0.03	-0.19
10	6	-0.04	0.19	-0.09	-0.16	0.14	-0.02	0.02	-0.04	-0.17
11	6	0.03	-0.11	0.15	-0.28	0.10	-0.01	0.02	0.00	-0.19
12	1	-0.04	0.24	0.28	-0.33	0.10	-0.01	0.03	-0.04	-0.21
13	6	0.00	-0.01	-0.23	-0.11	0.16	-0.02	0.01	-0.02	-0.15
14	1	-0.09	0.35	-0.15	-0.13	0.16	-0.02	0.00	-0.07	-0.16
15	6	0.05	-0.19	-0.08	-0.19	0.13	-0.02	0.02	0.01	-0.17
16	1	0.05	-0.21	0.30	-0.36	0.08	-0.01	0.03	0.01	-0.21
17	1	0.01	-0.01	-0.42	-0.03	0.20	-0.02	0.01	-0.02	-0.14
18	1	0.09	-0.35	-0.12	-0.17	0.13	-0.02	0.02	0.03	-0.16
		4			5			6		
		A			A			A		

Frequencies --		51.1158			65.0355			87.0535		
Red. masses --		5.3388			8.1987			10.8757		
Frc consts --		0.0082			0.0204			0.0486		
IR Inten --		0.1182			1.0453			5.1664		
Atom	AN	X	Y	Z	X	Y	Z	X	Y	Z
1	13	0.03	-0.04	0.00	0.18	0.12	0.08	0.04	0.12	0.00
2	13	-0.02	-0.06	0.01	-0.02	0.02	-0.10	0.17	0.20	-0.02
3	13	0.02	0.06	0.01	0.02	-0.03	-0.10	0.17	0.19	-0.01
4	13	-0.03	0.04	0.00	-0.17	-0.11	0.08	0.04	0.12	0.01
5	3	0.00	-0.01	0.17	0.00	-0.01	0.41	-0.02	-0.16	0.01
6	3	0.00	0.00	-0.40	0.00	-0.01	0.20	-0.13	-0.22	-0.01
7	3	0.00	0.00	-0.41	0.00	0.00	-0.51	0.14	0.00	0.03
8	20	0.00	0.00	0.09	0.01	0.00	0.09	0.07	-0.19	0.01
9	6	0.15	0.03	-0.02	-0.11	-0.03	-0.05	-0.28	-0.13	0.00
10	6	0.22	0.04	0.00	-0.16	-0.04	-0.05	-0.18	-0.10	0.00
11	6	-0.12	-0.03	-0.02	0.09	0.02	-0.05	-0.29	-0.13	0.00
12	1	0.28	0.05	-0.04	-0.21	-0.05	-0.04	-0.34	-0.14	0.01
13	6	-0.01	0.00	0.02	0.00	0.00	-0.06	-0.12	-0.08	0.00
14	1	0.40	0.07	0.02	-0.32	-0.08	-0.06	-0.15	-0.08	0.00
15	6	-0.22	-0.04	0.01	0.16	0.04	-0.06	-0.20	-0.10	0.00
16	1	-0.24	-0.05	-0.03	0.17	0.04	-0.05	-0.37	-0.15	0.01
17	1	-0.01	0.00	0.07	0.02	0.01	-0.11	-0.06	-0.04	0.00
18	1	-0.41	-0.08	0.02	0.32	0.08	-0.07	-0.19	-0.10	0.00

		7			8			9		
		A			A			A		
Frequencies --		100.4186			111.3379			114.6886		
Red. masses --		9.0977			12.4776			13.5796		
Frc consts --		0.0541			0.0911			0.1052		
IR Inten --		3.1140			0.7792			0.5402		
Atom	AN	X	Y	Z	X	Y	Z	X	Y	Z
1	13	-0.08	-0.06	0.08	0.28	0.14	0.01	-0.09	0.15	0.30
2	13	-0.14	-0.07	0.10	-0.13	-0.12	0.01	0.07	0.21	-0.16
3	13	0.14	0.08	0.10	-0.12	-0.15	-0.02	-0.07	-0.20	-0.16
4	13	0.08	0.07	0.08	0.28	0.09	0.03	0.03	-0.17	0.29
5	3	0.01	0.02	-0.56	0.22	-0.13	-0.04	-0.02	0.03	-0.53
6	3	-0.01	0.00	0.18	-0.07	-0.23	-0.03	0.00	0.02	-0.18
7	3	0.02	-0.01	-0.67	0.12	0.04	0.04	-0.01	-0.02	0.01
8	20	0.01	-0.01	-0.10	-0.11	0.22	-0.01	0.02	-0.02	0.00
9	6	-0.07	-0.02	0.03	-0.22	-0.12	0.00	0.12	0.04	-0.04
10	6	-0.09	-0.02	0.02	-0.01	-0.06	0.00	0.15	0.05	-0.04
11	6	0.04	0.00	0.03	-0.25	-0.13	0.00	-0.05	-0.01	-0.03
12	1	-0.13	-0.03	0.04	-0.34	-0.15	0.00	0.21	0.07	-0.04
13	6	0.00	0.00	0.02	0.09	-0.03	-0.01	-0.01	0.00	-0.04
14	1	-0.15	-0.03	0.01	0.05	-0.03	-0.01	0.27	0.09	-0.04

15	6	0.08	0.01	0.02	-0.06	-0.08	-0.01	-0.14	-0.04	-0.03
16	1	0.09	0.01	0.03	-0.39	-0.17	0.01	-0.11	-0.03	-0.03
17	1	0.00	-0.01	0.01	0.23	0.05	-0.01	-0.03	-0.01	0.00
18	1	0.15	0.02	0.01	-0.04	-0.07	-0.01	-0.27	-0.08	-0.03

	10	11	12
	A	A	A
Frequencies --	133.7557	141.4316	159.6176
Red. masses --	18.9839	21.0272	4.9826
Frc consts --	0.2001	0.2478	0.0748
IR Inten --	0.5301	1.7502	1.2165

Atom	AN	X	Y	Z	X	Y	Z	X	Y	Z
1	13	-0.05	-0.29	-0.03	-0.08	0.12	0.04	-0.08	-0.06	0.01
2	13	0.42	0.02	-0.11	-0.30	-0.01	-0.03	0.00	0.07	-0.01
3	13	-0.40	-0.03	-0.11	-0.37	0.00	0.03	0.01	0.07	0.01
4	13	0.09	0.28	-0.03	-0.09	0.16	-0.06	-0.09	-0.07	-0.01
5	3	0.03	0.01	-0.26	0.04	0.24	0.01	0.22	0.06	0.00
6	3	-0.01	-0.01	0.16	-0.13	0.02	0.00	0.05	-0.19	0.00
7	3	0.01	0.01	-0.38	0.17	-0.37	0.01	-0.04	0.03	0.01
8	20	-0.04	0.02	0.23	0.51	-0.07	0.01	-0.06	0.00	0.00
9	6	-0.09	-0.03	0.03	-0.08	-0.08	0.00	-0.12	-0.05	0.00
10	6	-0.10	-0.04	0.03	0.05	-0.05	0.00	0.17	0.03	0.00
11	6	0.05	0.01	0.03	-0.08	-0.09	0.00	-0.14	-0.06	0.00
12	1	-0.16	-0.05	0.03	-0.15	-0.10	0.00	-0.30	-0.11	0.00
13	6	0.02	0.00	0.03	0.16	-0.01	0.00	0.34	0.08	0.00
14	1	-0.18	-0.06	0.02	0.10	-0.03	0.00	0.27	0.07	0.00
15	6	0.11	0.03	0.03	0.05	-0.05	0.00	0.15	0.03	0.00
16	1	0.09	0.02	0.03	-0.15	-0.11	0.01	-0.33	-0.11	0.00
17	1	0.03	0.00	0.01	0.22	0.02	-0.01	0.52	0.18	-0.01
18	1	0.21	0.05	0.02	0.10	-0.04	0.00	0.22	0.06	0.00

	13	14	15
	A	A	A
Frequencies --	192.7276	206.6591	209.8014
Red. masses --	14.5003	7.2594	7.7842
Frc consts --	0.3173	0.1827	0.2019
IR Inten --	1.3871	42.2442	10.8469

Atom	AN	X	Y	Z	X	Y	Z	X	Y	Z
1	13	0.33	0.10	-0.01	0.03	-0.03	-0.01	0.01	0.03	0.01
2	13	0.12	-0.25	0.05	0.04	0.01	0.00	-0.02	-0.05	0.00
3	13	-0.10	0.24	0.05	0.05	0.00	-0.01	-0.02	-0.08	0.00
4	13	-0.32	-0.10	-0.01	0.04	-0.04	0.02	0.03	0.04	-0.01
5	3	0.00	0.06	-0.71	-0.05	0.67	0.05	0.01	0.04	0.02
6	3	-0.03	0.03	0.06	-0.43	0.47	-0.02	-0.03	0.02	0.00
7	3	-0.03	0.05	0.24	0.12	0.02	0.00	-0.43	0.87	-0.02
8	20	0.00	-0.01	0.05	-0.05	0.00	0.00	0.08	-0.10	0.00

9	6	0.03	0.01	-0.02	-0.03	-0.11	0.01	-0.02	-0.02	0.00
10	6	0.05	0.01	-0.02	0.00	-0.11	0.00	0.01	-0.01	0.00
11	6	-0.02	-0.01	-0.02	-0.03	-0.11	0.00	-0.02	-0.02	0.00
12	1	0.06	0.01	-0.02	-0.01	-0.10	0.00	-0.04	-0.02	0.00
13	6	0.00	-0.01	-0.02	0.09	-0.07	-0.01	0.04	0.00	0.00
14	1	0.11	0.04	-0.03	0.03	-0.09	0.00	0.02	0.00	0.00
15	6	-0.06	-0.03	-0.02	-0.01	-0.12	-0.01	0.01	-0.01	0.00
16	1	-0.03	-0.02	-0.02	-0.01	-0.11	0.01	-0.04	-0.02	0.00
17	1	-0.02	-0.02	0.00	0.06	-0.09	-0.01	0.06	0.01	0.00
18	1	-0.11	-0.05	-0.02	0.02	-0.12	-0.01	0.02	0.00	0.00

	16	17	18
	A	A	A
Frequencies --	265.8042	269.3936	275.1689
Red. masses --	10.5141	21.3865	25.1281
Frc consts --	0.4377	0.9145	1.1210
IR Inten --	12.3458	7.5080	4.8620

Atom	AN	X	Y	Z	X	Y	Z	X	Y	Z
1	13	0.01	-0.13	-0.01	-0.33	0.41	0.02	-0.08	0.04	-0.27
2	13	-0.11	0.09	-0.03	0.24	-0.38	-0.06	0.01	-0.03	0.61
3	13	-0.18	0.20	0.02	-0.14	0.27	0.03	-0.04	0.03	-0.62
4	13	0.11	-0.25	0.00	0.29	-0.27	-0.05	-0.01	-0.03	0.27
5	3	0.09	-0.07	0.04	-0.03	0.02	0.22	-0.15	0.00	0.02
6	3	0.03	-0.06	-0.03	-0.01	0.02	-0.15	0.06	-0.06	0.00
7	3	0.71	0.47	-0.02	-0.25	-0.15	-0.15	0.11	0.05	-0.02
8	20	0.00	-0.01	0.00	-0.01	0.00	0.00	0.05	-0.02	0.00
9	6	0.03	0.02	0.00	-0.05	-0.02	0.03	-0.03	0.00	0.00
10	6	-0.06	-0.01	0.00	-0.06	-0.02	0.03	0.04	0.02	0.00
11	6	0.05	0.02	0.00	0.02	0.00	0.03	-0.03	0.00	0.00
12	1	0.07	0.03	0.01	-0.11	-0.04	0.03	-0.08	-0.02	0.00
13	6	-0.10	-0.02	0.01	0.03	0.00	0.03	0.07	0.02	0.00
14	1	-0.11	-0.02	0.00	-0.12	-0.04	0.03	0.06	0.02	0.00
15	6	-0.03	0.00	0.01	0.08	0.02	0.03	0.04	0.02	0.00
16	1	0.11	0.04	0.00	0.04	0.01	0.02	-0.08	-0.01	0.00
17	1	-0.13	-0.04	0.00	0.05	0.01	0.01	0.09	0.03	0.00
18	1	-0.05	0.00	0.01	0.16	0.05	0.02	0.06	0.03	0.00

	19	20	21
	A	A	A
Frequencies --	303.3579	314.2694	323.8315
Red. masses --	5.8283	10.9118	23.9869
Frc consts --	0.3160	0.6350	1.4821
IR Inten --	0.0728	3.7798	3.4879

Atom	AN	X	Y	Z	X	Y	Z	X	Y	Z
1	13	-0.04	0.01	-0.01	-0.16	0.14	-0.04	-0.04	0.03	0.59
2	13	0.02	-0.03	-0.01	0.09	-0.19	-0.06	0.04	-0.04	0.26

3	13	-0.01	0.02	0.00	0.09	-0.20	0.06	0.05	-0.05	-0.26
4	13	0.03	0.00	-0.01	-0.17	0.15	0.04	-0.06	0.04	-0.59
5	3	-0.03	0.00	0.10	-0.31	0.03	-0.01	0.23	0.02	0.00
6	3	0.00	0.01	0.72	0.12	-0.08	-0.05	-0.04	0.02	0.02
7	3	0.02	0.01	-0.04	0.74	0.28	0.00	0.24	0.10	0.00
8	20	0.00	0.00	0.00	-0.03	0.01	0.00	-0.04	0.00	0.00
9	6	0.10	0.02	-0.08	-0.04	0.00	0.01	0.02	0.00	0.00
10	6	0.19	0.06	-0.08	0.03	0.01	0.01	-0.03	-0.01	-0.01
11	6	-0.09	-0.03	-0.08	-0.04	0.00	0.00	0.02	0.00	0.00
12	1	0.18	0.05	-0.08	-0.11	-0.02	0.01	0.05	0.01	0.00
13	6	-0.01	0.00	-0.09	0.08	0.02	0.01	-0.06	-0.02	0.00
14	1	0.32	0.10	-0.08	0.05	0.02	0.01	-0.06	-0.02	-0.01
15	6	-0.19	-0.06	-0.07	0.05	0.02	0.00	-0.04	-0.02	0.00
16	1	-0.17	-0.05	-0.08	-0.09	-0.02	0.01	0.05	0.01	0.00
17	1	0.00	0.00	-0.06	0.07	0.02	0.00	-0.04	-0.01	0.00
18	1	-0.32	-0.10	-0.07	0.08	0.04	0.00	-0.06	-0.03	0.00

	22	23	24
	A	A	A
Frequencies --	354.3021	386.3558	498.5655
Red. masses --	6.8400	7.0904	5.7626
Frc consts --	0.5059	0.6236	0.8439
IR Inten --	26.9037	135.8423	126.1071

Atom	AN	X	Y	Z	X	Y	Z	X	Y	Z
1	13	0.06	-0.03	0.04	-0.08	0.05	-0.06	-0.01	-0.01	-0.01
2	13	-0.01	0.02	0.00	0.02	-0.04	0.00	-0.01	0.00	0.00
3	13	-0.01	0.02	0.00	0.02	-0.04	0.00	-0.01	0.00	0.00
4	13	0.05	-0.03	-0.04	-0.07	0.04	0.06	-0.01	-0.01	0.01
5	3	-0.39	0.57	0.01	0.76	0.34	0.02	0.14	-0.09	0.00
6	3	0.51	-0.40	-0.01	0.10	-0.25	0.01	0.60	0.56	0.00
7	3	-0.09	-0.03	0.00	0.02	0.02	0.00	0.00	0.00	0.00
8	20	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
9	6	-0.02	-0.01	0.00	0.08	0.01	0.00	-0.09	-0.05	0.00
10	6	-0.03	-0.01	-0.01	-0.11	-0.03	-0.02	-0.07	-0.05	0.00
11	6	-0.03	-0.01	0.00	0.08	0.01	0.00	-0.09	-0.05	0.01
12	1	-0.09	-0.02	0.01	0.15	0.04	0.01	-0.26	-0.10	-0.01
13	6	-0.04	-0.01	0.00	-0.17	-0.03	0.00	0.06	0.00	0.00
14	1	-0.07	-0.02	0.00	-0.18	-0.06	-0.01	-0.18	-0.09	0.00
15	6	-0.03	-0.01	0.00	-0.11	-0.04	0.01	-0.08	-0.06	0.00
16	1	-0.10	-0.03	-0.01	0.15	0.03	-0.01	-0.26	-0.10	0.02
17	1	-0.18	-0.08	0.00	-0.14	-0.03	0.00	-0.06	-0.06	0.00
18	1	-0.08	-0.03	0.00	-0.18	-0.07	0.01	-0.19	-0.10	0.01

	25	26	27
	A	A	A
Frequencies --	626.8033	634.7214	737.4062

Red. masses --		5.4084			3.9459			1.2152		
Frc consts --		1.2519			0.9366			0.3893		
IR Inten --		29.7542			0.1011			31.9758		
Atom	AN	X	Y	Z	X	Y	Z	X	Y	Z
1	13	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
2	13	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
3	13	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
4	13	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
5	3	0.07	0.05	0.00	0.00	0.00	-0.01	-0.03	0.01	0.00
6	3	0.05	0.10	-0.01	0.00	0.01	0.03	0.01	0.01	0.00
7	3	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
8	20	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
9	6	-0.12	-0.06	-0.02	0.30	0.07	0.00	0.06	0.01	-0.01
10	6	0.28	0.10	0.00	-0.17	-0.05	-0.01	-0.04	0.00	0.01
11	6	-0.09	-0.05	0.02	-0.31	-0.07	0.01	0.05	0.01	0.01
12	1	-0.27	-0.10	-0.01	0.50	0.13	-0.01	-0.25	-0.08	-0.02
13	6	-0.41	-0.16	0.01	-0.01	0.00	0.01	-0.05	-0.07	0.00
14	1	0.45	0.14	0.01	-0.27	-0.09	-0.01	-0.01	0.03	0.00
15	6	0.26	0.09	-0.01	0.19	0.06	-0.01	-0.05	0.00	-0.01
16	1	-0.20	-0.08	0.02	-0.51	-0.13	0.01	-0.20	-0.07	0.02
17	1	-0.12	-0.01	0.01	-0.02	-0.01	-0.07	0.82	0.43	-0.03
18	1	0.45	0.14	-0.02	0.30	0.10	-0.02	0.08	0.07	-0.01

		28			29			30		
		A			A			A		
Frequencies --		751.1628			772.9753			848.3621		
Red. masses --		1.2619			1.1479			1.5869		
Frc consts --		0.4195			0.4041			0.6729		
IR Inten --		7.9597			389.1202			9.0696		
Atom	AN	X	Y	Z	X	Y	Z	X	Y	Z
1	13	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
2	13	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
3	13	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
4	13	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
5	3	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	-0.01	0.00
6	3	0.00	0.00	-0.01	-0.05	-0.01	0.00	0.00	0.00	0.00
7	3	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
8	20	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
9	6	0.05	0.01	0.01	0.06	0.02	0.00	0.06	-0.03	0.00
10	6	0.09	0.02	-0.01	0.03	0.01	-0.01	-0.06	-0.04	-0.09
11	6	-0.06	-0.01	0.01	0.06	0.02	0.00	0.05	-0.03	0.00
12	1	-0.34	-0.10	0.01	-0.52	-0.14	0.01	-0.32	-0.03	0.13
13	6	0.01	0.01	0.00	0.00	0.01	0.00	-0.02	0.14	-0.01
14	1	-0.61	-0.17	-0.03	-0.33	-0.11	-0.02	0.59	0.02	-0.03
15	6	-0.08	-0.02	0.00	0.04	0.01	0.01	-0.05	-0.03	0.09

16	1	0.33	0.10	0.00	-0.55	-0.15	0.00	-0.27	-0.03	-0.13
17	1	-0.07	-0.04	0.10	-0.24	-0.13	0.01	-0.23	0.02	0.00
18	1	0.54	0.14	-0.04	-0.39	-0.12	0.03	0.58	0.02	0.03

	31	32	33
	A	A	A
Frequencies --	858.9901	872.4756	885.5528
Red. masses --	4.1543	2.2814	1.2292
Frc consts --	1.8060	1.0232	0.5679
IR Inten --	0.0784	0.4186	0.0766

Atom	AN	X	Y	Z	X	Y	Z	X	Y	Z
1	13	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
2	13	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
3	13	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
4	13	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
5	3	0.00	0.00	0.00	0.02	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
6	3	0.00	0.00	0.00	0.00	-0.01	0.00	0.00	0.00	0.00
7	3	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
8	20	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
9	6	-0.06	0.20	-0.22	0.02	0.12	0.01	-0.08	-0.03	0.01
10	6	-0.02	0.15	0.14	-0.06	-0.01	0.17	0.05	0.00	0.00
11	6	0.06	-0.23	-0.20	0.01	0.09	-0.04	0.08	0.04	0.01
12	1	0.01	0.32	-0.10	-0.28	-0.13	-0.19	0.56	0.14	-0.01
13	6	0.00	0.02	0.11	0.07	-0.15	0.01	0.00	0.00	-0.01
14	1	-0.11	-0.28	0.27	0.40	0.23	0.16	-0.31	-0.08	-0.02
15	6	0.03	-0.13	0.17	-0.05	-0.03	-0.16	-0.05	0.00	-0.01
16	1	0.02	-0.31	-0.10	-0.18	-0.13	0.20	-0.61	-0.15	0.02
17	1	0.00	-0.01	-0.43	-0.30	-0.36	0.01	-0.02	-0.01	0.01
18	1	0.06	0.27	0.27	0.36	0.22	-0.15	0.37	0.10	-0.03

	34	35	36
	A	A	A
Frequencies --	1015.5997	1023.2264	1073.1353
Red. masses --	1.3970	1.4845	1.2539
Frc consts --	0.8490	0.9157	0.8508
IR Inten --	7.9016	16.9901	3.0091

Atom	AN	X	Y	Z	X	Y	Z	X	Y	Z
1	13	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
2	13	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
3	13	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
4	13	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
5	3	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
6	3	0.00	0.00	0.00	0.00	0.01	0.00	0.00	0.00	0.00
7	3	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
8	20	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
9	6	0.02	-0.07	0.01	0.01	-0.04	0.09	0.00	0.02	0.03

10	6	0.01	0.01	0.09	-0.02	0.04	-0.05	0.03	-0.08	-0.03
11	6	-0.03	0.08	0.02	0.01	-0.04	-0.08	0.00	-0.02	0.04
12	1	0.03	-0.29	-0.26	-0.05	0.12	0.32	-0.08	0.21	0.29
13	6	0.00	0.00	-0.09	0.04	-0.11	0.00	0.00	0.00	-0.05
14	1	-0.02	-0.01	0.10	-0.10	0.52	-0.22	0.13	-0.48	0.12
15	6	-0.01	-0.01	0.08	-0.02	0.05	0.06	-0.03	0.08	-0.03
16	1	-0.03	0.25	-0.23	-0.05	0.14	-0.37	0.08	-0.19	0.32
17	1	-0.01	-0.03	-0.82	-0.03	-0.16	-0.06	-0.01	-0.02	-0.38
18	1	0.04	-0.06	0.06	-0.09	0.52	0.19	-0.14	0.51	0.09

	37	38	39
	A	A	A
Frequencies --	1076.8800	1140.5978	1283.6350
Red. masses --	1.2627	5.1995	1.2905
Frc consts --	0.8628	3.9854	1.2528
IR Inten --	0.1199	8.7560	0.0033

Atom	AN	X	Y	Z	X	Y	Z	X	Y	Z
1	13	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
2	13	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
3	13	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
4	13	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
5	3	0.00	0.00	0.00	-0.01	-0.01	0.00	0.00	0.00	0.00
6	3	0.00	0.00	0.00	0.01	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
7	3	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
8	20	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
9	6	-0.01	0.04	0.07	0.07	-0.21	0.18	0.01	-0.04	-0.05
10	6	0.02	-0.03	0.05	-0.01	0.09	0.24	0.02	-0.06	0.01
11	6	-0.01	0.03	-0.08	0.07	-0.23	-0.16	-0.01	0.03	-0.06
12	1	-0.08	0.35	0.48	0.07	-0.35	0.07	-0.08	0.26	0.34
13	6	-0.01	-0.01	0.00	-0.08	0.28	-0.01	0.00	0.00	0.09
14	1	0.04	-0.34	0.16	-0.13	0.26	0.21	-0.13	0.41	-0.17
15	6	0.02	-0.03	-0.05	-0.02	0.07	-0.25	-0.02	0.06	0.01
16	1	-0.08	0.30	-0.49	0.07	-0.35	-0.04	0.08	-0.23	0.36
17	1	0.07	0.04	-0.01	-0.09	0.31	-0.01	0.00	-0.02	-0.41
18	1	0.04	-0.34	-0.14	-0.13	0.24	-0.23	0.13	-0.42	-0.14

	40	41	42
	A	A	A
Frequencies --	1377.2926	1381.3905	1462.8778
Red. masses --	4.4583	4.7575	2.4103
Frc consts --	4.9827	5.3488	3.0391
IR Inten --	2.4487	0.0064	4.0143

Atom	AN	X	Y	Z	X	Y	Z	X	Y	Z
1	13	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
2	13	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
3	13	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00

4	13	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
5	3	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
6	3	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.01	0.00
7	3	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
8	20	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
9	6	-0.05	0.16	0.25	0.02	-0.13	0.03	0.00	-0.02	0.15
10	6	0.08	-0.21	-0.07	-0.05	0.21	-0.20	-0.05	0.15	-0.09
11	6	-0.05	0.15	-0.26	-0.02	0.12	0.03	0.00	-0.02	-0.16
12	1	0.08	-0.29	-0.34	0.04	-0.12	0.04	0.09	-0.30	-0.18
13	6	-0.07	0.10	0.01	0.00	0.01	0.37	0.04	-0.11	0.00
14	1	-0.11	0.20	-0.24	0.11	-0.38	0.01	0.15	-0.50	0.14
15	6	0.09	-0.21	0.07	0.04	-0.21	-0.19	-0.04	0.15	0.09
16	1	0.08	-0.25	0.35	-0.05	0.14	0.01	0.09	-0.29	0.22
17	1	0.12	0.21	-0.03	-0.01	-0.03	-0.57	0.03	-0.15	0.02
18	1	-0.11	0.24	0.22	-0.10	0.36	-0.04	0.15	-0.50	-0.10

	43	44	45
	A	A	A
Frequencies --	1469.9335	3103.4776	3196.0884
Red. masses --	2.7423	1.0899	1.0876
Frc consts --	3.4911	6.1850	6.5454
IR Inten --	0.4471	9.3910	0.2706

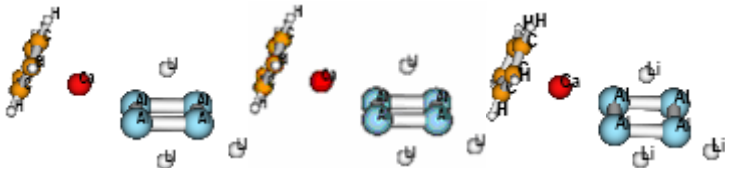
Atom	AN	X	Y	Z	X	Y	Z	X	Y	Z
1	13	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
2	13	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
3	13	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
4	13	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
5	3	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
6	3	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
7	3	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
8	20	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
9	6	-0.05	0.19	0.08	0.00	0.00	0.00	0.01	-0.04	0.03
10	6	0.04	-0.12	-0.08	0.00	0.00	0.00	0.00	-0.01	-0.03
11	6	0.05	-0.18	0.09	0.00	0.00	0.00	-0.01	0.04	0.03
12	1	0.04	-0.21	-0.47	0.00	0.00	0.00	-0.13	0.46	-0.38
13	6	0.00	0.00	0.14	-0.04	0.08	0.00	0.00	0.00	0.00
14	1	-0.04	0.13	-0.21	-0.01	0.03	0.08	-0.04	0.11	0.33
15	6	-0.05	0.13	-0.09	0.00	0.00	0.00	0.00	0.01	-0.03
16	1	-0.04	0.16	-0.47	0.00	0.00	0.00	0.14	-0.51	-0.35
17	1	0.00	-0.02	-0.44	0.49	-0.86	0.04	0.00	0.00	0.00
18	1	0.05	-0.17	-0.20	-0.01	0.02	-0.08	0.04	-0.07	0.30

	46	47	48
	A	A	A
Frequencies --	3205.5975	3215.1164	3223.9714
Red. masses --	1.0921	1.0961	1.1034

Frc consts	--	6.6119			6.6759			6.7573		
IR Inten	--	4.7735			7.8651			4.2309		
Atom	AN	X	Y	Z	X	Y	Z	X	Y	Z
1	13	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
2	13	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
3	13	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
4	13	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
5	3	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
6	3	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
7	3	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
8	20	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
9	6	0.01	-0.03	0.02	-0.01	0.03	-0.02	-0.01	0.04	-0.03
10	6	0.01	-0.01	-0.05	0.01	-0.02	-0.05	0.00	-0.01	-0.04
11	6	0.01	-0.03	-0.03	0.01	-0.02	-0.01	-0.01	0.04	0.03
12	1	-0.09	0.30	-0.25	0.09	-0.32	0.26	0.12	-0.40	0.33
13	6	0.00	-0.01	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	-0.01	0.00
14	1	-0.07	0.19	0.57	-0.07	0.19	0.54	-0.05	0.13	0.38
15	6	0.00	-0.01	0.04	-0.01	0.02	-0.06	0.01	-0.01	0.05
16	1	-0.11	0.40	0.28	-0.05	0.19	0.12	0.11	-0.43	-0.30
17	1	-0.04	0.07	0.00	0.00	0.00	-0.01	-0.03	0.06	0.00
18	1	-0.05	0.11	-0.43	0.08	-0.16	0.63	-0.06	0.13	-0.49

$CpCaAl_4Li_3 \rightarrow CpLi + Al_4Li_2Ca$ **-16.8571642**

$CpCaAl_4Li_3 \rightarrow Cp^- + Al_4Li_3Ca^+$ **-131.6113325**



Charge = 0 Multiplicity = 1

Al,0,-3.67762318,1.0631297532,1.2540079705
Al,0,-1.3039210163,-0.14155913,1.3204815933
Al,0,-1.385464697,-0.4329564738,-1.2049763821
Al,0,-3.760542635,0.7700827854,-1.2675820929
Li,0,-5.9792445909,0.272699788,0.1415511698
Li,0,-3.4521786621,-1.6134090537,0.2772769604
Li,0,-1.5591751279,2.1945366217,-0.2252601276
Ca,0,1.4926104261,-0.1975019765,-0.0455545766
C,0,3.8702884688,-0.2675026634,-1.2240519551
C,0,3.9620814499,0.7539301454,-0.2442497173
C,0,3.7439139975,-1.509781365,-0.5514998621
H,0,3.9330279734,-0.1283696206,-2.2964337729
C,0,3.8921122329,0.1429192285,1.0337639049

H,0,4.1095739976,1.8095771021,-0.4376347623
C,0,3.7573435262,-1.2559704264,0.8436950408
H,0,3.6923523143,-2.4845553908,-1.0208438597
H,0,3.9722229881,0.6502878429,1.987370085
H,0,3.7161411628,-2.0030121378,1.6268812133

State=1-A\HF=-1863.6325383

		1			2			3		
		A			A			A		
Frequencies --		8.5656			25.1466			30.6962		
Red. masses --		4.5007			8.7684			8.4067		
Frc consts --		0.0002			0.0033			0.0047		
IR Inten --		0.0299			0.0757			0.6808		
Atom	AN	X	Y	Z	X	Y	Z	X	Y	Z
1	13	0.00	-0.03	0.09	-0.06	0.00	0.10	-0.11	0.08	0.04
2	13	0.00	0.03	0.10	0.04	0.00	-0.19	-0.08	-0.10	0.00
3	13	0.00	0.03	-0.09	0.03	0.01	-0.18	0.08	-0.10	-0.02
4	13	0.00	-0.03	-0.10	-0.07	-0.01	0.11	0.10	0.08	-0.03
5	3	0.00	0.03	-0.01	0.05	-0.01	0.39	0.00	0.28	0.03
6	3	0.00	0.15	0.00	0.24	0.00	0.05	0.01	0.03	0.00
7	3	0.00	-0.15	0.00	-0.21	0.00	-0.11	-0.02	-0.12	-0.01
8	20	0.00	0.01	0.00	0.01	0.02	-0.19	0.00	-0.25	0.00
9	6	0.02	0.04	0.19	0.07	-0.01	0.15	-0.19	0.16	0.02
10	6	0.00	0.19	0.01	0.19	0.00	0.14	0.00	0.16	0.01
11	6	0.01	-0.18	0.10	-0.12	-0.01	0.16	-0.11	0.14	0.02
12	1	0.03	0.09	0.36	0.13	-0.01	0.17	-0.38	0.17	0.04
13	6	-0.02	0.06	-0.19	0.07	-0.01	0.14	0.21	0.15	-0.01
14	1	0.00	0.37	0.02	0.35	0.00	0.14	0.00	0.18	0.01
15	6	-0.01	-0.16	-0.13	-0.13	-0.01	0.15	0.14	0.14	0.00
16	1	0.02	-0.33	0.20	-0.25	-0.02	0.17	-0.22	0.15	0.03
17	1	-0.03	0.13	-0.35	0.11	0.00	0.13	0.39	0.16	-0.03
18	1	-0.02	-0.30	-0.24	-0.26	-0.02	0.15	0.26	0.14	-0.01

		4			5			6		
		A			A			A		
Frequencies --		49.9898			69.3074			107.5360		
Red. masses --		11.6098			12.6166			14.4330		
Frc consts --		0.0171			0.0357			0.0983		
IR Inten --		6.2619			2.6370			0.3500		
Atom	AN	X	Y	Z	X	Y	Z	X	Y	Z
1	13	0.07	0.00	0.00	0.15	-0.05	-0.18	-0.09	-0.10	0.10
2	13	-0.01	0.00	0.24	-0.04	0.20	0.11	0.07	0.34	-0.16
3	13	0.00	-0.01	0.24	0.03	0.20	-0.12	-0.09	0.34	0.16
4	13	0.07	0.01	0.00	-0.16	-0.05	0.18	0.07	-0.10	-0.10
5	3	-0.05	0.00	-0.36	0.00	-0.45	0.00	-0.01	0.11	-0.01

6	3	-0.22	0.00	0.02	0.00	0.40	0.00	-0.01	-0.69	0.00
7	3	0.12	0.00	0.15	-0.01	0.36	0.00	-0.01	-0.24	0.00
8	20	-0.03	-0.01	-0.35	0.00	-0.24	0.00	0.01	-0.14	0.00
9	6	0.03	0.00	0.03	-0.12	0.00	0.01	-0.07	-0.02	0.00
10	6	0.19	0.00	0.03	0.00	0.00	0.00	0.01	-0.02	0.00
11	6	-0.20	0.01	0.04	-0.07	-0.01	0.01	-0.03	-0.03	0.00
12	1	0.07	0.00	0.04	-0.25	0.00	0.02	-0.13	-0.02	0.01
13	6	0.06	0.00	0.03	0.13	-0.01	-0.01	0.09	-0.03	0.00
14	1	0.38	0.00	0.03	-0.01	0.01	0.00	0.00	-0.02	0.00
15	6	-0.17	0.01	0.04	0.09	-0.01	-0.01	0.06	-0.03	0.00
16	1	-0.36	0.01	0.05	-0.13	-0.01	0.01	-0.07	-0.02	0.00
17	1	0.14	0.00	0.03	0.25	0.00	-0.02	0.15	-0.02	-0.01
18	1	-0.32	0.01	0.05	0.17	-0.02	-0.01	0.11	-0.03	-0.01

	7	8	9
	A	A	A
Frequencies --	111.3948	117.4092	122.2157
Red. masses --	9.0032	10.9032	10.7311
Frc consts --	0.0658	0.0886	0.0944
IR Inten --	2.5522	1.2313	7.8144

Atom	AN	X	Y	Z	X	Y	Z	X	Y	Z
1	13	0.15	0.01	-0.11	0.03	0.16	-0.17	-0.14	0.01	-0.19
2	13	0.07	-0.01	0.03	0.04	0.01	0.19	-0.13	0.00	0.14
3	13	0.07	0.03	0.04	-0.03	0.01	-0.20	-0.13	-0.01	0.12
4	13	0.15	-0.02	-0.11	-0.02	0.16	0.19	-0.15	0.01	-0.18
5	3	0.31	0.01	0.53	0.00	-0.20	-0.02	0.07	-0.01	0.70
6	3	0.23	-0.01	0.01	0.01	-0.49	0.00	-0.11	-0.01	-0.05
7	3	0.30	0.00	0.04	0.00	-0.72	0.00	0.09	-0.02	0.10
8	20	-0.14	-0.01	-0.01	0.00	0.02	0.00	0.10	0.01	-0.03
9	6	-0.19	0.00	0.01	0.00	0.00	0.00	0.17	0.00	-0.01
10	6	-0.18	0.00	0.01	-0.01	0.00	0.00	0.18	0.00	-0.01
11	6	-0.20	0.00	0.01	0.00	0.00	0.00	0.15	0.00	-0.01
12	1	-0.21	0.00	0.01	0.01	0.00	0.00	0.19	0.00	-0.01
13	6	-0.18	0.00	0.01	-0.01	0.00	0.00	0.16	0.00	-0.01
14	1	-0.18	0.00	0.01	-0.01	0.00	0.00	0.21	0.00	-0.01
15	6	-0.19	0.00	0.01	-0.01	0.00	0.00	0.14	0.00	-0.01
16	1	-0.22	0.00	0.01	0.00	0.00	0.00	0.14	0.00	-0.01
17	1	-0.18	0.00	0.01	-0.02	0.00	0.00	0.18	0.00	-0.01
18	1	-0.20	0.00	0.01	-0.02	0.00	0.00	0.13	0.00	-0.01

	10	11	12
	A	A	A
Frequencies --	137.2704	154.2356	213.2940
Red. masses --	11.9247	11.5704	7.9115
Frc consts --	0.1324	0.1622	0.2121
IR Inten --	0.7540	1.4141	1.4710

Atom	AN	X	Y	Z	X	Y	Z	X	Y	Z
1	13	0.14	0.17	0.22	0.12	0.15	0.10	-0.09	0.04	0.05
2	13	0.10	-0.06	0.10	0.12	-0.02	-0.23	-0.07	-0.04	-0.07
3	13	-0.10	-0.07	-0.11	-0.12	-0.02	0.23	-0.06	0.04	-0.07
4	13	-0.14	0.16	-0.22	-0.12	0.15	-0.10	-0.09	-0.04	0.05
5	3	0.00	-0.28	0.00	0.00	-0.48	0.00	-0.10	-0.01	-0.15
6	3	0.01	-0.57	0.00	0.00	0.47	0.00	0.28	0.00	0.16
7	3	-0.01	0.57	0.00	0.01	-0.54	0.00	0.86	0.01	0.24
8	20	0.00	-0.06	0.00	0.00	-0.05	0.00	-0.01	0.00	0.00
9	6	-0.05	-0.01	0.00	-0.04	-0.01	0.00	0.03	0.00	-0.01
10	6	0.00	-0.01	0.00	0.00	-0.01	0.00	0.05	0.00	-0.01
11	6	-0.02	-0.01	0.00	-0.02	-0.01	0.00	-0.01	0.00	-0.01
12	1	-0.09	-0.01	0.00	-0.08	-0.01	0.00	0.04	0.00	-0.01
13	6	0.04	-0.01	0.00	0.04	-0.01	0.00	0.03	0.00	-0.01
14	1	-0.01	-0.01	0.00	-0.01	-0.01	0.00	0.08	0.00	-0.01
15	6	0.03	-0.01	0.00	0.03	-0.01	0.00	-0.01	0.00	-0.01
16	1	-0.05	-0.01	0.00	-0.05	-0.01	0.00	-0.02	0.00	-0.01
17	1	0.08	-0.01	0.00	0.08	-0.01	0.00	0.04	0.00	-0.01
18	1	0.06	-0.01	0.00	0.06	-0.01	0.00	-0.02	0.00	-0.01

	13	14	15
	A	A	A
Frequencies --	216.4381	227.4687	239.3426
Red. masses --	10.4364	7.7765	4.6483
Frc consts --	0.2881	0.2371	0.1569
IR Inten --	3.6885	1.6196	0.2145

Atom	AN	X	Y	Z	X	Y	Z	X	Y	Z
1	13	0.15	-0.03	-0.08	-0.03	0.01	-0.09	0.02	0.00	0.00
2	13	0.27	-0.03	0.02	-0.04	-0.02	0.08	-0.01	0.01	0.00
3	13	-0.27	-0.04	-0.02	-0.04	0.02	0.09	-0.02	-0.01	0.00
4	13	-0.15	-0.03	0.08	-0.03	-0.02	-0.09	0.01	0.00	0.00
5	3	-0.01	0.74	0.00	-0.05	0.01	-0.23	0.02	0.01	0.00
6	3	-0.01	0.10	0.00	0.84	0.01	0.28	0.00	0.00	0.02
7	3	0.01	-0.01	0.00	-0.33	0.00	0.02	-0.05	0.00	-0.03
8	20	0.00	0.01	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	-0.02	0.15
9	6	-0.13	-0.04	0.00	0.01	0.00	0.00	0.10	0.00	-0.10
10	6	-0.01	-0.04	0.00	0.00	0.00	0.00	0.29	0.00	-0.09
11	6	-0.07	-0.04	0.00	0.02	0.00	0.00	-0.23	0.02	-0.08
12	1	-0.25	-0.03	0.01	0.01	0.00	0.00	0.18	0.00	-0.09
13	6	0.13	-0.04	0.00	0.01	0.00	0.00	0.08	0.01	-0.09
14	1	-0.01	-0.04	0.00	-0.01	0.00	0.00	0.53	0.00	-0.09
15	6	0.09	-0.05	0.00	0.02	0.00	0.00	-0.24	0.01	-0.08
16	1	-0.14	-0.04	0.01	0.03	0.00	0.00	-0.41	0.02	-0.07
17	1	0.24	-0.04	-0.01	0.00	0.00	0.00	0.15	0.01	-0.09
18	1	0.17	-0.04	-0.01	0.03	0.00	0.00	-0.43	0.01	-0.07

		16			17			18		
		A			A			A		
Frequencies --		240.9289			256.3634			260.5655		
Red. masses --		5.1149			13.9558			19.0237		
Frc consts --		0.1749			0.5404			0.7610		
IR Inten --		0.1058			3.8815			10.4270		
Atom	AN	X	Y	Z	X	Y	Z	X	Y	Z
1	13	-0.07	0.00	0.00	-0.21	0.02	-0.06	0.40	-0.02	0.05
2	13	-0.03	0.00	0.01	0.32	-0.07	0.05	-0.39	0.01	-0.09
3	13	0.04	0.00	-0.01	0.34	0.08	0.06	0.35	0.01	0.08
4	13	0.06	0.00	-0.01	-0.24	-0.02	-0.06	-0.38	-0.03	-0.04
5	3	0.00	-0.15	0.00	-0.46	0.02	0.04	0.02	0.44	0.00
6	3	0.00	0.00	0.00	0.06	-0.01	-0.41	0.00	-0.27	0.02
7	3	0.00	0.02	0.00	-0.03	-0.01	0.34	0.00	-0.28	-0.01
8	20	0.00	0.16	0.01	0.09	-0.01	0.03	0.00	0.07	0.00
9	6	-0.27	-0.08	0.00	-0.08	0.00	-0.01	-0.06	-0.02	0.00
10	6	0.01	-0.09	-0.01	-0.06	0.00	-0.01	0.00	-0.02	0.00
11	6	-0.18	-0.09	0.00	-0.12	0.01	-0.01	-0.03	-0.02	0.00
12	1	-0.49	-0.07	0.00	-0.10	0.00	-0.01	-0.11	-0.01	0.00
13	6	0.27	-0.09	-0.01	-0.09	0.00	-0.01	0.06	-0.02	0.00
14	1	0.02	-0.09	-0.01	-0.06	0.00	-0.01	0.00	-0.02	0.00
15	6	0.15	-0.09	-0.02	-0.13	0.00	-0.01	0.04	-0.02	0.00
16	1	-0.32	-0.08	0.01	-0.18	0.01	0.00	-0.06	-0.02	0.00
17	1	0.49	-0.09	-0.02	-0.11	0.00	-0.01	0.12	-0.02	0.00
18	1	0.28	-0.09	-0.02	-0.18	0.00	0.00	0.08	-0.02	0.00

		19			20			21		
		A			A			A		
Frequencies --		294.6479			312.3866			325.8730		
Red. masses --		18.6966			12.5622			8.0139		
Frc consts --		0.9564			0.7223			0.5014		
IR Inten --		66.2770			1.4728			39.8038		
Atom	AN	X	Y	Z	X	Y	Z	X	Y	Z
1	13	0.09	0.39	0.01	0.00	0.24	-0.05	0.03	-0.05	-0.08
2	13	-0.02	-0.35	0.01	0.05	0.26	0.00	0.04	-0.08	-0.09
3	13	-0.02	0.35	0.01	0.05	-0.26	0.00	0.04	0.08	-0.09
4	13	0.10	-0.38	0.01	0.00	-0.24	-0.05	0.03	0.05	-0.08
5	3	-0.39	0.00	0.13	-0.38	0.00	0.09	-0.04	0.00	0.01
6	3	-0.13	0.00	-0.08	-0.15	0.00	0.59	-0.29	0.00	0.65
7	3	-0.13	0.00	-0.23	0.08	0.00	-0.31	-0.20	0.00	0.63
8	20	-0.16	0.00	0.00	0.14	0.00	-0.01	-0.03	0.00	0.00
9	6	0.10	0.00	0.00	-0.08	0.00	0.00	0.02	0.00	0.00
10	6	0.10	0.00	0.00	-0.08	0.00	0.00	0.02	0.00	0.00
11	6	0.10	0.00	0.00	-0.07	0.00	0.00	0.02	0.00	0.00
12	1	0.14	-0.01	0.00	-0.11	0.00	0.01	0.03	0.00	0.00

13	6	0.10	0.00	0.00	-0.08	0.00	0.00	0.02	0.00	0.00
14	1	0.14	0.00	0.00	-0.11	0.00	0.00	0.02	0.00	0.00
15	6	0.10	0.00	0.00	-0.07	0.00	0.00	0.02	0.00	0.00
16	1	0.14	0.00	-0.01	-0.11	0.00	0.01	0.02	0.00	0.00
17	1	0.14	0.00	0.00	-0.11	0.00	0.00	0.03	0.00	0.00
18	1	0.14	0.00	-0.01	-0.11	0.00	0.01	0.02	0.00	0.00

	22	23	24
	A	A	A
Frequencies --	332.1844	343.4330	369.6487
Red. masses --	13.7897	9.8746	9.2791
Frc consts --	0.8965	0.6862	0.7470
IR Inten --	179.0055	6.8275	14.2074

Atom	AN	X	Y	Z	X	Y	Z	X	Y	Z
1	13	0.02	0.02	0.02	-0.04	-0.20	-0.02	-0.17	0.11	-0.01
2	13	-0.12	-0.21	-0.01	0.08	-0.14	0.05	0.10	-0.02	0.03
3	13	-0.12	0.21	-0.01	0.08	0.14	0.05	0.10	0.02	0.03
4	13	0.02	-0.02	0.02	-0.05	0.20	-0.02	-0.17	-0.11	-0.01
5	3	0.26	0.00	-0.05	-0.25	0.00	0.06	0.85	0.01	-0.24
6	3	-0.06	0.00	0.06	-0.10	0.00	0.47	-0.15	0.00	0.22
7	3	-0.05	0.00	-0.04	0.19	0.00	-0.72	0.00	0.00	-0.17
8	20	0.43	-0.01	-0.02	-0.03	0.00	0.00	-0.06	0.00	0.01
9	6	-0.19	0.01	0.00	0.01	0.00	0.00	0.02	0.00	0.00
10	6	-0.19	0.00	0.00	0.01	0.00	0.00	0.02	0.00	0.00
11	6	-0.18	0.00	0.01	0.01	0.00	0.00	0.02	0.00	0.00
12	1	-0.30	0.01	0.01	0.01	0.00	0.00	0.04	0.00	0.00
13	6	-0.19	0.00	0.00	0.01	0.00	0.00	0.02	0.00	0.00
14	1	-0.30	0.01	0.00	0.01	0.00	0.00	0.04	0.00	0.00
15	6	-0.19	0.00	0.01	0.01	0.00	0.00	0.02	0.00	0.00
16	1	-0.29	0.01	0.01	0.01	0.00	0.00	0.04	0.00	0.00
17	1	-0.30	0.00	0.01	0.01	0.00	0.00	0.04	0.00	0.00
18	1	-0.29	0.00	0.01	0.01	0.00	0.00	0.04	0.00	0.00

	25	26	27
	A	A	A
Frequencies --	623.7636	624.3647	761.4907
Red. masses --	4.6895	4.6970	1.2683
Frc consts --	1.0750	1.0788	0.4333
IR Inten --	0.0073	0.0094	6.1738

Atom	AN	X	Y	Z	X	Y	Z	X	Y	Z
1	13	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
2	13	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
3	13	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
4	13	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
5	3	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
6	3	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00

7	3	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
8	20	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
9	6	0.32	-0.02	-0.01	-0.18	0.01	-0.01	0.07	0.00	0.00
10	6	-0.15	0.02	0.00	0.33	0.00	0.01	0.09	0.00	0.00
11	6	-0.36	0.02	0.02	-0.04	-0.01	0.01	-0.05	0.00	0.00
12	1	0.46	-0.03	-0.01	-0.25	0.01	0.00	-0.45	0.03	0.01
13	6	-0.07	-0.01	0.02	-0.36	-0.01	0.00	0.00	0.00	0.00
14	1	-0.21	0.01	0.00	0.46	-0.01	0.01	-0.64	0.01	-0.01
15	6	0.27	-0.01	-0.03	0.25	0.01	-0.01	-0.09	0.00	0.01
16	1	-0.51	0.02	0.03	-0.06	0.00	0.01	0.27	-0.02	-0.01
17	1	-0.10	0.00	0.01	-0.51	-0.01	0.00	0.01	0.00	0.01
18	1	0.38	0.00	-0.03	0.35	0.01	-0.02	0.55	0.01	-0.03

	28	29	30
	A	A	A
Frequencies --	763.2524	776.6929	859.0391
Red. masses --	1.2694	1.1195	3.7043
Frc consts --	0.4357	0.3979	1.6106
IR Inten --	0.0497	395.0975	0.0071

Atom	AN	X	Y	Z	X	Y	Z	X	Y	Z
1	13	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
2	13	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
3	13	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
4	13	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
5	3	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
6	3	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
7	3	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
8	20	0.00	0.00	0.00	-0.01	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
9	6	0.08	0.00	0.00	0.04	0.00	0.00	0.02	-0.19	0.12
10	6	-0.04	0.00	0.00	0.03	0.00	0.00	-0.01	-0.09	-0.06
11	6	0.08	0.00	-0.01	0.05	0.00	0.00	-0.02	0.17	0.24
12	1	-0.49	0.03	0.00	-0.39	0.03	0.00	-0.26	-0.26	-0.17
13	6	-0.10	0.00	0.00	0.04	0.00	0.00	-0.01	-0.09	-0.13
14	1	0.25	-0.02	0.00	-0.39	0.01	-0.01	0.10	0.34	-0.03
15	6	-0.02	0.00	0.00	0.05	0.00	0.00	0.02	0.20	-0.17
16	1	-0.53	0.02	0.04	-0.46	0.02	0.03	0.33	0.11	0.25
17	1	0.61	0.01	-0.01	-0.45	-0.01	0.00	0.10	-0.23	0.24
18	1	0.13	-0.01	-0.01	-0.51	-0.01	0.03	-0.27	0.04	-0.29

	31	32	33
	A	A	A
Frequencies --	859.3032	872.4375	875.9724
Red. masses --	3.4224	1.2829	1.2334
Frc consts --	1.4889	0.5753	0.5576
IR Inten --	0.0038	0.0191	0.0233

Atom	AN	X	Y	Z	X	Y	Z	X	Y	Z

1	13	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
2	13	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
3	13	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
4	13	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
5	3	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
6	3	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
7	3	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
8	20	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
9	6	-0.02	0.20	0.02	-0.07	-0.05	0.00	-0.04	-0.01	0.03
10	6	0.04	-0.04	0.27	0.07	0.00	-0.06	-0.01	-0.03	0.00
11	6	0.01	0.06	-0.07	0.03	-0.02	0.04	0.07	0.03	0.02
12	1	0.27	0.11	-0.29	0.53	-0.08	0.02	0.30	-0.05	-0.02
13	6	-0.04	-0.25	-0.06	-0.06	0.05	-0.01	0.05	-0.02	-0.03
14	1	-0.34	0.06	0.27	-0.60	0.02	-0.07	0.06	0.02	0.00
15	6	0.01	0.03	-0.16	0.02	0.02	0.03	-0.07	0.03	-0.02
16	1	-0.09	-0.29	0.16	-0.25	0.06	0.02	-0.57	0.04	0.08
17	1	0.31	-0.18	-0.22	0.48	0.04	0.03	-0.41	-0.04	0.01
18	1	-0.15	0.31	0.08	-0.14	-0.04	-0.01	0.61	0.03	-0.07

	34	35	36
	A	A	A
Frequencies --	1026.2793	1026.8307	1075.1467
Red. masses --	1.4566	1.4565	1.2393
Frc consts --	0.9039	0.9048	0.8440
IR Inten --	17.3478	17.7514	0.0117

Atom	AN	X	Y	Z	X	Y	Z	X	Y	Z
1	13	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
2	13	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
3	13	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
4	13	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
5	3	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
6	3	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
7	3	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
8	20	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
9	6	0.00	-0.07	0.06	0.00	-0.08	-0.03	0.00	0.02	0.08
10	6	0.00	0.06	-0.04	0.00	0.02	0.10	0.00	-0.07	0.01
11	6	0.00	-0.02	-0.10	0.00	0.08	0.02	0.00	0.07	-0.02
12	1	0.01	0.02	0.40	-0.02	-0.19	-0.43	0.02	0.15	0.60
13	6	0.00	-0.10	-0.03	0.00	0.02	-0.06	-0.01	-0.01	-0.04
14	1	0.01	0.57	-0.01	0.00	0.24	0.12	-0.03	-0.52	-0.01
15	6	0.00	0.03	0.06	0.00	-0.08	0.07	0.01	0.00	-0.03
16	1	-0.01	0.21	-0.25	0.00	0.47	-0.23	0.03	0.42	-0.25
17	1	0.01	-0.13	0.01	-0.01	0.21	-0.56	0.03	0.06	-0.24
18	1	0.02	0.44	0.39	0.00	-0.18	0.00	-0.04	-0.10	-0.11

	37	38	39

		A			A			A		
Frequencies --		1075.9367			1139.7112			1287.9545		
Red. masses --		1.2397			5.8564			1.2800		
Frc consts --		0.8455			4.4820			1.2510		
IR Inten --		0.0290			5.4405			0.0002		
Atom	AN	X	Y	Z	X	Y	Z	X	Y	Z
1	13	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
2	13	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
3	13	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
4	13	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
5	3	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
6	3	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
7	3	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
8	20	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
9	6	-0.01	0.03	0.00	0.00	-0.29	0.08	0.00	0.02	0.07
10	6	0.01	0.04	0.02	0.01	-0.02	0.30	0.00	0.07	0.00
11	6	0.01	0.04	-0.05	-0.01	-0.16	-0.25	0.00	-0.06	0.04
12	1	0.04	0.04	0.04	-0.04	-0.32	0.09	-0.01	-0.11	-0.43
13	6	0.00	-0.04	0.07	0.01	0.28	0.11	0.00	0.03	-0.06
14	1	-0.03	0.32	0.04	-0.03	-0.02	0.33	-0.01	-0.44	-0.03
15	6	-0.01	-0.07	-0.05	0.00	0.19	-0.23	0.00	-0.05	-0.04
16	1	-0.03	0.33	-0.23	-0.05	-0.18	-0.28	0.00	0.37	-0.24
17	1	0.03	-0.22	0.54	-0.03	0.31	0.12	0.01	-0.16	0.41
18	1	-0.01	-0.47	-0.38	-0.04	0.21	-0.26	0.01	0.34	0.28

		40			41			42		
		A			A			A		
Frequencies --		1382.9602			1383.7154			1466.5943		
Red. masses --		4.7266			4.7555			2.5151		
Frc consts --		5.3262			5.3647			3.1873		
IR Inten --		0.0053			0.0003			0.0178		
Atom	AN	X	Y	Z	X	Y	Z	X	Y	Z
1	13	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
2	13	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
3	13	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
4	13	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
5	3	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
6	3	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
7	3	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
8	20	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
9	6	-0.01	-0.04	0.25	-0.03	-0.16	-0.21	0.00	-0.06	0.16
10	6	0.02	-0.04	-0.15	0.01	0.33	0.00	0.00	0.18	-0.05
11	6	0.01	0.29	-0.16	0.03	0.03	0.15	-0.01	0.01	-0.15
12	1	0.02	-0.20	-0.30	0.04	-0.02	0.37	-0.01	-0.21	-0.36
13	6	-0.02	0.06	0.20	0.02	-0.17	0.25	0.00	-0.13	-0.02

14	1	-0.05	0.08	-0.15	-0.02	-0.48	-0.05	-0.02	-0.50	-0.10
15	6	0.00	-0.27	-0.14	-0.03	-0.03	-0.20	0.01	0.13	0.14
16	1	-0.01	-0.39	0.28	-0.03	0.15	0.09	0.00	-0.30	0.02
17	1	0.04	0.22	-0.17	-0.03	0.09	-0.43	-0.01	-0.12	-0.14
18	1	0.00	0.29	0.33	0.04	0.25	0.02	-0.02	-0.45	-0.33

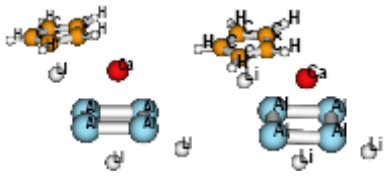
		43			44			45		
		A			A			A		
Frequencies --		1467.3833			3187.7545			3189.2472		
Red. masses --		2.5161			1.0873			1.0873		
Frc consts --		3.1920			6.5097			6.5162		
IR Inten --		0.0271			0.0712			0.0182		
Atom	AN	X	Y	Z	X	Y	Z	X	Y	Z
1	13	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
2	13	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
3	13	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
4	13	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
5	3	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
6	3	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
7	3	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
8	20	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
9	6	0.01	0.12	0.11	0.00	-0.05	0.01	0.00	0.02	-0.01
10	6	0.00	-0.08	-0.12	0.00	0.00	-0.06	0.00	0.00	-0.01
11	6	0.00	-0.18	0.04	0.00	0.01	0.02	0.00	-0.03	-0.04
12	1	-0.02	0.01	-0.41	0.03	0.55	-0.15	-0.02	-0.28	0.07
13	6	0.00	-0.05	0.19	0.00	0.03	0.01	0.00	0.04	0.01
14	1	-0.01	0.26	-0.13	-0.01	-0.04	0.66	0.00	0.00	0.13
15	6	-0.01	0.11	-0.08	0.00	0.00	0.00	0.00	-0.03	0.04
16	1	0.00	0.38	-0.33	-0.02	-0.15	-0.23	0.04	0.30	0.47
17	1	-0.01	0.23	-0.51	0.00	-0.37	-0.15	0.00	-0.43	-0.17
18	1	0.00	0.03	-0.18	0.00	0.05	-0.05	-0.03	0.39	-0.47

		46			47			48		
		A			A			A		
Frequencies --		3205.1571			3205.8850			3219.6048		
Red. masses --		1.0955			1.0955			1.1048		
Frc consts --		6.6307			6.6337			6.7472		
IR Inten --		10.8720			9.9870			1.4465		
Atom	AN	X	Y	Z	X	Y	Z	X	Y	Z
1	13	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
2	13	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
3	13	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
4	13	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
5	3	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
6	3	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
7	3	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00

8	20	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
9	6	0.00	0.03	-0.01	0.00	0.04	-0.01	0.00	-0.04	0.01
10	6	0.00	0.00	-0.05	0.00	0.00	0.01	0.00	0.00	0.04
11	6	0.00	-0.02	-0.03	0.00	0.02	0.04	0.00	-0.02	-0.04
12	1	-0.02	-0.37	0.09	-0.03	-0.50	0.13	0.02	0.41	-0.11
13	6	0.00	-0.01	0.00	0.00	0.05	0.02	0.00	0.04	0.02
14	1	-0.01	-0.03	0.60	0.00	0.01	-0.13	0.01	0.02	-0.40
15	6	0.00	0.03	-0.04	0.00	0.01	-0.02	0.00	0.03	-0.03
16	1	0.03	0.21	0.31	-0.04	-0.27	-0.43	0.04	0.25	0.39
17	1	0.00	0.09	0.03	0.01	-0.59	-0.23	0.00	-0.43	-0.17
18	1	0.03	-0.37	0.44	0.01	-0.14	0.18	0.02	-0.30	0.37

$CpCaAl_4Li_3 \rightarrow CpCa^+ + Al_4Li_3^-$ **-131.427974**

$CpCaAl_4Li_3 \rightarrow Cp^- + Al_4Li_3Ca^+$ **-147.4386281**



Charge = 0 Multiplicity = 1

Al,0,-2.6668120723,0.62806562,1.3157545465
Al,0,-0.9774957087,-1.5211604974,1.2074698338
Al,0,-0.9984299161,-1.4549450536,-1.2704931586
Al,0,-2.6887173175,0.6948990303,-1.2354959469
Li,0,1.7189944559,-1.195886303,-0.0508879481
Li,0,-4.933417121,1.2325019146,0.0728121244
Li,0,-3.4422245158,-1.7688394249,-0.019560032
Ca,0,0.060449841,1.2429354878,0.0337346862
C,0,3.860736464,-0.9869199874,-0.0611583956
C,0,3.4244638468,-0.2434995536,-1.1829651865
C,0,3.4419590795,-0.3112124742,1.1090724164
H,0,4.4256987392,-1.9102562568,-0.0926785558
C,0,2.7546491757,0.9115164851,-0.7100418679
H,0,3.5963984442,-0.4900290285,-2.2223348827
C,0,2.7655376806,0.8694314843,0.7154237171
H,0,3.629073028,-0.618558583,2.1294353425
H,0,2.4569628687,1.7462803991,-1.3416443636
H,0,2.477649353,1.6654611376,1.3993936302

State=1-A\HF=-1863.6229707

	1	2	3
	A	A	A
Frequencies --	35.5374	43.3987	71.3257
Red. masses --	5.5522	6.7760	8.1670
Frc consts --	0.0041	0.0075	0.0245

IR Inten --		0.0733			0.2038			4.4410		
Atom	AN	X	Y	Z	X	Y	Z	X	Y	Z
1	13	-0.07	0.07	0.08	-0.10	-0.04	0.02	0.06	-0.06	-0.01
2	13	-0.03	0.06	-0.09	-0.05	-0.04	-0.01	-0.06	-0.14	0.01
3	13	0.02	-0.06	-0.09	0.05	0.04	-0.01	-0.06	-0.14	-0.01
4	13	0.07	-0.07	0.08	0.10	0.04	0.02	0.06	-0.06	0.01
5	3	0.00	0.00	0.04	0.00	0.00	-0.06	0.03	-0.03	0.00
6	3	0.00	0.00	0.24	0.00	0.00	0.19	0.34	0.80	0.00
7	3	0.00	0.00	-0.02	0.00	0.00	0.12	-0.15	0.09	0.00
8	20	0.00	0.00	-0.12	0.00	0.00	-0.25	0.00	-0.07	0.00
9	6	0.00	0.00	0.25	0.00	0.00	-0.03	0.02	0.14	0.00
10	6	-0.10	0.15	0.11	-0.03	-0.17	0.07	-0.01	0.12	0.00
11	6	0.10	-0.15	0.11	0.03	0.17	0.07	-0.01	0.12	0.00
12	1	0.00	0.00	0.42	0.00	0.00	-0.15	0.06	0.16	0.00
13	6	-0.06	0.09	-0.10	-0.02	-0.11	0.23	-0.05	0.09	0.00
14	1	-0.19	0.29	0.16	-0.06	-0.34	0.03	0.01	0.13	0.00
15	6	0.06	-0.09	-0.10	0.02	0.11	0.23	-0.05	0.09	0.00
16	1	0.19	-0.29	0.16	0.07	0.34	0.03	0.00	0.13	0.00
17	1	-0.09	0.20	-0.24	-0.10	-0.24	0.35	-0.08	0.08	0.00
18	1	0.09	-0.20	-0.24	0.10	0.24	0.35	-0.08	0.08	0.00

		4			5			6		
		A			A			A		
Frequencies --		85.6230			98.0445			100.6574		
Red. masses --		12.9791			10.1186			5.1755		
Frc consts --		0.0561			0.0573			0.0309		
IR Inten --		0.7156			6.7316			0.7375		
Atom	AN	X	Y	Z	X	Y	Z	X	Y	Z
1	13	-0.06	-0.16	-0.07	-0.04	0.14	0.01	-0.01	-0.01	0.02
2	13	-0.22	-0.10	-0.19	-0.17	-0.06	-0.01	0.03	-0.01	0.10
3	13	0.22	0.10	-0.18	-0.17	-0.07	0.00	-0.04	0.01	0.10
4	13	0.06	0.16	-0.07	-0.04	0.14	-0.01	0.01	0.02	0.02
5	3	0.00	0.00	-0.26	0.22	-0.08	0.02	0.00	0.00	-0.40
6	3	0.00	0.00	0.00	-0.22	-0.30	0.00	0.00	-0.01	-0.02
7	3	0.00	0.00	0.56	-0.18	0.15	0.00	0.00	0.00	-0.29
8	20	0.00	0.00	0.24	0.07	-0.23	0.00	0.00	0.00	0.02
9	6	0.00	0.00	0.11	0.27	0.17	0.00	0.00	0.00	0.02
10	6	-0.14	-0.02	0.05	0.20	0.13	0.00	-0.23	-0.08	-0.02
11	6	0.15	0.02	0.05	0.18	0.12	0.00	0.23	0.09	-0.02
12	1	0.01	0.00	0.17	0.38	0.25	0.00	0.01	0.00	0.07
13	6	-0.09	-0.01	-0.02	0.07	0.05	0.00	-0.14	-0.05	-0.09
14	1	-0.27	-0.03	0.07	0.25	0.16	0.00	-0.43	-0.16	-0.01
15	6	0.09	0.01	-0.02	0.06	0.04	0.00	0.14	0.05	-0.09
16	1	0.28	0.04	0.07	0.22	0.15	0.00	0.43	0.16	-0.01
17	1	-0.12	0.00	-0.05	-0.01	0.01	0.00	-0.21	-0.07	-0.09

18	1	0.12	-0.01	-0.05	-0.03	0.01	0.00	0.21	0.07	-0.10

	7	8	9
	A	A	A
Frequencies --	108.2442	127.5755	136.1448
Red. masses --	8.1721	10.5938	17.0064
Frc consts --	0.0564	0.1016	0.1857
IR Inten --	2.6139	0.3647	2.1567

Atom	AN	X	Y	Z	X	Y	Z	X	Y	Z
1	13	0.16	0.07	0.00	0.16	0.17	-0.07	0.25	0.00	0.34
2	13	-0.02	-0.09	0.00	-0.04	0.16	0.09	-0.02	-0.19	-0.16
3	13	-0.02	-0.09	0.00	0.04	-0.16	0.09	0.02	0.20	-0.16
4	13	0.16	0.07	0.00	-0.16	-0.18	-0.07	-0.26	0.00	0.34
5	3	-0.20	-0.22	0.00	0.00	0.00	-0.14	0.00	0.00	-0.03
6	3	0.01	-0.33	0.00	0.00	0.00	-0.17	0.00	0.00	-0.69
7	3	-0.02	0.09	0.01	0.00	0.00	0.78	0.00	0.00	0.02
8	20	0.14	-0.05	0.00	0.00	0.00	-0.08	0.00	0.00	-0.11
9	6	-0.31	0.01	0.00	0.00	0.00	-0.01	0.00	0.00	0.00
10	6	-0.23	0.06	0.00	-0.09	-0.05	-0.02	-0.03	-0.02	0.00
11	6	-0.23	0.06	0.00	0.10	0.05	-0.02	0.03	0.02	0.00
12	1	-0.41	-0.06	0.00	0.00	0.00	0.00	-0.01	0.00	0.00
13	6	-0.07	0.17	0.00	-0.06	-0.03	-0.03	-0.02	-0.01	0.00
14	1	-0.26	0.05	0.00	-0.18	-0.09	-0.01	-0.07	-0.04	0.00
15	6	-0.07	0.16	0.00	0.06	0.03	-0.03	0.02	0.02	0.00
16	1	-0.26	0.05	0.00	0.18	0.09	-0.01	0.06	0.04	0.00
17	1	0.06	0.22	-0.01	-0.09	-0.05	-0.03	-0.04	-0.02	0.00
18	1	0.05	0.22	0.01	0.10	0.05	-0.03	0.05	0.03	0.00

	10	11	12
	A	A	A
Frequencies --	148.3380	158.7475	167.1430
Red. masses --	5.1233	21.6026	13.9815
Frc consts --	0.0664	0.3208	0.2301
IR Inten --	2.1649	0.2616	5.2538

Atom	AN	X	Y	Z	X	Y	Z	X	Y	Z
1	13	0.11	0.08	-0.01	0.06	0.36	-0.12	-0.12	0.02	0.02
2	13	0.04	-0.04	0.00	-0.34	-0.30	0.10	0.16	0.23	-0.03
3	13	0.04	-0.04	-0.01	0.35	0.30	0.10	0.15	0.22	0.02
4	13	0.11	0.08	0.01	-0.06	-0.36	-0.12	-0.12	0.03	-0.02
5	3	0.06	0.04	0.00	0.00	0.00	0.00	0.03	-0.34	0.00
6	3	0.04	-0.10	-0.01	0.00	0.00	0.22	-0.01	0.29	0.00
7	3	0.03	0.09	0.01	0.01	0.00	-0.44	0.28	-0.20	0.00
8	20	-0.09	0.03	0.00	0.00	0.00	0.01	0.13	-0.33	0.00
9	6	0.13	0.09	0.00	0.00	0.00	0.02	-0.05	0.08	0.00
10	6	-0.01	-0.01	0.00	0.03	0.02	0.03	-0.12	0.04	0.00
11	6	-0.01	-0.01	0.00	-0.04	-0.02	0.03	-0.12	0.04	0.00

12	1	0.31	0.21	0.00	0.00	0.00	0.02	0.05	0.15	0.00
13	6	-0.27	-0.17	0.00	0.02	0.01	0.03	-0.21	-0.03	0.00
14	1	0.03	0.03	0.00	0.06	0.03	0.02	-0.09	0.06	0.00
15	6	-0.27	-0.17	0.00	-0.03	-0.02	0.03	-0.21	-0.03	0.00
16	1	0.03	0.03	0.00	-0.07	-0.03	0.02	-0.09	0.06	0.00
17	1	-0.46	-0.26	0.02	0.02	0.01	0.03	-0.30	-0.07	0.01
18	1	-0.46	-0.26	-0.02	-0.04	-0.02	0.03	-0.30	-0.07	-0.01

	13	14	15
	A	A	A
Frequencies --	199.1077	209.7715	222.6383
Red. masses --	13.4213	12.9038	8.4660
Frc consts --	0.3135	0.3345	0.2472
IR Inten --	6.6514	32.4404	2.8990

Atom	AN	X	Y	Z	X	Y	Z	X	Y	Z
1	13	0.07	0.10	-0.04	0.02	-0.20	0.00	-0.02	-0.11	-0.05
2	13	0.29	-0.24	-0.09	-0.19	0.13	0.03	0.10	0.07	0.02
3	13	-0.29	0.24	-0.09	-0.19	0.14	-0.03	0.11	0.08	-0.02
4	13	-0.07	-0.10	-0.04	0.02	-0.19	0.00	-0.02	-0.11	0.05
5	3	0.00	0.00	0.06	0.02	-0.35	0.00	0.01	0.02	0.00
6	3	0.00	0.00	0.66	0.14	-0.14	0.01	0.06	-0.13	0.00
7	3	0.00	0.00	0.37	-0.26	-0.11	0.00	-0.50	0.81	0.00
8	20	0.00	0.00	0.04	0.28	0.19	0.00	-0.03	-0.07	0.00
9	6	0.00	0.00	-0.03	0.14	0.11	0.00	-0.02	-0.01	0.00
10	6	-0.08	-0.05	-0.03	0.03	0.03	0.00	-0.01	-0.01	0.00
11	6	0.08	0.05	-0.03	0.03	0.03	0.00	-0.01	-0.01	0.00
12	1	0.00	0.00	-0.03	0.32	0.23	0.00	-0.04	-0.02	0.00
13	6	-0.05	-0.03	-0.04	-0.17	-0.09	0.00	0.01	0.01	0.00
14	1	-0.14	-0.08	-0.03	0.08	0.07	0.00	-0.02	-0.01	0.00
15	6	0.06	0.03	-0.04	-0.16	-0.09	0.00	0.01	0.01	0.00
16	1	0.14	0.08	-0.03	0.08	0.07	0.00	-0.02	-0.01	0.00
17	1	-0.06	-0.04	-0.03	-0.26	-0.15	0.02	0.01	0.01	0.00
18	1	0.07	0.04	-0.03	-0.26	-0.15	-0.02	0.01	0.01	0.00

	16	17	18
	A	A	A
Frequencies --	241.3152	246.6954	269.1518
Red. masses --	17.2940	14.1194	6.2042
Frc consts --	0.5934	0.5063	0.2648
IR Inten --	8.4581	2.3850	0.0897

Atom	AN	X	Y	Z	X	Y	Z	X	Y	Z
1	13	0.25	-0.07	-0.10	0.35	-0.19	-0.02	-0.01	-0.01	0.00
2	13	-0.18	0.26	0.04	-0.11	0.10	-0.01	-0.05	0.02	0.00
3	13	-0.18	0.26	-0.04	0.11	-0.09	-0.01	0.05	-0.02	0.00
4	13	0.26	-0.08	0.10	-0.34	0.19	-0.02	0.01	0.01	0.00
5	3	-0.02	0.26	0.00	0.00	0.00	-0.02	0.00	0.00	0.76

6	3	0.47	-0.20	-0.01	0.00	0.00	0.76	0.00	0.00	-0.03
7	3	0.01	-0.34	0.00	0.00	0.00	-0.26	0.00	0.00	-0.05
8	20	-0.24	-0.21	0.00	0.00	0.00	-0.05	0.00	0.00	0.01
9	6	-0.04	-0.04	0.00	0.00	0.00	0.01	0.00	0.00	-0.08
10	6	0.02	0.00	0.00	0.01	0.01	0.01	-0.15	-0.10	-0.07
11	6	0.02	0.00	0.00	-0.01	-0.01	0.01	0.14	0.10	-0.07
12	1	-0.12	-0.10	0.00	0.00	0.00	0.01	0.00	0.00	-0.08
13	6	0.10	0.05	0.00	0.01	0.00	0.01	-0.13	-0.08	-0.09
14	1	0.00	-0.02	0.00	0.01	0.01	0.00	-0.26	-0.16	-0.07
15	6	0.10	0.05	0.00	-0.01	0.00	0.01	0.13	0.08	-0.09
16	1	0.00	-0.02	0.00	-0.01	-0.01	0.00	0.26	0.16	-0.07
17	1	0.13	0.07	-0.02	0.01	0.00	0.00	-0.14	-0.10	-0.06
18	1	0.13	0.07	0.02	0.00	0.00	0.01	0.14	0.10	-0.06

	19	20	21
	A	A	A
Frequencies --	280.3991	301.2935	334.2247
Red. masses --	8.0509	19.4238	9.4402
Frc consts --	0.3729	1.0389	0.6213
IR Inten --	28.4662	43.2599	17.1424

Atom	AN	X	Y	Z	X	Y	Z	X	Y	Z
1	13	0.00	-0.03	0.08	0.14	-0.04	0.51	0.00	-0.08	0.06
2	13	-0.02	0.00	-0.01	0.02	0.07	-0.10	-0.11	0.01	-0.20
3	13	-0.02	0.00	0.01	0.02	0.07	0.10	-0.11	0.01	0.20
4	13	0.00	-0.03	-0.08	0.14	-0.04	-0.51	0.00	-0.08	-0.06
5	3	-0.10	0.91	0.00	0.01	-0.26	0.00	-0.03	0.00	0.00
6	3	-0.06	0.01	0.00	-0.33	0.12	0.00	0.11	-0.04	0.00
7	3	-0.07	-0.02	0.00	-0.42	-0.08	0.00	0.76	0.54	0.00
8	20	0.17	-0.07	0.00	-0.14	-0.01	0.00	-0.01	0.00	0.00
9	6	-0.04	-0.01	0.00	0.01	0.00	0.00	0.01	0.00	0.00
10	6	-0.03	-0.01	0.00	0.02	0.01	0.00	0.01	0.00	0.00
11	6	-0.03	-0.01	0.00	0.02	0.01	0.00	0.01	0.00	0.00
12	1	-0.13	-0.07	0.00	0.04	0.02	0.00	0.02	0.01	0.00
13	6	-0.08	-0.04	0.01	0.04	0.02	0.00	0.00	0.00	0.00
14	1	-0.09	-0.05	0.00	0.04	0.02	0.00	0.02	0.01	0.00
15	6	-0.08	-0.04	-0.01	0.04	0.02	0.00	0.00	0.00	0.00
16	1	-0.09	-0.05	0.00	0.04	0.02	0.00	0.02	0.01	0.00
17	1	-0.12	-0.07	0.01	0.03	0.02	-0.01	0.00	0.00	0.00
18	1	-0.12	-0.07	-0.01	0.03	0.02	0.01	0.00	0.00	0.00

	22	23	24
	A	A	A
Frequencies --	354.5077	373.2373	489.2624
Red. masses --	18.0891	8.5103	5.9014
Frc consts --	1.3394	0.6985	0.8323
IR Inten --	1.0569	59.0485	67.3983

Atom	AN	X	Y	Z	X	Y	Z	X	Y	Z
1	13	-0.03	-0.02	0.18	-0.13	0.08	0.11	0.00	-0.01	0.00
2	13	-0.05	-0.01	0.49	0.03	-0.03	-0.04	-0.02	0.00	-0.01
3	13	-0.05	-0.01	-0.49	0.03	-0.03	0.04	-0.02	0.00	0.01
4	13	-0.03	-0.02	-0.18	-0.13	0.08	-0.11	0.00	-0.01	0.00
5	3	0.03	-0.04	0.00	0.01	-0.01	0.00	0.85	0.05	0.00
6	3	0.12	-0.02	0.00	0.90	-0.28	0.00	-0.01	0.00	0.00
7	3	0.56	0.34	0.00	-0.14	-0.09	0.00	0.00	0.00	0.00
8	20	-0.01	-0.01	0.00	0.00	0.01	0.00	0.00	0.02	0.00
9	6	-0.01	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	-0.09	-0.03	0.00
10	6	-0.01	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	-0.12	-0.04	0.01
11	6	-0.01	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	-0.12	-0.04	-0.01
12	1	-0.01	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	-0.23	-0.13	0.00
13	6	0.00	0.01	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.03	-0.01
14	1	-0.01	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	-0.25	-0.11	0.01
15	6	0.00	0.01	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.03	0.01
16	1	-0.01	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	-0.25	-0.11	-0.01
17	1	0.01	0.01	0.00	0.01	0.00	0.00	-0.07	-0.01	0.01
18	1	0.01	0.01	0.00	0.01	0.00	0.00	-0.07	-0.01	-0.01

	25	26	27
	A	A	A
Frequencies --	611.5305	633.9803	710.6041
Red. masses --	5.4356	3.8948	1.2137
Frc consts --	1.1977	0.9223	0.3611
IR Inten --	0.0153	0.8182	0.7621

Atom	AN	X	Y	Z	X	Y	Z	X	Y	Z
1	13	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
2	13	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
3	13	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
4	13	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
5	3	0.00	0.00	0.05	-0.08	0.02	0.00	0.00	0.00	0.00
6	3	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
7	3	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
8	20	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
9	6	0.00	0.00	-0.03	0.28	0.20	0.00	0.00	0.00	0.00
10	6	-0.18	-0.09	0.01	-0.20	-0.15	0.01	0.07	0.06	0.01
11	6	0.18	0.09	0.01	-0.20	-0.15	-0.01	-0.07	-0.06	0.01
12	1	0.00	0.00	-0.03	0.46	0.31	0.00	0.00	0.00	-0.01
13	6	0.35	0.19	-0.01	0.08	0.05	-0.01	0.03	-0.01	-0.02
14	1	-0.45	-0.27	0.01	-0.35	-0.24	0.01	-0.29	-0.14	0.02
15	6	-0.35	-0.19	-0.01	0.08	0.05	0.01	-0.03	0.01	-0.02
16	1	0.45	0.27	0.01	-0.35	-0.24	-0.01	0.29	0.14	0.02
17	1	0.10	0.08	-0.01	0.18	0.07	0.01	-0.55	-0.30	0.06
18	1	-0.10	-0.08	-0.01	0.18	0.07	-0.01	0.54	0.30	0.06

		28			29			30		
		A			A			A		
Frequencies --		734.2675			768.8337			828.5260		
Red. masses --		1.2281			1.1600			1.3123		
Frc consts --		0.3901			0.4040			0.5308		
IR Inten --		177.9096			253.8837			1.9369		
Atom	AN	X	Y	Z	X	Y	Z	X	Y	Z
1	13	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
2	13	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
3	13	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
4	13	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
5	3	-0.03	0.00	0.00	-0.03	-0.03	0.00	0.00	0.00	0.00
6	3	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
7	3	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
8	20	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
9	6	-0.03	-0.03	0.00	0.07	0.04	0.00	0.00	0.00	0.01
10	6	-0.01	-0.01	-0.01	0.05	0.03	0.00	-0.06	-0.05	0.03
11	6	-0.01	-0.01	0.01	0.05	0.03	0.00	0.06	0.05	0.03
12	1	0.21	0.13	0.00	-0.55	-0.37	0.00	0.00	0.00	-0.06
13	6	0.08	0.05	0.00	0.00	0.00	0.00	0.06	-0.04	-0.05
14	1	0.00	0.02	0.00	-0.41	-0.28	0.01	0.44	0.39	0.05
15	6	0.08	0.05	0.00	0.00	0.00	0.00	-0.06	0.04	-0.05
16	1	-0.01	0.01	0.00	-0.41	-0.28	-0.01	-0.44	-0.39	0.05
17	1	-0.57	-0.32	0.14	-0.15	-0.07	0.02	-0.27	-0.25	0.06
18	1	-0.58	-0.33	-0.14	-0.15	-0.07	-0.02	0.27	0.25	0.06

		31			32			33		
		A			A			A		
Frequencies --		858.0487			866.7283			882.5204		
Red. masses --		4.1929			3.3896			1.2435		
Frc consts --		1.8188			1.5003			0.5706		
IR Inten --		3.4099			0.0089			0.0653		
Atom	AN	X	Y	Z	X	Y	Z	X	Y	Z
1	13	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
2	13	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
3	13	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
4	13	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
5	3	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	-0.01	0.00	0.00	0.00
6	3	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
7	3	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
8	20	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
9	6	-0.17	0.27	0.00	0.00	0.00	0.10	-0.10	-0.03	0.00
10	6	0.00	-0.02	0.27	0.12	-0.10	0.14	0.06	0.04	0.02
11	6	0.00	-0.03	-0.27	-0.12	0.10	0.14	0.06	0.04	-0.02
12	1	-0.31	0.18	0.00	0.00	0.00	-0.34	0.55	0.40	0.00

13	6	0.09	-0.11	0.02	0.07	-0.17	-0.17	-0.01	-0.02	0.01
14	1	0.29	-0.14	0.19	-0.31	-0.06	0.23	-0.40	-0.29	0.02
15	6	0.09	-0.11	-0.02	-0.07	0.17	-0.17	-0.01	-0.02	-0.01
16	1	0.29	-0.14	-0.19	0.31	0.06	0.23	-0.40	-0.29	-0.02
17	1	-0.19	0.07	-0.34	0.39	-0.03	-0.18	0.09	0.06	-0.04
18	1	-0.19	0.07	0.34	-0.39	0.03	-0.18	0.09	0.06	0.04

			34			35			36	
			A			A			A	
Frequencies --			1022.5963			1034.4805			1078.0406	
Red. masses --			1.4902			1.4218			1.2278	
Frc consts --			0.9181			0.8965			0.8407	
IR Inten --			37.9607			13.0665			0.4082	
Atom	AN	X	Y	Z	X	Y	Z	X	Y	Z
1	13	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
2	13	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
3	13	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
4	13	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
5	3	0.01	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
6	3	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
7	3	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
8	20	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
9	6	-0.06	0.09	0.00	0.00	0.00	0.06	0.00	0.00	0.09
10	6	0.02	-0.04	-0.04	-0.02	0.05	-0.08	0.03	-0.06	-0.01
11	6	0.02	-0.04	0.04	0.02	-0.05	-0.08	-0.03	0.06	-0.01
12	1	-0.08	0.09	0.00	0.00	0.00	0.56	0.00	0.00	0.65
13	6	-0.03	0.03	0.11	0.04	-0.08	0.00	0.01	0.00	-0.03
14	1	0.27	-0.39	-0.18	-0.17	0.16	-0.03	0.28	-0.38	-0.14
15	6	-0.03	0.03	-0.11	-0.04	0.08	0.00	-0.01	0.00	-0.03
16	1	0.28	-0.40	0.18	0.17	-0.15	-0.03	-0.28	0.38	-0.14
17	1	0.14	-0.14	0.41	0.29	-0.26	0.34	-0.11	0.04	-0.15
18	1	0.14	-0.14	-0.41	-0.29	0.26	0.35	0.11	-0.04	-0.15

			37			38			39	
			A			A			A	
Frequencies --			1080.8858			1141.9624			1287.0310	
Red. masses --			1.2477			5.6452			1.2801	
Frc consts --			0.8589			4.3375			1.2493	
IR Inten --			4.7121			13.9432			0.0369	
Atom	AN	X	Y	Z	X	Y	Z	X	Y	Z
1	13	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
2	13	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
3	13	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
4	13	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
5	3	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
6	3	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00

7	3	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
8	20	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
9	6	0.00	0.01	0.00	0.16	-0.25	0.00	0.00	0.00	0.07
10	6	-0.02	0.04	0.05	0.04	-0.08	0.27	-0.03	0.05	0.02
11	6	-0.02	0.04	-0.05	0.04	-0.08	-0.27	0.03	-0.05	0.02
12	1	-0.02	-0.01	0.00	0.21	-0.27	0.00	0.00	0.00	-0.44
13	6	0.03	-0.05	0.05	-0.13	0.20	0.17	-0.02	0.04	-0.06
14	1	-0.22	0.36	0.18	0.09	-0.06	0.31	0.22	-0.36	-0.13
15	6	0.03	-0.05	-0.05	-0.13	0.20	-0.17	0.02	-0.04	-0.06
16	1	-0.22	0.36	-0.18	0.09	-0.06	-0.31	-0.22	0.36	-0.13
17	1	0.22	-0.26	0.40	-0.16	0.31	0.08	0.16	-0.22	0.35
18	1	0.22	-0.26	-0.40	-0.16	0.31	-0.08	-0.16	0.22	0.35

	40	41	42
	A	A	A
Frequencies --	1373.7506	1388.6869	1467.2211
Red. masses --	4.4402	4.7208	2.5842
Frc consts --	4.9370	5.3639	3.2777
IR Inten --	0.2617	1.6054	0.6546

Atom	AN	X	Y	Z	X	Y	Z	X	Y	Z
1	13	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
2	13	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
3	13	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
4	13	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
5	3	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.01
6	3	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
7	3	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
8	20	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
9	6	0.00	0.00	0.30	0.08	-0.09	0.00	-0.01	0.01	0.22
10	6	0.12	-0.21	-0.15	-0.13	0.16	-0.07	-0.04	0.06	-0.12
11	6	-0.12	0.21	-0.15	-0.12	0.16	0.07	0.06	-0.08	-0.11
12	1	0.00	0.00	-0.36	0.06	-0.11	0.00	-0.01	0.01	-0.61
13	6	-0.06	0.17	-0.01	0.10	-0.13	0.30	0.07	-0.12	0.09
14	1	-0.23	0.39	0.07	0.07	-0.08	-0.18	0.04	-0.04	-0.19
15	6	0.06	-0.17	-0.01	0.10	-0.13	-0.30	-0.07	0.13	0.07
16	1	0.23	-0.39	0.07	0.07	-0.08	0.18	-0.09	0.12	-0.22
17	1	-0.10	-0.04	0.24	-0.23	0.29	-0.37	-0.12	0.18	-0.40
18	1	0.10	0.05	0.24	-0.23	0.29	0.37	0.10	-0.14	-0.37

	43	44	45
	A	A	A
Frequencies --	1467.5898	3126.6211	3145.5487
Red. masses --	2.5046	1.0867	1.0960
Frc consts --	3.1783	6.2592	6.3893
IR Inten --	6.1486	1.3222	12.3914

Atom	AN	X	Y	Z	X	Y	Z	X	Y	Z

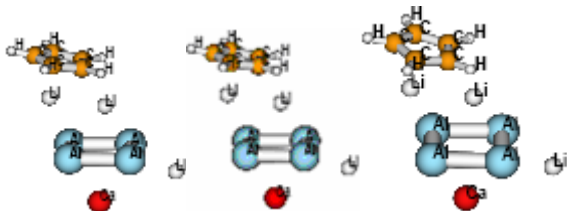
1	13	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
2	13	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
3	13	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
4	13	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
5	3	0.01	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
6	3	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
7	3	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
8	20	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
9	6	-0.08	0.12	-0.02	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
10	6	0.10	-0.16	-0.08	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	-0.01
11	6	0.09	-0.15	0.10	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.01
12	1	-0.09	0.15	0.05	0.00	0.00	0.00	-0.01	0.01	0.00
13	6	-0.02	0.04	0.12	-0.02	0.05	0.03	-0.02	0.05	0.04
14	1	-0.30	0.46	0.14	0.01	-0.01	0.06	0.01	-0.02	0.09
15	6	-0.01	0.02	-0.13	0.02	-0.04	0.03	-0.02	0.05	-0.04
16	1	-0.29	0.45	-0.11	-0.01	0.01	0.06	0.01	-0.02	-0.09
17	1	-0.15	0.22	-0.13	0.21	-0.52	-0.42	0.20	-0.51	-0.42
18	1	-0.16	0.24	0.19	-0.21	0.52	-0.42	0.20	-0.51	0.43

	46	47	48
	A	A	A
Frequencies --	3197.6364	3216.4582	3224.4736
Red. masses --	1.0894	1.0945	1.1019
Frc consts --	6.5627	6.6716	6.7500
IR Inten --	4.0669	5.8539	3.9764

Atom	AN	X	Y	Z	X	Y	Z	X	Y	Z
1	13	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
2	13	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
3	13	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
4	13	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
5	3	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
6	3	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
7	3	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
8	20	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
9	6	-0.04	0.06	0.00	0.00	0.00	0.00	-0.03	0.04	0.00
10	6	0.01	-0.01	0.03	-0.01	0.02	-0.06	-0.01	0.01	-0.05
11	6	0.01	-0.01	-0.03	0.01	-0.02	-0.06	-0.01	0.01	0.05
12	1	0.48	-0.72	0.00	0.00	0.00	-0.01	0.27	-0.41	0.00
13	6	0.00	0.00	0.00	0.00	-0.01	0.00	0.00	-0.01	0.00
14	1	-0.06	0.09	-0.33	0.13	-0.17	0.67	0.11	-0.15	0.58
15	6	0.00	0.00	0.00	0.00	0.01	0.00	0.00	-0.01	0.00
16	1	-0.06	0.09	0.32	-0.12	0.17	0.66	0.11	-0.15	-0.58
17	1	0.01	-0.04	-0.03	-0.02	0.05	0.03	-0.02	0.06	0.04
18	1	0.01	-0.04	0.03	0.02	-0.05	0.03	-0.02	0.06	-0.04

$CpCaAl_4Li_3 \rightarrow CpLi + Al_4Li_2Ca$ **-24.5444066**

$CpCaAl_4Li_3 \rightarrow Cp^- + Al_4Li_3Ca^+$ **-134.9243316**



Charge = 0 Multiplicity = 1

Al,0,0.5766844017,-1.2011976223,-1.2289710822
Al,0,1.676679765,1.3042287282,-1.2960696999
Al,0,1.6893093129,1.318059962,1.2859225969
Al,0,0.583306196,-1.1876439161,1.2488440552
Li,0,3.3639132544,2.8231252229,-0.0220434529
Li,0,-2.1696298347,-1.0086024623,0.0140624788
Li,0,-0.8355714102,1.1478596234,0.0270091052
Ca,0,3.356269331,-0.9347140427,0.0017061846
C,0,-3.8274974256,-0.141474201,-1.1474102541
C,0,-4.3059327459,-0.8014852236,0.009840417
C,0,-3.0741375759,0.9848794719,-0.7305696074
H,0,-4.0252349023,-0.4236009053,-2.1732191645
C,0,-3.8316395109,-0.1028710281,1.1452933714
H,0,-4.9336175009,-1.6838160035,0.0238117661
C,0,-3.076267904,1.0088241794,0.6920798315
H,0,-2.6715814105,1.7456130704,-1.3940665304
H,0,-4.0325880594,-0.3491858324,2.1796261043
H,0,-2.6833855854,1.7960712093,1.330800878

State=1-A\HF=-1863.6167489

		1			2			3		
		A			A			A		
Frequencies --		24.7187			37.2897			59.5914		
Red. masses --		3.9733			9.1177			9.3791		
Frc consts --		0.0014			0.0075			0.0196		
IR Inten --		0.0500			0.8987			3.9515		
Atom	AN	X	Y	Z	X	Y	Z	X	Y	Z
1	13	0.00	-0.05	-0.04	-0.10	0.00	0.15	-0.06	-0.17	0.00
2	13	0.02	-0.05	0.06	-0.15	-0.02	0.08	0.11	-0.11	0.01
3	13	-0.01	0.05	0.06	0.15	0.02	0.08	0.11	-0.11	-0.01
4	13	0.00	0.05	-0.04	0.11	0.00	0.15	-0.06	-0.17	0.00
5	3	0.01	0.00	0.14	0.00	0.00	-0.12	0.63	0.40	-0.01
6	3	0.00	0.00	0.02	0.00	0.00	0.08	0.01	-0.01	-0.01
7	3	0.00	0.00	-0.04	0.00	0.00	0.57	-0.03	-0.03	0.02
8	20	0.00	0.00	-0.02	0.00	0.00	-0.18	-0.07	0.11	0.00
9	6	-0.10	0.17	0.05	0.13	0.08	-0.13	-0.04	0.14	0.00

10	6	0.00	0.00	0.19	0.00	0.00	-0.13	0.01	0.18	-0.01
11	6	-0.06	0.11	-0.18	0.07	0.05	-0.13	-0.13	0.08	0.01
12	1	-0.18	0.32	0.11	0.24	0.16	-0.13	-0.02	0.15	0.00
13	6	0.09	-0.17	0.04	-0.12	-0.08	-0.13	-0.05	0.15	0.00
14	1	0.00	0.00	0.37	0.00	0.00	-0.13	0.07	0.23	-0.01
15	6	0.05	-0.10	-0.18	-0.07	-0.05	-0.13	-0.13	0.09	0.00
16	1	-0.09	0.22	-0.32	0.19	0.12	-0.14	-0.19	0.05	0.01
17	1	0.18	-0.32	0.10	-0.23	-0.16	-0.14	-0.03	0.17	0.00
18	1	0.07	-0.21	-0.33	-0.19	-0.12	-0.15	-0.19	0.06	0.01

	4	5	6
	A	A	A
Frequencies --	75.5744	86.7951	89.3667
Red. masses --	12.1661	4.8896	8.3793
Frc consts --	0.0409	0.0217	0.0394
IR Inten --	0.7347	0.9836	1.5904

Atom	AN	X	Y	Z	X	Y	Z	X	Y	Z
1	13	-0.08	0.03	0.23	0.02	0.06	0.06	0.08	0.09	0.00
2	13	0.13	-0.03	0.06	-0.02	0.05	0.04	-0.05	-0.01	-0.02
3	13	-0.12	0.03	0.06	0.03	-0.04	0.04	-0.06	0.01	0.00
4	13	0.07	-0.04	0.23	0.01	-0.03	0.06	0.09	0.11	-0.02
5	3	0.00	0.00	0.28	0.04	0.04	-0.07	0.41	0.44	0.02
6	3	0.00	0.01	0.04	-0.04	0.01	-0.41	-0.20	0.09	0.10
7	3	0.00	0.00	-0.80	0.00	0.04	0.13	-0.04	0.26	-0.04
8	20	-0.01	0.00	-0.26	0.03	-0.02	-0.02	0.13	-0.17	0.00
9	6	0.01	-0.02	-0.04	-0.26	-0.13	-0.02	-0.10	-0.05	0.01
10	6	0.00	0.00	-0.07	-0.04	-0.02	0.01	-0.23	-0.13	0.00
11	6	0.02	-0.01	0.00	-0.16	-0.07	-0.06	0.00	0.02	0.02
12	1	0.02	-0.05	-0.05	-0.46	-0.23	-0.01	-0.09	-0.05	0.00
13	6	-0.01	0.03	-0.04	0.19	0.10	-0.02	-0.21	-0.11	0.00
14	1	-0.01	0.00	-0.10	-0.05	-0.02	0.05	-0.32	-0.20	-0.01
15	6	0.00	0.02	0.00	0.11	0.07	-0.06	-0.07	-0.02	0.02
16	1	-0.04	-0.06	0.02	-0.24	-0.11	-0.07	0.10	0.07	0.02
17	1	-0.02	0.06	-0.05	0.38	0.20	0.00	-0.29	-0.16	0.00
18	1	0.06	0.08	0.03	0.21	0.11	-0.06	-0.01	0.01	0.01

	7	8	9
	A	A	A
Frequencies --	98.8897	126.0464	128.6528
Red. masses --	9.1388	17.9954	5.2556
Frc consts --	0.0527	0.1685	0.0513
IR Inten --	0.0694	0.4292	2.7211

Atom	AN	X	Y	Z	X	Y	Z	X	Y	Z
1	13	0.05	-0.07	0.00	0.28	0.38	-0.13	-0.02	-0.02	0.04
2	13	0.21	0.03	-0.01	0.05	0.11	0.20	0.02	0.07	-0.06
3	13	0.20	0.04	-0.01	-0.04	-0.02	0.20	-0.02	0.10	-0.04

4	13	0.05	-0.05	-0.01	-0.26	-0.34	-0.14	0.05	0.10	0.02
5	3	-0.27	-0.42	0.01	0.01	0.06	0.00	0.02	0.11	0.05
6	3	-0.22	0.00	0.04	0.06	-0.12	0.12	0.12	-0.22	-0.01
7	3	0.00	0.09	0.00	-0.04	-0.18	0.13	-0.07	-0.32	0.03
8	20	0.11	0.07	0.00	0.04	-0.02	-0.20	0.08	-0.05	0.02
9	6	-0.22	0.01	0.00	0.07	0.06	0.04	0.00	0.01	0.00
10	6	-0.27	-0.01	-0.01	0.06	0.06	0.04	0.14	0.11	0.00
11	6	-0.18	0.04	0.01	-0.07	-0.04	0.04	-0.23	-0.14	0.00
12	1	-0.22	0.01	0.00	0.17	0.12	0.04	0.05	0.04	0.00
13	6	-0.27	0.00	0.00	-0.09	-0.04	0.04	0.00	0.02	0.00
14	1	-0.31	-0.04	-0.01	0.16	0.13	0.04	0.32	0.24	0.00
15	6	-0.21	0.03	0.01	-0.17	-0.10	0.04	-0.22	-0.14	0.00
16	1	-0.14	0.06	0.01	-0.13	-0.06	0.04	-0.40	-0.24	0.00
17	1	-0.31	-0.02	0.00	-0.12	-0.07	0.04	0.06	0.07	0.00
18	1	-0.19	0.04	0.01	-0.30	-0.18	0.03	-0.40	-0.23	-0.01

	10	11	12
	A	A	A
Frequencies --	132.1310	159.6622	167.7154
Red. masses --	12.0054	25.5189	23.1148
Frc consts --	0.1235	0.3833	0.3831
IR Inten --	2.3408	0.0296	2.2667

Atom	AN	X	Y	Z	X	Y	Z	X	Y	Z
1	13	0.06	-0.01	0.07	0.43	0.00	0.20	0.36	0.08	-0.06
2	13	0.28	-0.02	-0.18	-0.29	-0.38	-0.21	-0.22	-0.24	0.11
3	13	-0.28	-0.02	-0.18	0.27	0.35	-0.22	-0.25	-0.27	-0.10
4	13	-0.07	-0.01	0.08	-0.39	0.00	0.21	0.40	0.09	0.05
5	3	0.00	-0.03	0.47	0.00	0.00	0.18	0.04	-0.15	0.00
6	3	-0.02	0.05	-0.05	0.00	0.00	-0.04	0.02	-0.04	0.00
7	3	0.01	0.08	0.68	0.00	-0.02	-0.16	-0.12	-0.20	0.00
8	20	-0.02	0.01	-0.09	0.00	0.02	0.01	-0.03	0.39	0.00
9	6	0.01	0.01	0.03	-0.03	-0.02	0.00	-0.07	-0.05	0.00
10	6	-0.02	-0.02	0.04	-0.01	0.00	0.00	-0.04	-0.02	0.00
11	6	0.05	0.04	0.01	-0.01	-0.01	0.01	-0.13	-0.09	0.00
12	1	-0.01	0.01	0.03	-0.05	-0.04	0.00	-0.06	-0.04	0.00
13	6	0.01	-0.01	0.03	0.01	0.01	0.00	-0.08	-0.05	0.00
14	1	-0.06	-0.05	0.05	-0.01	-0.01	0.00	0.01	0.01	0.00
15	6	0.05	0.02	0.01	0.01	0.01	0.01	-0.13	-0.09	0.00
16	1	0.13	0.09	0.00	-0.04	-0.02	0.01	-0.19	-0.12	0.00
17	1	0.00	-0.04	0.03	0.03	0.03	0.00	-0.07	-0.04	0.00
18	1	0.05	0.01	0.00	0.03	0.03	0.01	-0.20	-0.13	0.00

	13	14	15
	A	A	A
Frequencies --	198.7482	205.7144	219.8997
Red. masses --	17.7639	19.8515	5.6141

Frc consts --		0.4134			0.4950			0.1599			
IR Inten --		7.1557			11.0825			9.9436			
Atom	AN	X	Y	Z	X	Y	Z	X	Y	Z	
1	13	0.29	-0.32	0.08	0.01	0.36	-0.05	-0.02	-0.03	0.00	
2	13	0.10	0.19	0.09	0.23	-0.17	0.04	-0.01	-0.02	-0.01	
3	13	-0.08	-0.20	0.08	0.24	-0.15	-0.05	-0.01	-0.01	0.01	
4	13	-0.28	0.35	0.09	0.03	0.33	0.05	-0.02	-0.03	0.00	
5	3	0.01	-0.01	-0.67	0.27	-0.36	0.03	-0.05	-0.04	0.00	
6	3	0.00	0.00	-0.01	0.01	-0.10	0.01	-0.01	0.20	0.00	
7	3	0.00	0.01	-0.05	0.15	0.12	-0.01	-0.06	0.67	-0.01	
8	20	-0.01	0.00	-0.13	-0.37	-0.17	0.01	0.03	0.03	0.00	
9	6	0.04	0.02	0.02	0.00	0.00	0.00	0.08	-0.03	0.00	
10	6	0.01	0.00	0.02	0.06	0.05	0.00	0.18	0.04	0.00	
11	6	0.02	0.01	0.02	-0.11	-0.07	0.00	-0.11	-0.16	0.00	
12	1	0.07	0.04	0.02	0.03	0.02	0.00	0.11	-0.01	0.00	
13	6	-0.03	-0.02	0.02	-0.01	0.00	0.00	0.07	-0.04	0.00	
14	1	0.01	0.01	0.01	0.15	0.12	0.00	0.31	0.14	0.00	
15	6	-0.03	-0.02	0.02	-0.11	-0.07	0.00	-0.12	-0.17	0.00	
16	1	0.02	0.01	0.02	-0.19	-0.12	0.01	-0.23	-0.24	0.02	
17	1	-0.06	-0.04	0.01	0.02	0.02	0.00	0.10	-0.01	0.00	
18	1	-0.05	-0.03	0.02	-0.19	-0.12	-0.01	-0.23	-0.24	-0.03	

	16	17	18
	A	A	A
Frequencies --	250.2927	264.6455	282.2054
Red. masses --	24.0527	12.3299	20.1240
Frc consts --	0.8878	0.5088	0.9443
IR Inten --	9.4901	1.9536	3.0893

Atom	AN	X	Y	Z	X	Y	Z	X	Y	Z
1	13	0.36	-0.21	0.03	0.05	-0.07	-0.02	0.04	-0.09	-0.08
2	13	0.03	0.24	-0.17	-0.20	0.29	-0.05	0.01	0.17	0.52
3	13	0.03	0.24	0.18	0.20	-0.29	-0.04	0.01	0.17	-0.52
4	13	0.36	-0.21	-0.04	-0.05	0.06	-0.02	0.04	-0.09	0.08
5	3	-0.27	0.39	-0.01	0.00	0.00	0.85	0.18	-0.12	0.01
6	3	0.02	0.11	0.00	0.00	0.00	0.00	-0.01	0.38	-0.02
7	3	-0.01	0.13	0.00	0.01	0.01	-0.09	-0.37	-0.08	0.00
8	20	-0.43	-0.11	0.00	0.00	0.00	-0.04	-0.07	-0.10	0.00
9	6	-0.02	-0.02	0.00	0.01	0.01	0.00	0.03	-0.02	0.00
10	6	-0.02	-0.01	0.00	0.00	0.00	0.00	0.02	-0.03	0.00
11	6	-0.03	-0.03	0.00	0.00	0.00	0.00	0.02	-0.02	0.00
12	1	-0.03	-0.02	0.00	0.02	0.01	0.00	0.02	-0.04	0.00
13	6	-0.02	-0.02	0.00	-0.01	-0.01	0.00	0.03	-0.03	0.00
14	1	-0.02	-0.02	0.00	0.00	0.00	0.00	-0.02	-0.06	0.00
15	6	-0.04	-0.03	0.00	-0.01	0.00	0.00	0.01	-0.03	0.00
16	1	-0.05	-0.04	0.01	0.01	0.01	0.00	0.03	-0.02	-0.01

17	1	-0.04	-0.03	0.00	-0.02	-0.01	0.00	0.01	-0.04	0.00
18	1	-0.05	-0.04	-0.01	-0.01	-0.01	0.00	0.02	-0.02	0.01

	19	20	21
	A	A	A
Frequencies --	307.4085	311.5560	347.6644
Red. masses --	7.5354	5.9748	25.6233
Frc consts --	0.4196	0.3417	1.8248
IR Inten --	16.8865	0.7618	0.5315

Atom	AN	X	Y	Z	X	Y	Z	X	Y	Z
1	13	-0.02	0.04	0.02	0.02	0.00	0.00	0.02	0.03	0.67
2	13	0.05	-0.04	-0.10	0.01	0.00	-0.01	0.01	-0.04	0.11
3	13	0.06	-0.04	0.10	0.00	-0.01	0.01	0.01	-0.04	-0.11
4	13	-0.01	0.04	-0.02	-0.02	0.01	-0.01	0.02	0.03	-0.67
5	3	0.01	-0.01	0.00	0.00	0.00	0.00	0.02	-0.06	0.00
6	3	-0.03	0.74	-0.16	-0.01	0.13	0.74	0.00	-0.13	0.01
7	3	-0.46	-0.35	-0.01	-0.07	-0.06	0.06	-0.17	0.05	0.00
8	20	0.01	0.01	0.00	0.00	0.00	-0.01	-0.04	0.02	0.00
9	6	0.06	-0.01	0.02	-0.13	-0.11	-0.07	0.01	0.00	0.00
10	6	0.02	-0.04	0.02	0.01	-0.01	-0.08	0.01	0.00	0.00
11	6	0.02	-0.03	0.02	-0.12	-0.09	-0.08	0.03	0.01	0.00
12	1	0.05	-0.03	0.01	-0.25	-0.19	-0.07	0.03	0.01	0.00
13	6	0.01	-0.05	0.02	0.15	0.10	-0.07	0.02	0.00	0.00
14	1	-0.04	-0.08	0.02	0.00	-0.01	-0.09	0.01	0.00	0.00
15	6	-0.03	-0.07	0.01	0.12	0.07	-0.08	0.03	0.02	0.00
16	1	0.00	-0.04	0.00	-0.16	-0.12	-0.07	0.06	0.03	-0.01
17	1	-0.05	-0.10	0.02	0.26	0.17	-0.07	0.03	0.01	0.00
18	1	-0.07	-0.09	0.02	0.14	0.09	-0.06	0.06	0.03	0.01

	22	23	24
	A	A	A
Frequencies --	389.3902	399.6375	506.5507
Red. masses --	8.2220	6.9667	5.6378
Frc consts --	0.7345	0.6556	0.8523
IR Inten --	43.1364	118.8999	55.1988

Atom	AN	X	Y	Z	X	Y	Z	X	Y	Z
1	13	0.01	-0.03	0.00	-0.01	-0.02	0.04	-0.02	0.00	0.00
2	13	-0.08	0.12	-0.10	-0.06	0.03	0.01	0.00	0.00	0.00
3	13	-0.08	0.12	0.10	-0.06	0.03	-0.01	0.00	0.00	0.00
4	13	0.01	-0.03	0.00	-0.01	-0.02	-0.04	-0.02	0.00	0.00
5	3	0.65	-0.66	-0.01	0.15	-0.14	0.00	0.00	0.00	0.00
6	3	0.03	-0.12	0.00	-0.07	0.45	0.00	0.83	0.10	0.01
7	3	-0.23	0.06	0.00	0.79	-0.17	0.00	0.02	0.10	0.00
8	20	-0.01	0.00	0.00	0.00	-0.01	0.00	0.00	0.00	0.00
9	6	0.00	0.00	0.00	-0.01	0.00	0.00	-0.11	-0.04	0.01
10	6	0.00	-0.01	0.00	0.01	0.02	0.00	-0.09	-0.04	0.00

11	6	0.02	0.01	0.00	-0.07	-0.05	0.01	-0.01	0.02	0.00
12	1	0.01	0.01	0.00	-0.05	-0.03	0.00	-0.24	-0.12	0.01
13	6	0.01	0.00	0.00	-0.02	-0.01	0.00	-0.11	-0.04	-0.01
14	1	0.00	-0.01	0.00	-0.03	0.00	0.00	-0.25	-0.15	0.00
15	6	0.02	0.02	0.00	-0.08	-0.05	-0.01	-0.01	0.02	0.00
16	1	0.05	0.03	0.00	-0.14	-0.09	0.02	-0.11	-0.04	0.01
17	1	0.02	0.01	0.00	-0.07	-0.04	0.00	-0.25	-0.12	-0.01
18	1	0.05	0.03	0.00	-0.14	-0.09	-0.02	-0.11	-0.04	-0.01

	25	26	27
	A	A	A
Frequencies --	619.6843	635.1927	732.2028
Red. masses --	5.1945	3.9772	1.2366
Frc consts --	1.1753	0.9454	0.3906
IR Inten --	0.0973	0.1242	2.0489

Atom	AN	X	Y	Z	X	Y	Z	X	Y	Z
1	13	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
2	13	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
3	13	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
4	13	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
5	3	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
6	3	0.00	0.00	0.05	0.05	-0.02	0.00	0.00	0.00	0.01
7	3	0.01	0.00	0.00	0.01	0.01	0.00	0.00	0.00	0.02
8	20	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
9	6	-0.18	-0.11	0.01	0.20	0.16	-0.01	0.07	0.06	0.00
10	6	0.00	0.00	-0.02	-0.27	-0.21	0.00	0.00	0.00	0.00
11	6	0.33	0.19	0.00	-0.08	-0.05	0.01	0.04	0.01	-0.01
12	1	-0.39	-0.26	0.01	0.34	0.26	-0.01	-0.37	-0.23	0.01
13	6	0.18	0.11	0.01	0.20	0.16	0.01	-0.07	-0.06	0.00
14	1	0.00	0.00	-0.03	-0.43	-0.32	-0.01	-0.01	-0.01	-0.01
15	6	-0.33	-0.19	-0.01	-0.08	-0.05	-0.01	-0.05	-0.02	-0.01
16	1	0.26	0.17	-0.02	-0.18	-0.10	0.00	-0.43	-0.26	0.02
17	1	0.39	0.26	0.02	0.34	0.25	0.02	0.37	0.23	0.02
18	1	-0.25	-0.16	-0.03	-0.18	-0.09	0.00	0.51	0.30	0.05

	28	29	30
	A	A	A
Frequencies --	747.0462	770.8493	840.0693
Red. masses --	1.2618	1.1560	1.2798
Frc consts --	0.4149	0.4047	0.5321
IR Inten --	112.6056	290.1469	0.3333

Atom	AN	X	Y	Z	X	Y	Z	X	Y	Z
1	13	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
2	13	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
3	13	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
4	13	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00

5	3	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
6	3	-0.03	0.00	0.00	-0.04	-0.03	0.00	0.00	0.00	0.00
7	3	0.00	0.00	0.00	-0.01	0.00	0.00	0.00	0.00	0.01
8	20	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
9	6	-0.01	-0.01	-0.01	0.05	0.03	0.00	-0.05	-0.04	0.03
10	6	-0.04	-0.04	0.00	0.06	0.04	0.00	0.00	0.00	0.01
11	6	0.08	0.06	0.00	0.01	0.01	0.00	0.07	-0.02	-0.04
12	1	0.01	0.01	0.00	-0.41	-0.29	0.00	0.36	0.35	0.06
13	6	-0.02	-0.02	0.00	0.05	0.03	0.00	0.05	0.04	0.03
14	1	0.29	0.19	0.00	-0.50	-0.36	-0.01	0.01	0.01	-0.07
15	6	0.08	0.05	0.00	0.01	0.01	0.00	-0.07	0.03	-0.04
16	1	-0.57	-0.36	0.09	-0.22	-0.12	0.02	-0.36	-0.32	0.04
17	1	0.08	0.06	0.01	-0.40	-0.28	-0.02	-0.37	-0.36	0.05
18	1	-0.52	-0.33	-0.10	-0.21	-0.12	-0.03	0.34	0.31	0.06

	31	32	33
	A	A	A
Frequencies --	861.6710	864.9628	879.1316
Red. masses --	4.0839	3.4722	1.2461
Frc consts --	1.7865	1.5305	0.5674
IR Inten --	4.0829	0.1596	0.2625

Atom	AN	X	Y	Z	X	Y	Z	X	Y	Z
1	13	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
2	13	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
3	13	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
4	13	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
5	3	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
6	3	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.01	0.00	0.00	0.00
7	3	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.02	0.00	0.00	0.00
8	20	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
9	6	0.00	-0.03	0.26	-0.12	0.09	-0.13	-0.05	-0.04	-0.03
10	6	-0.17	0.27	0.00	0.00	0.00	-0.10	0.10	0.03	0.00
11	6	0.09	-0.11	0.02	-0.07	0.17	0.18	0.00	0.02	-0.01
12	1	0.30	-0.13	0.18	0.30	0.04	-0.23	0.39	0.30	-0.02
13	6	0.00	-0.02	-0.26	0.12	-0.09	-0.14	-0.05	-0.04	0.03
14	1	-0.35	0.14	0.00	0.01	0.00	0.32	-0.54	-0.42	-0.01
15	6	0.09	-0.11	-0.02	0.07	-0.18	0.17	0.00	0.02	0.01
16	1	-0.18	0.06	-0.33	-0.41	0.03	0.14	-0.11	-0.08	0.04
17	1	0.31	-0.12	-0.18	-0.30	-0.04	-0.24	0.38	0.30	0.03
18	1	-0.19	0.04	0.33	0.41	-0.04	0.14	-0.09	-0.07	-0.04

	34	35	36
	A	A	A
Frequencies --	1025.2147	1029.6403	1075.9183
Red. masses --	1.4745	1.4406	1.2388
Frc consts --	0.9131	0.8998	0.8449

IR Inten --		33.7824			14.5438			0.8376		
Atom	AN	X	Y	Z	X	Y	Z	X	Y	Z
1	13	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
2	13	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
3	13	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
4	13	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
5	3	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
6	3	0.01	0.00	0.00	0.00	0.00	0.01	0.00	0.00	0.00
7	3	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
8	20	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
9	6	0.02	-0.04	-0.04	-0.03	0.05	-0.09	0.03	-0.06	-0.01
10	6	-0.06	0.09	0.00	0.00	0.00	0.06	0.00	0.00	0.09
11	6	-0.03	0.03	0.10	0.04	-0.07	0.00	0.02	-0.01	-0.03
12	1	0.29	-0.41	-0.20	-0.16	0.16	-0.04	0.26	-0.33	-0.13
13	6	0.02	-0.04	0.04	0.03	-0.05	-0.09	-0.04	0.07	-0.02
14	1	-0.08	0.09	0.00	0.00	-0.01	0.57	0.00	-0.01	0.65
15	6	-0.03	0.03	-0.10	-0.04	0.07	0.01	-0.01	-0.01	-0.04
16	1	0.12	-0.13	0.38	0.26	-0.27	0.35	-0.07	0.00	-0.10
17	1	0.29	-0.41	0.18	0.17	-0.17	-0.04	-0.31	0.41	-0.15
18	1	0.13	-0.13	-0.40	-0.27	0.26	0.36	0.13	-0.06	-0.19

	37	38	39
	A	A	A
Frequencies --	1076.8922	1141.8519	1288.8629
Red. masses --	1.2470	5.8140	1.2786
Frc consts --	0.8520	4.4662	1.2514
IR Inten --	4.2020	10.0708	0.0414

Atom	AN	X	Y	Z	X	Y	Z	X	Y	Z
1	13	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
2	13	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
3	13	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
4	13	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
5	3	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
6	3	0.00	0.00	0.00	-0.01	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
7	3	-0.01	0.00	0.00	0.01	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
8	20	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
9	6	-0.03	0.04	0.05	0.05	-0.08	0.28	-0.04	0.05	0.02
10	6	-0.01	0.02	-0.01	0.17	-0.25	0.00	0.00	0.00	0.07
11	6	0.03	-0.05	0.06	-0.14	0.19	0.18	-0.02	0.04	-0.06
12	1	-0.25	0.38	0.18	0.07	-0.05	0.32	0.23	-0.35	-0.14
13	6	-0.02	0.03	-0.04	0.05	-0.07	-0.28	0.03	-0.05	0.02
14	1	-0.03	0.00	-0.07	0.22	-0.26	0.00	0.00	0.01	-0.44
15	6	0.03	-0.05	-0.05	-0.14	0.20	-0.18	0.02	-0.04	-0.06
16	1	0.23	-0.28	0.44	-0.13	0.27	0.15	0.16	-0.22	0.35
17	1	-0.18	0.29	-0.14	0.07	-0.02	-0.33	-0.23	0.36	-0.13

18	1	0.21	-0.26	-0.41	-0.13	0.27	-0.14	-0.16	0.21	0.35

	40	41	42
	A	A	A
Frequencies --	1375.2063	1386.7539	1468.1004
Red. masses --	4.5118	4.7166	2.5038
Frc consts --	5.0273	5.3441	3.1795
IR Inten --	0.0204	5.6315	2.6814

Atom	AN	X	Y	Z	X	Y	Z	X	Y	Z
1	13	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
2	13	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
3	13	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
4	13	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
5	3	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
6	3	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.01	0.00	0.00
7	3	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
8	20	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
9	6	0.12	-0.19	-0.16	-0.13	0.17	-0.06	0.09	-0.13	-0.11
10	6	0.00	-0.01	0.31	0.09	-0.10	0.00	-0.08	0.11	0.02
11	6	-0.08	0.17	0.00	0.10	-0.13	0.29	0.00	0.01	0.14
12	1	-0.23	0.36	0.06	0.10	-0.11	-0.19	-0.29	0.43	0.11
13	6	-0.12	0.20	-0.15	-0.14	0.16	0.07	0.10	-0.15	0.08
14	1	0.00	0.01	-0.41	0.07	-0.12	0.00	-0.09	0.15	-0.06
15	6	0.07	-0.17	-0.01	0.10	-0.12	-0.29	-0.02	0.04	-0.13
16	1	-0.07	-0.05	0.26	-0.22	0.28	-0.36	-0.18	0.26	-0.22
17	1	0.23	-0.36	0.04	0.11	-0.12	0.19	-0.31	0.45	-0.14
18	1	0.08	0.04	0.25	-0.23	0.27	0.37	-0.16	0.21	0.13

	43	44	45
	A	A	A
Frequencies --	1469.4633	3146.6013	3164.0206
Red. masses --	2.5496	1.0878	1.0956
Frc consts --	3.2437	6.3455	6.4620
IR Inten --	0.3097	0.5291	6.0563

Atom	AN	X	Y	Z	X	Y	Z	X	Y	Z
1	13	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
2	13	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
3	13	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
4	13	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
5	3	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
6	3	0.00	0.00	0.01	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
7	3	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
8	20	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
9	6	-0.06	0.09	-0.10	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.01
10	6	0.01	-0.02	0.21	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
11	6	0.08	-0.13	0.06	-0.02	0.04	0.03	0.03	-0.05	-0.04

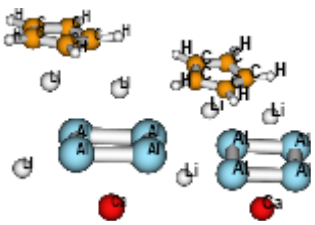
12	1	0.10	-0.12	-0.22	0.01	-0.02	0.06	-0.03	0.04	-0.14
13	6	0.04	-0.05	-0.12	0.00	0.00	-0.01	0.00	0.00	-0.01
14	1	0.01	-0.01	-0.58	0.00	0.00	0.00	0.02	-0.03	0.00
15	6	-0.08	0.12	0.09	0.03	-0.05	0.04	0.02	-0.04	0.03
16	1	-0.10	0.14	-0.39	0.21	-0.41	-0.35	-0.29	0.55	0.49
17	1	-0.04	0.03	-0.19	-0.02	0.02	0.09	-0.02	0.02	0.11
18	1	0.13	-0.18	-0.42	-0.28	0.58	-0.47	-0.20	0.41	-0.34

	46	47	48
	A	A	A
Frequencies --	3195.8189	3213.2866	3222.1867
Red. masses --	1.0894	1.0945	1.1022
Frc consts --	6.5556	6.6585	6.7424
IR Inten --	6.0422	8.7024	8.4516

Atom	AN	X	Y	Z	X	Y	Z	X	Y	Z
1	13	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
2	13	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
3	13	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
4	13	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
5	3	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
6	3	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
7	3	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
8	20	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
9	6	0.01	-0.01	0.03	-0.01	0.02	-0.06	-0.01	0.01	-0.05
10	6	-0.04	0.06	0.00	0.00	0.00	0.00	-0.03	0.04	0.00
11	6	0.00	0.01	0.01	0.00	-0.01	0.00	0.00	-0.01	-0.01
12	1	-0.07	0.10	-0.34	0.13	-0.18	0.67	0.11	-0.15	0.56
13	6	0.01	-0.01	-0.03	0.01	-0.01	-0.06	-0.01	0.01	0.05
14	1	0.50	-0.69	-0.01	0.00	-0.01	-0.01	0.30	-0.42	-0.01
15	6	0.00	0.01	-0.01	0.00	0.01	0.00	0.00	-0.01	0.01
16	1	0.03	-0.06	-0.05	-0.03	0.06	0.05	-0.04	0.07	0.06
17	1	-0.07	0.08	0.34	-0.13	0.16	0.66	0.11	-0.14	-0.58
18	1	0.03	-0.06	0.05	0.03	-0.06	0.04	-0.04	0.07	-0.05

$CpCaAl_4Li_3 \rightarrow CpLi + Al_4Li_2Ca$ **-21.3266634**

$CpCaAl_4Li_3 \rightarrow Cp^- + Al_4Li_3Ca^+$ **-131.020093**



Charge = 0 Multiplicity = 1

Al,0,1.7815015522,-1.5602071433,-1.246973006

Al,0,0.6540549848,0.9364620645,-1.281138744

Al,0,0.6585702663,0.9334745685,1.2877904949
Al,0,1.7854548437,-1.5626730668,1.2445333836
Li,0,0.6924805137,3.2038667421,0.0066042612
Li,0,-0.7403028179,-1.4485720628,0.0023053094
Li,0,-2.0408942854,0.8815154861,0.0096249345
Ca,0,3.4471013213,0.6856703262,-0.0022631231
C,0,-4.0671487427,0.6817426358,0.730832471
C,0,-4.0758948464,0.7130207441,-0.6912568822
C,0,-3.4091648907,-0.4955251646,1.141757429
H,0,-4.5026575754,1.4246893639,1.3870598282
C,0,-3.4225586813,-0.4442026111,-1.1616356099
H,0,-4.5197239233,1.4840143717,-1.3084654329
C,0,-2.9984729243,-1.1970052963,-0.0286431976
H,0,-3.2708522001,-0.8245993952,2.1634773638
H,0,-3.2938238226,-0.7270144021,-2.1982456982
H,0,-2.6839400344,-2.2408423025,-0.0552500476

State=1-A\HF=-1863.6177052

		1			2			3		
		A			A			A		
Frequencies --		-5.7045			35.2231			67.9384		
Red. masses --		3.9390			7.5668			5.8377		
Frc consts --		0.0001			0.0055			0.0159		
IR Inten --		0.2369			0.3133			0.0395		
Atom	AN	X	Y	Z	X	Y	Z	X	Y	Z
1	13	-0.02	0.04	-0.06	-0.12	-0.04	0.07	-0.07	0.03	0.03
2	13	-0.02	0.04	0.04	-0.10	-0.02	0.12	0.03	0.11	0.08
3	13	0.02	-0.04	0.04	0.10	0.02	0.11	-0.02	-0.07	0.08
4	13	0.02	-0.04	-0.06	0.11	0.04	0.07	0.03	-0.02	0.03
5	3	0.00	0.00	0.11	0.00	0.00	0.08	0.05	0.03	0.22
6	3	0.00	-0.01	-0.03	0.00	0.01	0.37	-0.01	0.02	0.28
7	3	0.00	-0.01	0.10	0.00	0.00	0.20	-0.01	0.01	-0.42
8	20	0.00	0.00	-0.02	0.00	0.00	-0.18	0.01	-0.02	-0.09
9	6	-0.09	0.09	-0.15	-0.09	-0.09	-0.08	0.11	0.06	-0.06
10	6	0.09	-0.08	-0.16	0.09	0.08	-0.07	-0.12	-0.10	-0.06
11	6	-0.14	0.14	0.07	-0.14	-0.13	-0.13	0.19	0.10	-0.04
12	1	-0.17	0.18	-0.30	-0.18	-0.17	-0.05	0.21	0.12	-0.07
13	6	0.13	-0.14	0.06	0.15	0.13	-0.12	-0.18	-0.14	-0.04
14	1	0.17	-0.15	-0.31	0.17	0.15	-0.04	-0.23	-0.17	-0.07
15	6	0.00	0.00	0.21	0.01	0.00	-0.16	0.01	-0.02	-0.03
16	1	-0.25	0.27	0.13	-0.29	-0.26	-0.15	0.35	0.22	-0.03
17	1	0.25	-0.27	0.11	0.30	0.26	-0.14	-0.33	-0.25	-0.03
18	1	-0.01	-0.01	0.39	0.02	0.01	-0.25	0.02	-0.01	0.01

	4	5	6

		A			A			A		
Frequencies --		71.4583			82.4230			97.1101		
Red. masses --		11.8898			11.1181			8.0782		
Frc consts --		0.0358			0.0445			0.0449		
IR Inten --		1.7500			1.5729			1.8771		
Atom	AN	X	Y	Z	X	Y	Z	X	Y	Z
1	13	-0.16	0.09	-0.03	-0.14	0.05	-0.11	0.16	-0.01	0.00
2	13	0.06	0.20	-0.01	0.04	-0.01	-0.17	0.07	-0.03	0.01
3	13	0.07	0.24	-0.04	-0.05	-0.02	-0.17	0.06	-0.04	-0.02
4	13	-0.18	0.09	-0.01	0.15	-0.07	-0.11	0.17	-0.01	0.00
5	3	0.44	0.24	-0.05	-0.03	-0.01	-0.09	0.06	-0.02	0.01
6	3	-0.04	0.15	-0.02	0.00	0.00	0.88	0.02	0.20	0.03
7	3	-0.09	0.05	0.10	0.01	0.00	0.01	-0.26	0.06	-0.01
8	20	0.11	-0.22	0.03	-0.01	0.01	0.21	0.14	-0.01	0.00
9	6	-0.12	-0.22	0.01	-0.01	0.00	0.01	-0.33	-0.02	0.00
10	6	-0.06	-0.20	0.01	0.03	0.02	0.01	-0.33	-0.02	0.00
11	6	-0.03	-0.17	0.02	-0.03	-0.01	0.02	-0.23	0.03	0.00
12	1	-0.21	-0.27	0.00	-0.02	0.00	0.00	-0.40	-0.06	0.00
13	6	0.06	-0.13	0.02	0.05	0.02	0.02	-0.23	0.03	0.00
14	1	-0.10	-0.23	0.00	0.05	0.02	0.00	-0.41	-0.07	0.00
15	6	0.07	-0.12	0.02	0.01	0.01	0.02	-0.15	0.07	0.00
16	1	-0.05	-0.18	0.02	-0.08	-0.02	0.02	-0.20	0.05	0.00
17	1	0.12	-0.11	0.02	0.10	0.04	0.02	-0.21	0.04	0.00
18	1	0.15	-0.10	0.02	0.02	0.01	-0.01	-0.05	0.10	0.00

		7			8			9		
		A			A			A		
Frequencies --		112.5671			113.2835			139.5785		
Red. masses --		8.3105			15.5514			5.3937		
Frc consts --		0.0620			0.1176			0.0619		
IR Inten --		0.5017			0.7935			7.4026		
Atom	AN	X	Y	Z	X	Y	Z	X	Y	Z
1	13	0.04	-0.02	0.01	0.01	-0.04	0.19	-0.03	0.06	0.02
2	13	-0.10	-0.06	-0.01	0.24	0.26	-0.23	0.05	0.03	0.00
3	13	-0.10	-0.06	0.01	-0.24	-0.26	-0.23	0.07	0.03	-0.01
4	13	0.04	-0.02	-0.01	-0.01	0.04	0.19	0.02	0.06	0.00
5	3	0.97	0.01	0.00	0.00	0.00	0.51	0.05	0.02	0.01
6	3	0.01	-0.10	0.00	0.00	-0.01	-0.05	-0.14	-0.47	-0.02
7	3	-0.01	0.02	0.00	0.00	-0.01	0.21	0.08	-0.26	-0.01
8	20	-0.09	0.11	0.00	0.00	0.00	-0.15	0.07	0.03	0.01
9	6	0.00	0.00	0.00	-0.07	-0.04	0.05	0.07	0.07	0.00
10	6	0.00	0.00	0.00	0.08	0.04	0.06	0.07	0.07	0.00
11	6	0.00	0.00	0.00	-0.11	-0.07	0.05	-0.15	-0.05	0.00
12	1	0.00	0.00	0.00	-0.13	-0.08	0.05	0.22	0.16	0.00
13	6	0.00	0.01	0.00	0.12	0.06	0.05	-0.15	-0.05	0.00

14	1	0.00	0.00	0.00	0.14	0.08	0.05	0.21	0.16	0.00
15	6	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.05	-0.27	-0.12	-0.01
16	1	0.00	0.00	0.00	-0.21	-0.12	0.05	-0.21	-0.08	-0.01
17	1	0.00	0.00	0.00	0.21	0.12	0.05	-0.22	-0.07	-0.01
18	1	-0.01	0.00	0.00	0.00	0.00	0.04	-0.47	-0.18	-0.01

	10	11	12
	A	A	A
Frequencies --	145.1859	161.1020	162.4792
Red. masses --	16.2608	24.2193	21.9607
Frc consts --	0.2019	0.3704	0.3416
IR Inten --	0.2002	0.0085	0.3955

Atom	AN	X	Y	Z	X	Y	Z	X	Y	Z
1	13	0.36	-0.03	-0.14	0.31	0.33	0.18	-0.25	-0.22	0.06
2	13	0.22	-0.04	0.14	-0.35	0.04	-0.19	0.43	0.00	-0.07
3	13	-0.20	0.04	0.14	0.40	-0.04	-0.19	0.40	0.01	0.08
4	13	-0.37	0.05	-0.14	-0.33	-0.35	0.17	-0.21	-0.19	-0.07
5	3	0.01	0.00	-0.15	0.00	-0.01	0.16	0.07	-0.15	0.00
6	3	-0.03	-0.08	0.65	-0.01	-0.01	0.33	-0.13	-0.05	-0.03
7	3	0.01	-0.04	0.03	0.00	0.00	-0.01	-0.05	0.17	0.00
8	20	0.01	0.01	-0.15	0.00	0.02	-0.05	-0.15	0.34	0.00
9	6	-0.03	0.00	0.03	0.00	0.00	-0.01	-0.14	-0.09	0.00
10	6	0.04	0.03	0.03	-0.01	-0.01	-0.01	-0.14	-0.09	0.00
11	6	-0.09	-0.04	0.04	0.00	0.00	-0.01	-0.01	-0.01	0.00
12	1	-0.03	-0.01	0.03	0.00	0.00	-0.01	-0.23	-0.14	0.00
13	6	0.04	0.02	0.04	-0.01	-0.01	-0.01	-0.01	-0.02	0.00
14	1	0.10	0.06	0.03	-0.01	-0.01	-0.01	-0.23	-0.15	0.00
15	6	-0.04	-0.02	0.04	0.00	0.00	-0.01	0.07	0.03	0.00
16	1	-0.16	-0.07	0.04	0.00	0.00	-0.01	0.01	-0.01	0.00
17	1	0.09	0.04	0.04	-0.01	-0.01	-0.01	0.01	-0.01	0.00
18	1	-0.07	-0.03	0.02	0.00	0.00	-0.02	0.10	0.04	0.00

	13	14	15
	A	A	A
Frequencies --	199.5807	206.4946	219.7415
Red. masses --	17.9584	21.5462	5.8212
Frc consts --	0.4215	0.5413	0.1656
IR Inten --	7.1197	6.7225	15.3812

Atom	AN	X	Y	Z	X	Y	Z	X	Y	Z
1	13	-0.13	0.41	0.11	0.26	-0.22	-0.05	0.00	-0.04	0.00
2	13	0.23	-0.08	0.07	0.08	0.30	0.04	0.00	-0.01	0.01
3	13	-0.23	0.08	0.07	0.08	0.30	-0.04	0.00	-0.01	-0.01
4	13	0.12	-0.41	0.11	0.26	-0.22	0.05	0.00	-0.04	0.00
5	3	0.00	0.00	-0.65	-0.03	0.47	0.00	0.04	0.03	0.00
6	3	0.00	0.00	-0.16	0.15	-0.07	0.01	-0.13	0.65	0.00
7	3	0.00	0.00	0.01	0.02	-0.19	-0.01	0.02	0.03	0.00

8	20	0.00	0.00	-0.12	-0.40	-0.15	0.00	0.02	0.05	0.00
9	6	-0.02	-0.01	0.01	0.02	0.04	0.00	0.16	0.03	0.00
10	6	0.02	0.01	0.01	0.02	0.04	0.00	0.16	0.03	0.00
11	6	-0.03	-0.02	0.01	-0.07	-0.01	0.00	-0.06	-0.10	0.00
12	1	-0.03	-0.02	0.01	0.08	0.07	0.00	0.30	0.11	0.00
13	6	0.03	0.02	0.01	-0.07	-0.01	0.00	-0.06	-0.10	0.00
14	1	0.03	0.02	0.01	0.08	0.08	0.00	0.30	0.11	0.00
15	6	0.00	0.00	0.01	-0.11	-0.04	0.00	-0.23	-0.19	0.00
16	1	-0.04	-0.03	0.01	-0.10	-0.02	0.00	-0.14	-0.14	-0.01
17	1	0.05	0.03	0.01	-0.09	-0.02	0.00	-0.12	-0.13	0.00
18	1	0.00	0.00	0.01	-0.14	-0.05	0.00	-0.25	-0.19	0.00

	16	17	18
	A	A	A
Frequencies --	248.8982	257.5492	293.1269
Red. masses --	23.0094	11.8014	24.8369
Frc consts --	0.8398	0.4612	1.2574
IR Inten --	4.8102	0.8820	12.8450

Atom	AN	X	Y	Z	X	Y	Z	X	Y	Z
1	13	0.08	0.38	0.04	-0.02	0.07	-0.02	-0.05	0.09	-0.10
2	13	0.22	-0.17	-0.14	0.08	-0.32	-0.05	0.11	-0.16	0.62
3	13	0.22	-0.16	0.13	-0.08	0.32	-0.05	0.11	-0.16	-0.62
4	13	0.07	0.38	-0.04	0.02	-0.07	-0.02	-0.05	0.09	0.10
5	3	0.09	-0.46	0.01	0.00	0.00	0.87	0.03	0.29	0.00
6	3	-0.04	0.26	0.00	0.00	0.00	-0.03	-0.08	0.02	0.00
7	3	0.01	0.08	0.00	0.00	0.00	0.02	0.00	0.01	0.00
8	20	-0.37	-0.23	0.00	0.00	0.00	-0.04	-0.10	0.02	0.00
9	6	0.01	0.00	0.00	0.01	0.01	-0.01	-0.01	-0.01	0.00
10	6	0.01	0.00	0.00	-0.01	-0.01	-0.01	-0.01	-0.01	0.00
11	6	-0.03	-0.03	0.00	0.02	0.01	-0.01	0.03	0.01	0.00
12	1	0.03	0.01	0.00	0.03	0.01	-0.01	-0.03	-0.02	0.00
13	6	-0.03	-0.03	0.00	-0.02	-0.01	-0.01	0.03	0.01	0.00
14	1	0.03	0.01	0.00	-0.03	-0.01	-0.01	-0.03	-0.03	0.00
15	6	-0.06	-0.05	0.00	0.00	0.00	-0.01	0.04	0.02	0.00
16	1	-0.05	-0.04	0.00	0.05	0.02	-0.01	0.05	0.02	0.00
17	1	-0.05	-0.04	0.00	-0.05	-0.02	-0.01	0.05	0.02	0.00
18	1	-0.05	-0.04	0.00	0.00	0.00	0.00	0.06	0.03	0.00

	19	20	21
	A	A	A
Frequencies --	311.2889	320.2564	339.8172
Red. masses --	6.9742	5.7039	25.1757
Frc consts --	0.3982	0.3447	1.7129
IR Inten --	5.1574	0.0774	1.0057

Atom	AN	X	Y	Z	X	Y	Z	X	Y	Z
1	13	0.07	-0.01	0.02	0.00	0.00	0.00	0.03	-0.01	0.66

2	13	-0.01	0.02	0.01	0.02	0.01	0.00	-0.03	0.03	0.12
3	13	-0.02	0.01	-0.01	-0.02	-0.01	0.00	-0.03	0.03	-0.12
4	13	0.07	-0.01	-0.02	-0.01	0.00	0.00	0.03	-0.01	-0.66
5	3	-0.05	0.01	0.00	0.00	0.00	-0.04	-0.02	0.09	0.00
6	3	-0.43	-0.25	0.00	0.02	0.01	0.06	-0.09	0.08	0.00
7	3	-0.04	0.81	0.05	0.00	-0.04	0.73	0.00	-0.21	0.00
8	20	0.00	-0.02	0.00	0.00	0.00	0.00	-0.01	-0.04	0.00
9	6	0.05	-0.03	0.00	0.09	0.06	-0.08	-0.01	0.00	0.00
10	6	0.04	-0.04	-0.01	-0.09	-0.05	-0.08	-0.01	0.00	0.00
11	6	0.04	-0.04	-0.01	0.17	0.09	-0.07	0.02	0.02	0.00
12	1	0.02	-0.06	0.00	0.17	0.10	-0.07	-0.01	0.00	0.00
13	6	0.02	-0.05	0.00	-0.18	-0.09	-0.07	0.02	0.02	0.00
14	1	0.00	-0.07	-0.01	-0.17	-0.09	-0.08	-0.01	0.00	0.00
15	6	-0.06	-0.08	0.00	0.00	0.00	-0.09	0.05	0.04	0.00
16	1	0.01	-0.06	-0.01	0.30	0.16	-0.07	0.05	0.04	0.00
17	1	-0.02	-0.08	0.00	-0.30	-0.15	-0.07	0.05	0.03	0.00
18	1	-0.18	-0.12	0.00	0.01	0.00	-0.06	0.07	0.04	0.00

	22	23	24
	A	A	A
Frequencies --	385.0228	402.9934	508.2173
Red. masses --	8.4395	7.0883	5.5574
Frc consts --	0.7371	0.6782	0.8457
IR Inten --	42.9891	89.5599	55.9030

Atom	AN	X	Y	Z	X	Y	Z	X	Y	Z
1	13	-0.01	0.03	0.01	-0.05	0.01	0.04	0.00	0.00	0.00
2	13	0.03	-0.15	-0.11	0.00	-0.03	0.01	-0.02	0.00	0.01
3	13	0.03	-0.15	0.11	0.00	-0.03	-0.01	-0.02	0.00	-0.01
4	13	-0.01	0.03	-0.01	-0.05	0.01	-0.04	0.00	0.00	0.00
5	3	-0.06	0.95	0.00	-0.02	0.11	0.00	0.00	-0.02	0.00
6	3	-0.12	0.00	0.00	0.83	-0.11	0.00	0.05	0.07	0.00
7	3	0.04	-0.03	0.00	-0.09	0.39	0.00	0.82	0.10	0.00
8	20	0.00	-0.01	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
9	6	-0.01	-0.01	0.00	0.05	0.04	0.00	-0.09	-0.03	-0.01
10	6	-0.01	-0.01	0.00	0.05	0.04	0.00	-0.09	-0.03	0.00
11	6	0.01	0.01	0.00	-0.08	-0.05	-0.01	-0.09	-0.01	0.00
12	1	-0.03	-0.02	0.00	0.07	0.04	0.01	-0.25	-0.11	-0.01
13	6	0.01	0.01	0.00	-0.08	-0.05	0.01	-0.09	-0.02	0.00
14	1	-0.03	-0.02	0.00	0.07	0.04	-0.01	-0.25	-0.12	0.01
15	6	0.02	0.02	0.00	-0.14	-0.09	0.00	0.03	0.03	0.00
16	1	0.02	0.01	0.00	-0.13	-0.08	-0.01	-0.22	-0.08	-0.01
17	1	0.02	0.01	0.00	-0.13	-0.07	0.01	-0.23	-0.08	0.00
18	1	0.02	0.01	0.00	-0.02	-0.05	0.00	-0.12	-0.02	0.00

	25	26	27
	A	A	A

Frequencies --		624.3975			633.2941			748.8097		
Red. masses --		5.3252			4.0109			1.2685		
Frc consts --		1.2232			0.9478			0.4191		
IR Inten --		20.4096			0.0403			3.5850		
Atom	AN	X	Y	Z	X	Y	Z	X	Y	Z
1	13	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
2	13	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
3	13	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
4	13	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
5	3	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
6	3	0.05	0.00	0.00	0.00	0.00	-0.01	0.00	0.00	0.00
7	3	0.10	-0.03	0.00	0.00	0.00	0.02	0.00	0.00	0.01
8	20	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
9	6	-0.13	-0.05	-0.02	0.26	0.17	0.01	-0.05	-0.04	-0.01
10	6	-0.10	-0.04	0.02	-0.27	-0.17	0.00	0.04	0.03	-0.01
11	6	0.26	0.14	0.01	-0.16	-0.09	-0.01	-0.08	-0.05	0.01
12	1	-0.24	-0.11	-0.02	0.43	0.26	0.00	0.33	0.19	-0.01
13	6	0.25	0.13	-0.01	0.17	0.10	-0.01	0.08	0.05	0.01
14	1	-0.19	-0.09	0.02	-0.44	-0.27	0.00	-0.30	-0.17	-0.01
15	6	-0.39	-0.18	0.00	-0.01	-0.01	0.01	0.00	0.00	0.00
16	1	0.43	0.23	0.02	-0.26	-0.14	-0.01	0.52	0.31	0.04
17	1	0.42	0.22	-0.01	0.29	0.16	-0.01	-0.50	-0.29	0.03
18	1	-0.12	-0.09	0.00	-0.01	0.00	-0.06	-0.01	0.00	-0.09

		28			29			30		
		A			A			A		
Frequencies --		763.1602			785.2280			850.8137		
Red. masses --		1.2136			1.1772			1.7781		
Frc consts --		0.4164			0.4276			0.7584		
IR Inten --		66.0455			306.8716			1.3678		
Atom	AN	X	Y	Z	X	Y	Z	X	Y	Z
1	13	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
2	13	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
3	13	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
4	13	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
5	3	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
6	3	-0.02	-0.01	0.00	0.02	0.01	0.00	0.00	-0.01	0.00
7	3	-0.03	-0.02	0.00	-0.04	-0.02	0.00	0.00	0.00	0.00
8	20	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
9	6	0.07	0.04	0.00	0.00	0.00	0.00	-0.01	-0.07	0.00
10	6	0.08	0.05	0.00	0.00	0.00	0.00	-0.01	-0.06	-0.01
11	6	0.00	-0.01	0.00	0.05	0.04	-0.02	0.06	0.00	0.12
12	1	-0.52	-0.30	-0.02	-0.13	-0.09	0.02	0.21	0.20	-0.16
13	6	0.01	-0.01	0.00	0.06	0.04	0.02	0.06	0.01	-0.11
14	1	-0.54	-0.31	0.01	-0.13	-0.09	-0.02	0.19	0.18	0.16

15	6	-0.05	0.00	0.00	0.06	-0.01	0.00	-0.10	0.14	0.00
16	1	-0.15	-0.10	-0.01	-0.36	-0.17	-0.03	-0.37	-0.41	0.04
17	1	-0.18	-0.13	0.01	-0.37	-0.17	0.02	-0.36	-0.40	-0.05
18	1	0.37	0.13	-0.01	-0.74	-0.25	0.01	0.26	0.24	0.00

	31	32	33
	A	A	A
Frequencies --	859.8695	876.5657	882.0181
Red. masses --	4.1607	1.8838	1.2258
Frc consts --	1.8125	0.8528	0.5619
IR Inten --	0.0619	3.8804	0.0789

Atom	AN	X	Y	Z	X	Y	Z	X	Y	Z
1	13	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
2	13	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
3	13	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
4	13	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
5	3	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
6	3	0.00	0.00	0.00	-0.03	-0.01	0.00	0.00	0.00	0.00
7	3	0.00	0.00	0.00	0.01	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
8	20	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
9	6	-0.11	0.19	0.21	-0.08	0.06	-0.02	-0.07	-0.03	0.01
10	6	0.11	-0.20	0.20	-0.06	0.05	0.03	0.08	0.03	0.01
11	6	-0.09	0.11	-0.15	0.05	0.02	-0.14	0.03	0.03	0.00
12	1	-0.23	0.22	0.09	0.27	0.11	0.16	0.49	0.31	0.01
13	6	0.08	-0.11	-0.17	0.05	0.01	0.14	-0.04	-0.04	-0.01
14	1	0.23	-0.22	0.10	0.21	0.06	-0.16	-0.52	-0.33	0.01
15	6	-0.01	0.01	-0.11	0.03	-0.13	-0.01	0.00	0.00	-0.01
16	1	0.27	-0.12	-0.27	-0.41	-0.15	-0.14	-0.29	-0.18	-0.03
17	1	-0.26	0.11	-0.27	-0.37	-0.13	0.13	0.33	0.20	-0.03
18	1	0.01	0.00	0.42	0.60	0.04	-0.01	-0.03	0.00	0.02

	34	35	36
	A	A	A
Frequencies --	1016.5231	1023.2485	1072.3626
Red. masses --	1.3986	1.4764	1.2510
Frc consts --	0.8515	0.9108	0.8476
IR Inten --	6.9788	25.0638	5.1694

Atom	AN	X	Y	Z	X	Y	Z	X	Y	Z
1	13	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
2	13	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
3	13	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
4	13	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
5	3	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
6	3	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
7	3	0.00	0.00	-0.01	0.01	-0.01	0.00	0.00	0.00	0.00
8	20	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00

9	6	-0.04	0.07	0.01	-0.02	0.04	0.09	0.01	-0.02	0.04
10	6	0.04	-0.07	0.02	-0.02	0.03	-0.09	-0.01	0.01	0.03
11	6	0.01	0.00	0.09	0.02	-0.04	-0.05	-0.04	0.08	-0.02
12	1	-0.18	0.23	-0.27	0.05	-0.13	0.33	0.10	-0.21	0.32
13	6	-0.01	0.00	0.08	0.02	-0.05	0.06	0.04	-0.07	-0.03
14	1	0.16	-0.20	-0.23	0.07	-0.14	-0.38	-0.08	0.17	0.28
15	6	0.00	-0.01	-0.09	-0.05	0.11	0.00	0.00	0.00	-0.05
16	1	-0.02	-0.02	0.09	0.30	-0.42	-0.21	-0.27	0.45	0.12
17	1	-0.02	0.07	0.07	0.30	-0.42	0.20	0.25	-0.43	0.09
18	1	-0.01	0.01	-0.82	-0.15	0.08	-0.05	0.00	0.01	-0.39

	37	38	39
	A	A	A
Frequencies --	1076.6110	1140.9120	1283.4327
Red. masses --	1.2593	5.2753	1.2894
Frc consts --	0.8600	4.0458	1.2514
IR Inten --	0.3527	8.1959	0.0022

Atom	AN	X	Y	Z	X	Y	Z	X	Y	Z
1	13	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
2	13	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
3	13	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
4	13	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
5	3	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
6	3	0.00	0.00	0.00	-0.01	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
7	3	0.00	0.00	0.00	0.01	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
8	20	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
9	6	0.02	-0.04	0.07	-0.11	0.20	0.17	-0.02	0.03	-0.05
10	6	0.02	-0.04	-0.07	-0.12	0.21	-0.16	0.02	-0.03	-0.06
11	6	-0.01	0.03	0.05	0.05	-0.07	0.25	-0.03	0.06	0.01
12	1	0.17	-0.28	0.45	-0.20	0.29	0.07	0.12	-0.23	0.34
13	6	-0.01	0.04	-0.05	0.04	-0.06	-0.25	0.03	-0.06	0.01
14	1	0.17	-0.28	-0.50	-0.20	0.30	-0.05	-0.12	0.22	0.36
15	6	-0.02	0.00	0.00	0.15	-0.26	-0.01	0.00	0.00	0.09
16	1	-0.21	0.25	0.15	0.08	-0.26	0.22	0.21	-0.38	-0.16
17	1	-0.23	0.30	-0.15	0.08	-0.25	-0.23	-0.21	0.38	-0.14
18	1	0.09	0.03	0.02	0.16	-0.29	0.00	0.00	0.01	-0.41

	40	41	42
	A	A	A
Frequencies --	1377.8354	1382.3952	1463.4020
Red. masses --	4.4536	4.8129	2.4256
Frc consts --	4.9815	5.4190	3.0605
IR Inten --	1.7262	0.0143	4.2179

Atom	AN	X	Y	Z	X	Y	Z	X	Y	Z
1	13	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
2	13	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00

3	13	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
4	13	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
5	3	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
6	3	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
7	3	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
8	20	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
9	6	0.07	-0.14	0.26	0.08	-0.11	-0.02	0.01	-0.01	-0.15
10	6	0.08	-0.14	-0.26	-0.08	0.10	-0.03	0.02	-0.02	0.15
11	6	-0.09	0.20	-0.07	-0.12	0.18	0.19	-0.08	0.13	0.09
12	1	-0.14	0.26	-0.35	0.05	-0.11	-0.05	0.15	-0.27	0.19
13	6	-0.09	0.21	0.07	0.12	-0.18	0.19	-0.08	0.14	-0.09
14	1	-0.13	0.24	0.36	-0.06	0.13	-0.02	0.14	-0.26	-0.20
15	6	0.02	-0.13	0.01	0.00	0.00	-0.37	0.05	-0.11	0.00
16	1	0.07	-0.20	-0.23	0.20	-0.34	-0.01	0.25	-0.46	-0.13
17	1	0.09	-0.24	0.22	-0.19	0.32	0.03	0.26	-0.46	0.11
18	1	0.24	-0.06	-0.03	0.02	-0.02	0.56	0.09	-0.13	0.00

	43	44	45
	A	A	A
Frequencies --	1469.5824	3111.7068	3193.3362
Red. masses --	2.7272	1.0905	1.0875
Frc consts --	3.4702	6.2209	6.5340
IR Inten --	0.1913	4.9350	1.5050

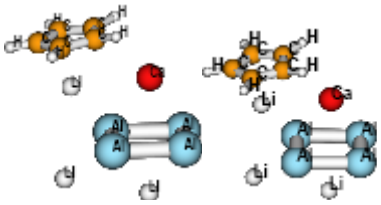
Atom	AN	X	Y	Z	X	Y	Z	X	Y	Z
1	13	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
2	13	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
3	13	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
4	13	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
5	3	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
6	3	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
7	3	0.00	0.00	0.01	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
8	20	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
9	6	0.10	-0.16	0.08	0.00	0.00	0.00	0.02	-0.04	-0.03
10	6	-0.09	0.16	0.09	0.00	0.00	0.00	-0.02	0.04	-0.03
11	6	-0.06	0.12	-0.08	0.00	0.00	0.00	0.00	-0.01	0.02
12	1	-0.10	0.17	-0.46	0.00	0.00	0.00	-0.26	0.45	0.39
13	6	0.06	-0.11	-0.09	0.00	0.00	0.00	0.00	0.01	0.02
14	1	0.10	-0.15	-0.47	0.00	0.00	0.00	0.27	-0.46	0.36
15	6	0.00	0.00	0.15	0.03	-0.08	0.00	0.00	0.00	0.00
16	1	0.07	-0.13	-0.21	0.01	-0.03	0.08	-0.04	0.09	-0.28
17	1	-0.07	0.13	-0.20	0.01	-0.03	-0.08	0.03	-0.07	-0.26
18	1	0.00	0.01	-0.45	-0.28	0.95	0.02	0.00	0.00	0.00

	46	47	48
	A	A	A
Frequencies --	3204.4805	3214.7887	3222.6658

Red. masses --		1.0921			1.0960			1.1033		
Frc consts --		6.6075			6.6739			6.7512		
IR Inten --		8.6229			8.6272			6.2624		
Atom	AN	X	Y	Z	X	Y	Z	X	Y	Z
1	13	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
2	13	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
3	13	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
4	13	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
5	3	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
6	3	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
7	3	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
8	20	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
9	6	-0.02	0.03	0.03	-0.01	0.02	0.02	0.02	-0.03	-0.03
10	6	-0.02	0.03	-0.03	0.01	-0.02	0.01	0.02	-0.03	0.03
11	6	0.00	0.01	-0.04	0.01	-0.02	0.05	-0.01	0.01	-0.04
12	1	0.20	-0.33	-0.30	0.13	-0.22	-0.19	-0.19	0.33	0.29
13	6	0.00	0.01	0.04	-0.01	0.02	0.05	-0.01	0.01	0.05
14	1	0.22	-0.37	0.30	-0.10	0.17	-0.13	-0.20	0.35	-0.28
15	6	0.00	0.01	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.01	0.00
16	1	0.06	-0.15	0.48	-0.08	0.20	-0.61	0.06	-0.14	0.44
17	1	0.05	-0.12	-0.45	0.08	-0.17	-0.61	0.06	-0.14	-0.52
18	1	0.02	-0.08	0.00	0.00	0.00	0.01	0.03	-0.08	0.00

$CpCaAl_4Li_3 \rightarrow CpLi + Al_4Li_2Ca$ **-21.9267507**

$CpCaAl_4Li_3 \rightarrow Cp^- + Al_4Li_3Ca^+$ **-137.328446**



Charge = 0 Multiplicity = 1

Al,0,1.513987837,1.0108063745,-1.0939403567

Al,0,2.3336711412,-1.5814693404,-1.4556152455

Al,0,2.2723557468,-1.9688995546,1.0123835577

Al,0,1.4520677541,0.6166200522,1.4207203831

Li,0,2.2981291961,2.9797045085,0.5244266369

Li,0,3.8924619848,0.1197178715,0.1168295193

Li,0,-1.1024961984,1.6002658138,0.2284598297

Ca,0,-0.476520733,-1.3273871315,-0.2200438641

C,0,-2.8315834701,0.0079440601,0.6533799116

C,0,-3.0507740307,1.2571400221,1.2830489029

C,0,-2.7946849601,0.230065742,-0.755678888

H,0,-2.870490036,-0.9497429585,1.1686391088
C,0,-3.1613175769,2.2428258346,0.2744904858
H,0,-3.1427262125,1.4161500815,2.3492247561
C,0,-2.9912362987,1.6140656092,-0.9812499982
H,0,-2.7995941175,-0.5224268059,-1.5417759655
H,0,-3.3510166923,3.2967207436,0.4356506085
H,0,-3.0295374372,2.0939814674,-1.9500800698

State=1-A\HF=-1863.6249754

		1			2			3		
		A			A			A		
Frequencies --		38.4212			48.4157			82.5963		
Red. masses --		7.6519			4.9954			8.7640		
Frc consts --		0.0067			0.0069			0.0352		
IR Inten --		2.1360			0.3957			4.7912		
Atom	AN	X	Y	Z	X	Y	Z	X	Y	Z
1	13	0.06	0.06	-0.09	0.04	-0.04	0.00	0.10	-0.12	0.00
2	13	0.11	0.05	0.14	0.06	-0.04	0.01	-0.06	0.05	0.00
3	13	-0.11	-0.05	0.14	-0.06	0.04	0.01	-0.06	0.06	0.00
4	13	-0.06	-0.06	-0.09	-0.04	0.04	0.00	0.09	-0.11	-0.01
5	3	0.00	0.00	-0.21	0.00	0.00	0.07	0.61	-0.18	0.00
6	3	0.00	0.00	0.12	0.00	0.00	0.12	0.19	0.20	0.01
7	3	0.00	0.00	0.03	0.00	0.00	-0.09	-0.12	-0.10	0.00
8	20	0.00	0.00	-0.20	0.00	0.00	-0.17	-0.07	-0.17	0.00
9	6	0.07	0.08	-0.05	0.01	-0.12	0.22	0.00	0.13	0.00
10	6	0.11	0.13	0.14	0.02	-0.19	0.03	-0.08	0.18	0.00
11	6	-0.07	-0.08	-0.05	-0.01	0.12	0.22	0.00	0.13	0.00
12	1	0.12	0.16	-0.18	0.08	-0.26	0.35	0.05	0.11	0.00
13	6	0.00	0.00	0.27	0.00	0.00	-0.09	-0.13	0.21	0.00
14	1	0.22	0.24	0.19	0.04	-0.37	-0.02	-0.11	0.19	0.00
15	6	-0.12	-0.13	0.14	-0.02	0.19	0.03	-0.08	0.18	0.00
16	1	-0.12	-0.16	-0.18	-0.08	0.26	0.35	0.05	0.11	0.00
17	1	0.00	0.00	0.43	0.00	0.00	-0.24	-0.21	0.26	0.00
18	1	-0.22	-0.24	0.19	-0.04	0.37	-0.02	-0.11	0.19	0.00

		4			5			6		
		A			A			A		
Frequencies --		89.9651			99.7648			107.9206		
Red. masses --		15.2830			4.9290			9.6221		
Frc consts --		0.0729			0.0289			0.0660		
IR Inten --		1.2699			0.0267			0.7041		
Atom	AN	X	Y	Z	X	Y	Z	X	Y	Z
1	13	-0.23	0.06	0.23	0.05	-0.05	0.04	0.11	0.08	0.00
2	13	-0.06	0.18	0.11	0.00	0.00	0.00	0.20	0.05	0.01
3	13	0.06	-0.18	0.11	-0.01	0.00	0.00	0.20	0.04	-0.01

4	13	0.23	-0.06	0.23	-0.05	0.05	0.04	0.11	0.09	0.01
5	3	0.01	0.00	0.00	0.00	0.00	0.10	-0.34	0.13	0.00
6	3	0.00	0.00	-0.77	0.00	0.00	-0.15	0.07	-0.05	-0.01
7	3	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	-0.41	-0.23	0.05	0.00
8	20	0.00	0.00	-0.25	0.00	0.00	0.07	0.05	-0.16	0.00
9	6	0.00	-0.01	-0.03	0.15	-0.04	-0.09	-0.16	-0.07	0.00
10	6	0.00	-0.02	-0.05	0.24	-0.07	-0.01	-0.26	-0.01	0.00
11	6	0.00	0.02	-0.03	-0.15	0.04	-0.09	-0.16	-0.07	0.00
12	1	0.02	-0.03	-0.01	0.22	-0.05	-0.11	-0.08	-0.10	0.00
13	6	0.00	0.00	-0.07	0.00	0.00	0.05	-0.31	0.02	0.00
14	1	-0.01	-0.03	-0.06	0.46	-0.12	0.02	-0.29	0.01	0.00
15	6	0.00	0.02	-0.05	-0.24	0.07	-0.01	-0.26	-0.01	0.00
16	1	-0.02	0.04	-0.01	-0.21	0.05	-0.11	-0.08	-0.10	0.00
17	1	0.00	0.00	-0.09	0.00	0.00	0.12	-0.39	0.08	0.00
18	1	0.01	0.04	-0.06	-0.45	0.12	0.01	-0.29	0.01	0.00

	7	8	9
	A	A	A
Frequencies --	123.9307	124.6117	143.6958
Red. masses --	9.6978	11.8899	13.6817
Frc consts --	0.0878	0.1088	0.1664
IR Inten --	9.4396	2.0647	0.0627

Atom	AN	X	Y	Z	X	Y	Z	X	Y	Z
1	13	-0.13	0.07	0.01	0.09	-0.24	-0.20	0.21	0.02	0.14
2	13	0.10	-0.08	0.00	-0.02	0.09	0.13	0.30	-0.01	-0.14
3	13	0.09	-0.08	0.01	0.02	-0.09	0.13	-0.30	0.00	-0.14
4	13	-0.13	0.07	-0.01	-0.09	0.24	-0.20	-0.21	-0.02	0.14
5	3	0.79	-0.09	0.00	0.00	0.00	0.57	0.00	0.00	-0.26
6	3	-0.08	-0.06	0.00	0.00	0.00	-0.56	0.00	0.00	-0.63
7	3	-0.11	0.11	0.00	0.00	0.00	0.12	0.00	0.00	0.11
8	20	0.13	0.15	0.00	0.00	0.00	0.02	0.00	0.00	0.07
9	6	-0.07	-0.10	0.00	-0.05	0.02	0.05	-0.07	0.03	0.05
10	6	-0.13	-0.07	0.00	-0.08	0.03	0.03	-0.10	0.05	0.03
11	6	-0.07	-0.10	0.00	0.05	-0.02	0.05	0.06	-0.03	0.05
12	1	-0.02	-0.12	0.00	-0.07	0.03	0.04	-0.10	0.05	0.04
13	6	-0.16	-0.05	0.00	0.00	0.00	0.02	0.00	0.00	0.02
14	1	-0.14	-0.06	0.00	-0.15	0.06	0.02	-0.19	0.09	0.03
15	6	-0.13	-0.07	0.00	0.08	-0.03	0.03	0.10	-0.05	0.03
16	1	-0.02	-0.12	0.00	0.07	-0.03	0.04	0.10	-0.05	0.04
17	1	-0.19	-0.03	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.01
18	1	-0.14	-0.06	0.00	0.15	-0.06	0.02	0.19	-0.09	0.03

	10	11	12
	A	A	A
Frequencies --	153.9171	155.6847	156.7332
Red. masses --	4.2690	16.8071	23.2564

Frc consts	--	0.0596			0.2400			0.3366			
IR Inten	--	1.9568			3.8855			0.0483			
Atom	AN	X	Y	Z	X	Y	Z	X	Y	Z	
1	13	-0.01	-0.03	0.01	0.27	-0.24	0.04	0.33	-0.01	0.14	
2	13	-0.07	0.06	-0.01	-0.12	-0.02	-0.03	-0.25	0.41	-0.14	
3	13	-0.07	0.06	0.01	-0.08	-0.07	0.01	0.26	-0.41	-0.15	
4	13	-0.02	-0.03	0.00	0.22	-0.24	-0.02	-0.37	0.05	0.15	
5	3	-0.10	0.01	0.00	-0.20	-0.13	0.00	0.02	0.01	-0.04	
6	3	-0.02	0.06	0.00	0.26	0.06	0.03	-0.03	-0.01	0.41	
7	3	-0.09	-0.05	0.00	-0.03	0.25	0.00	0.00	-0.02	0.01	
8	20	0.07	0.03	0.00	0.09	0.37	-0.01	-0.01	-0.03	-0.10	
9	6	0.24	-0.17	0.00	-0.22	0.02	0.00	-0.01	0.01	0.03	
10	6	-0.03	0.00	0.00	-0.17	-0.02	0.00	-0.02	0.01	0.02	
11	6	0.24	-0.17	0.00	-0.22	0.02	0.00	0.04	-0.01	0.03	
12	1	0.43	-0.26	0.02	-0.28	0.04	-0.01	0.00	0.01	0.03	
13	6	-0.19	0.10	0.00	-0.12	-0.05	0.00	0.01	0.00	0.01	
14	1	-0.09	0.04	0.00	-0.16	-0.03	0.00	-0.04	0.02	0.02	
15	6	-0.03	0.00	0.00	-0.16	-0.02	0.00	0.05	-0.01	0.02	
16	1	0.44	-0.26	-0.02	-0.27	0.04	0.01	0.03	0.00	0.03	
17	1	-0.39	0.23	0.00	-0.06	-0.09	0.00	0.01	0.00	0.01	
18	1	-0.08	0.03	0.00	-0.15	-0.04	0.00	0.07	-0.01	0.02	

			13			14			15		
			A			A			A		
Frequencies	--	195.9689			202.8235			229.7707			
Red. masses	--	15.1908			12.9715			9.3843			
Frc consts	--	0.3437			0.3144			0.2919			
IR Inten	--	6.9864			19.8959			3.9230			
Atom	AN	X	Y	Z	X	Y	Z	X	Y	Z	
1	13	-0.19	0.03	-0.04	-0.20	-0.13	0.04	-0.02	0.12	0.02	
2	13	0.27	0.27	-0.13	0.02	0.16	-0.05	-0.06	-0.20	0.01	
3	13	-0.27	-0.27	-0.13	0.02	0.16	0.05	-0.06	-0.20	-0.01	
4	13	0.19	-0.02	-0.04	-0.20	-0.13	-0.04	-0.02	0.13	-0.02	
5	3	0.00	0.00	0.64	-0.18	-0.25	0.00	-0.09	0.18	-0.01	
6	3	0.00	0.00	0.42	0.13	0.53	0.00	0.70	0.58	0.00	
7	3	0.00	0.00	-0.01	0.01	0.30	0.00	0.01	0.04	0.00	
8	20	0.00	0.00	0.07	0.29	-0.13	0.00	-0.01	-0.02	0.00	
9	6	0.02	-0.01	-0.02	-0.13	0.06	0.00	0.03	-0.03	0.00	
10	6	0.03	-0.01	-0.01	0.02	-0.03	0.00	-0.01	-0.01	0.00	
11	6	-0.02	0.01	-0.02	-0.13	0.06	0.00	0.03	-0.03	0.00	
12	1	0.02	-0.01	-0.02	-0.18	0.09	-0.02	0.05	-0.04	0.00	
13	6	0.00	0.00	-0.01	0.11	-0.09	0.00	-0.02	0.01	0.00	
14	1	0.05	-0.02	-0.01	0.06	-0.06	0.00	-0.01	0.00	0.00	
15	6	-0.03	0.01	-0.01	0.02	-0.03	0.00	0.00	-0.01	0.00	
16	1	-0.01	0.01	-0.02	-0.18	0.09	0.02	0.05	-0.04	0.00	

17	1	0.00	0.00	-0.01	0.23	-0.17	0.00	-0.05	0.02	0.00
18	1	-0.05	0.02	-0.01	0.05	-0.06	0.00	-0.01	0.00	0.00

		16			17			18		
		A			A			A		
Frequencies --		238.4697			242.5117			279.4448		
Red. masses --		13.1636			17.6318			6.1131		
Frc consts --		0.4411			0.6110			0.2813		
IR Inten --		1.4271			9.7293			0.2074		
Atom	AN	X	Y	Z	X	Y	Z	X	Y	Z
1	13	0.13	0.35	-0.03	-0.14	-0.15	0.07	0.02	0.00	0.00
2	13	-0.06	-0.09	-0.01	0.33	0.05	-0.03	0.00	0.00	0.00
3	13	0.07	0.08	-0.01	0.33	0.05	0.03	0.00	0.00	0.00
4	13	-0.13	-0.35	-0.04	-0.14	-0.15	-0.07	-0.02	0.00	0.00
5	3	0.00	0.00	0.80	-0.16	-0.35	-0.01	0.00	0.00	-0.02
6	3	0.01	0.01	-0.22	0.25	0.38	0.00	0.00	0.00	-0.03
7	3	0.00	0.00	0.01	-0.01	-0.34	0.00	0.00	-0.01	0.76
8	20	0.00	0.00	-0.04	-0.32	0.19	0.00	0.00	0.00	0.01
9	6	0.00	0.00	0.00	0.09	-0.04	0.00	0.13	-0.07	-0.09
10	6	0.00	0.00	0.00	0.02	0.01	0.00	0.15	-0.10	-0.07
11	6	0.00	0.00	0.00	0.09	-0.04	0.00	-0.14	0.07	-0.09
12	1	0.01	0.00	0.00	0.10	-0.05	0.02	0.14	-0.09	-0.07
13	6	0.00	0.00	0.00	-0.04	0.05	0.00	0.00	0.00	-0.08
14	1	0.01	0.00	0.00	0.00	0.03	0.00	0.26	-0.15	-0.07
15	6	0.00	0.00	0.00	0.02	0.01	0.00	-0.15	0.10	-0.07
16	1	0.00	0.00	0.00	0.10	-0.05	-0.02	-0.15	0.09	-0.07
17	1	0.00	0.00	0.00	-0.12	0.10	0.00	0.00	0.00	-0.09
18	1	-0.01	0.00	0.00	0.00	0.03	0.00	-0.27	0.16	-0.07

		19			20			21		
		A			A			A		
Frequencies --		291.9139			306.8714			329.7286		
Red. masses --		7.4563			17.7725			12.5066		
Frc consts --		0.3744			0.9861			0.8011		
IR Inten --		28.5289			34.6444			12.1001		
Atom	AN	X	Y	Z	X	Y	Z	X	Y	Z
1	13	0.01	-0.01	0.04	0.02	0.12	0.48	-0.09	-0.02	-0.04
2	13	0.02	-0.01	0.03	-0.06	0.02	-0.12	-0.02	0.10	0.34
3	13	0.02	-0.01	-0.03	-0.06	0.02	0.12	-0.02	0.10	-0.34
4	13	0.01	-0.01	-0.04	0.02	0.12	-0.48	-0.09	-0.02	0.04
5	3	0.04	-0.13	0.00	-0.05	-0.44	0.00	-0.02	-0.14	0.00
6	3	0.00	-0.06	0.00	0.22	-0.43	0.00	0.66	-0.52	0.00
7	3	0.08	0.91	0.01	-0.03	-0.17	0.00	-0.01	-0.06	0.00
8	20	-0.14	-0.05	0.00	0.03	-0.02	0.00	0.04	0.02	0.00
9	6	0.09	-0.07	0.01	-0.02	0.02	0.00	-0.01	0.00	0.00
10	6	0.01	-0.02	0.00	0.01	0.01	0.00	0.00	0.00	0.00

11	6	0.09	-0.07	-0.01	-0.02	0.02	0.00	-0.01	0.00	0.00
12	1	0.16	-0.10	0.01	-0.02	0.02	0.00	-0.01	0.00	0.00
13	6	-0.01	0.00	0.00	0.02	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
14	1	0.06	-0.05	0.00	0.00	0.01	0.00	0.00	0.00	0.00
15	6	0.00	-0.02	0.00	0.01	0.01	0.00	0.00	0.00	0.00
16	1	0.15	-0.10	-0.02	-0.02	0.02	0.00	-0.01	0.00	0.00
17	1	0.05	-0.04	0.00	0.01	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
18	1	0.05	-0.05	0.00	0.00	0.01	0.00	0.00	0.00	0.00

	22	23	24
	A	A	A
Frequencies --	346.0871	368.2996	490.8813
Red. masses --	12.7502	8.5500	5.8490
Frc consts --	0.8998	0.6833	0.8304
IR Inten --	8.4713	33.6785	54.0937

Atom	AN	X	Y	Z	X	Y	Z	X	Y	Z
1	13	0.06	-0.01	0.19	-0.06	-0.13	0.12	-0.02	-0.01	0.01
2	13	0.01	-0.06	0.32	0.03	0.03	-0.03	0.00	0.01	0.00
3	13	0.01	-0.06	-0.32	0.03	0.03	0.03	0.00	0.01	0.00
4	13	0.06	-0.01	-0.19	-0.06	-0.13	-0.12	-0.02	-0.01	-0.01
5	3	-0.01	0.09	0.00	0.14	0.92	0.00	0.00	0.03	0.00
6	3	-0.63	0.55	0.00	0.14	-0.14	0.00	0.00	-0.01	0.00
7	3	0.00	-0.07	0.00	-0.04	0.06	0.00	0.85	-0.06	0.00
8	20	0.03	0.00	0.00	-0.02	-0.01	0.00	0.01	-0.02	0.00
9	6	-0.01	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	-0.01	-0.03	0.01
10	6	0.00	0.00	0.00	0.01	0.00	0.00	-0.12	0.03	-0.01
11	6	-0.01	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	-0.01	-0.03	-0.01
12	1	0.00	0.00	0.00	-0.01	0.01	0.00	-0.10	0.02	-0.01
13	6	0.00	0.00	0.00	0.02	-0.01	0.00	-0.09	0.03	0.00
14	1	-0.01	0.00	0.00	0.02	-0.01	0.00	-0.25	0.10	-0.01
15	6	0.00	0.00	0.00	0.01	0.00	0.00	-0.12	0.03	0.01
16	1	0.00	0.00	0.00	-0.01	0.01	0.00	-0.09	0.02	0.01
17	1	-0.02	0.01	0.00	0.04	-0.02	0.00	-0.24	0.13	0.00
18	1	-0.01	0.00	0.00	0.02	-0.01	0.00	-0.24	0.10	0.01

	25	26	27
	A	A	A
Frequencies --	610.5546	633.5234	708.8907
Red. masses --	5.5019	3.8983	1.2139
Frc consts --	1.2084	0.9218	0.3594
IR Inten --	0.0381	0.3396	1.0634

Atom	AN	X	Y	Z	X	Y	Z	X	Y	Z
1	13	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
2	13	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
3	13	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
4	13	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00

5	3	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
6	3	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
7	3	0.00	0.00	-0.06	0.06	0.02	0.00	0.00	0.00	0.00
8	20	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
9	6	0.36	-0.18	0.01	-0.08	0.05	-0.01	-0.03	-0.01	-0.02
10	6	-0.18	0.09	-0.01	0.21	-0.14	0.01	-0.07	0.06	0.00
11	6	-0.36	0.18	0.01	-0.08	0.05	0.01	0.03	0.01	-0.02
12	1	0.11	-0.08	0.01	-0.18	0.07	0.01	0.55	-0.29	0.06
13	6	0.00	0.00	0.03	-0.28	0.19	0.00	0.00	0.00	0.00
14	1	-0.46	0.26	-0.02	0.36	-0.23	0.01	0.29	-0.14	0.02
15	6	0.18	-0.09	-0.01	0.21	-0.14	-0.01	0.07	-0.06	0.01
16	1	-0.11	0.08	0.01	-0.18	0.07	-0.01	-0.54	0.28	0.06
17	1	0.00	0.00	0.03	-0.46	0.30	0.00	0.00	0.00	-0.01
18	1	0.46	-0.26	-0.01	0.36	-0.23	-0.01	-0.29	0.14	0.02

	28	29	30
	A	A	A
Frequencies --	734.7421	769.0251	831.0939
Red. masses --	1.2205	1.1659	1.3246
Frc consts --	0.3882	0.4063	0.5391
IR Inten --	180.0823	226.6365	1.9283

Atom	AN	X	Y	Z	X	Y	Z	X	Y	Z
1	13	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
2	13	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
3	13	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
4	13	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
5	3	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
6	3	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
7	3	-0.03	0.00	0.00	-0.03	0.03	0.00	0.00	0.00	0.00
8	20	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
9	6	0.08	-0.05	0.00	0.00	0.00	0.00	0.06	0.04	0.05
10	6	-0.01	0.01	0.01	0.05	-0.03	0.00	-0.06	0.05	-0.03
11	6	0.08	-0.05	0.00	0.00	0.00	0.00	-0.06	-0.04	0.05
12	1	-0.58	0.32	-0.14	-0.13	0.05	-0.01	-0.27	0.25	-0.06
13	6	-0.03	0.03	0.00	0.07	-0.05	0.00	0.00	0.00	-0.01
14	1	-0.02	0.00	0.00	-0.41	0.27	-0.01	0.44	-0.38	-0.06
15	6	-0.01	0.01	-0.01	0.05	-0.03	0.01	0.06	-0.05	-0.03
16	1	-0.59	0.32	0.14	-0.13	0.05	0.01	0.27	-0.25	-0.06
17	1	0.19	-0.11	0.00	-0.57	0.36	0.00	0.00	0.00	0.06
18	1	-0.03	0.00	0.00	-0.41	0.27	0.01	-0.44	0.38	-0.06

	31	32	33
	A	A	A
Frequencies --	858.5873	867.6730	883.3862
Red. masses --	4.1669	3.2887	1.2476
Frc consts --	1.8098	1.4588	0.5736

IR Inten --		2.7851			0.0080			0.0127		
Atom	AN	X	Y	Z	X	Y	Z	X	Y	Z
1	13	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
2	13	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
3	13	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
4	13	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
5	3	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
6	3	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
7	3	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.01	0.00	0.00	0.00
8	20	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
9	6	-0.09	-0.11	0.02	0.06	0.17	0.16	-0.01	0.02	-0.01
10	6	0.00	-0.02	0.27	0.12	0.10	-0.14	0.06	-0.04	-0.02
11	6	-0.09	-0.11	-0.02	-0.06	-0.16	0.16	-0.01	0.02	0.01
12	1	0.19	0.07	-0.33	0.39	0.03	0.18	0.09	-0.06	0.04
13	6	0.16	0.28	0.00	0.00	0.00	-0.10	-0.10	0.03	0.00
14	1	-0.30	-0.13	0.19	-0.32	0.07	-0.22	-0.41	0.29	-0.02
15	6	0.00	-0.03	-0.27	-0.11	-0.10	-0.14	0.06	-0.04	0.02
16	1	0.19	0.07	0.33	-0.39	-0.02	0.18	0.09	-0.06	-0.04
17	1	0.31	0.18	0.00	0.00	0.00	0.33	0.55	-0.39	0.00
18	1	-0.29	-0.13	-0.19	0.32	-0.07	-0.22	-0.41	0.29	0.02

	34	35	36
	A	A	A
Frequencies --	1022.1142	1036.5019	1078.0846
Red. masses --	1.4951	1.4209	1.2249
Frc consts --	0.9203	0.8994	0.8388
IR Inten --	33.6564	13.4457	0.3254

Atom	AN	X	Y	Z	X	Y	Z	X	Y	Z
1	13	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
2	13	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
3	13	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
4	13	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
5	3	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
6	3	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
7	3	-0.01	0.00	0.00	0.00	0.00	-0.01	0.00	0.00	0.00
8	20	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
9	6	0.02	0.03	0.11	0.04	0.08	0.00	0.01	0.00	0.03
10	6	-0.02	-0.04	-0.04	-0.02	-0.04	0.08	0.03	0.06	0.01
11	6	0.02	0.03	-0.11	-0.04	-0.08	0.00	-0.01	0.00	0.03
12	1	-0.14	-0.15	0.41	0.28	0.27	-0.34	-0.12	-0.05	0.15
13	6	0.06	0.09	0.00	0.00	0.00	-0.07	0.00	0.00	-0.09
14	1	-0.27	-0.40	-0.18	-0.16	-0.15	0.04	0.28	0.38	0.14
15	6	-0.02	-0.04	0.04	0.02	0.04	0.08	-0.03	-0.06	0.01
16	1	-0.14	-0.15	-0.41	-0.28	-0.27	-0.34	0.12	0.05	0.16
17	1	0.08	0.09	0.00	0.00	0.00	-0.58	0.00	0.00	-0.64

18	1	-0.27	-0.40	0.18	0.16	0.15	0.04	-0.28	-0.39	0.14

	37	38	39
	A	A	A
Frequencies --	1081.9653	1142.3006	1287.2142
Red. masses --	1.2498	5.5615	1.2796
Frc consts --	0.8620	4.2757	1.2492
IR Inten --	6.2319	11.3376	0.0948

Atom	AN	X	Y	Z	X	Y	Z	X	Y	Z
1	13	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
2	13	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
3	13	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
4	13	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
5	3	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
6	3	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
7	3	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
8	20	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
9	6	-0.02	-0.05	0.06	0.12	0.20	0.17	-0.02	-0.04	0.06
10	6	0.02	0.04	0.06	-0.04	-0.08	0.27	-0.03	-0.05	-0.02
11	6	-0.02	-0.05	-0.06	0.12	0.20	-0.17	0.02	0.04	0.06
12	1	-0.22	-0.26	0.40	0.17	0.32	0.05	0.15	0.22	-0.35
13	6	0.00	0.00	0.00	-0.16	-0.26	0.00	0.00	0.00	-0.07
14	1	0.21	0.37	0.18	-0.09	-0.06	0.30	0.21	0.36	0.13
15	6	0.02	0.04	-0.05	-0.04	-0.08	-0.27	0.03	0.05	-0.02
16	1	-0.22	-0.26	-0.40	0.17	0.32	-0.06	-0.15	-0.23	-0.35
17	1	0.02	-0.01	-0.01	-0.20	-0.27	0.00	0.00	0.00	0.44
18	1	0.21	0.36	-0.18	-0.09	-0.07	-0.30	-0.21	-0.36	0.13

	40	41	42
	A	A	A
Frequencies --	1374.2837	1388.3452	1467.4626
Red. masses --	4.4500	4.6739	2.5920
Frc consts --	4.9518	5.3079	3.2886
IR Inten --	0.1442	2.0989	0.7334

Atom	AN	X	Y	Z	X	Y	Z	X	Y	Z
1	13	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
2	13	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
3	13	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
4	13	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
5	3	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
6	3	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
7	3	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.01
8	20	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
9	6	0.06	0.17	-0.01	-0.09	-0.13	0.30	-0.07	-0.13	0.07
10	6	-0.12	-0.21	-0.15	0.12	0.16	-0.07	0.06	0.08	-0.11
11	6	-0.06	-0.17	-0.01	-0.09	-0.13	-0.30	0.07	0.12	0.09

12	1	0.11	-0.04	0.24	0.23	0.30	-0.38	0.09	0.14	-0.37
13	6	0.00	0.00	0.30	-0.08	-0.09	0.00	-0.01	-0.01	0.22
14	1	0.22	0.39	0.07	-0.06	-0.08	-0.18	-0.09	-0.12	-0.22
15	6	0.12	0.21	-0.15	0.12	0.16	0.07	-0.04	-0.06	-0.12
16	1	-0.11	0.04	0.24	0.23	0.30	0.37	-0.12	-0.18	-0.40
17	1	0.00	0.00	-0.36	-0.06	-0.11	0.00	-0.01	-0.01	-0.61
18	1	-0.23	-0.39	0.07	-0.06	-0.08	0.18	0.04	0.04	-0.19

	43	44	45
	A	A	A
Frequencies --	1467.7157	3126.6680	3145.2511
Red. masses --	2.5029	1.0867	1.0960
Frc consts --	3.1767	6.2595	6.3881
IR Inten --	3.4775	1.0362	12.1866

Atom	AN	X	Y	Z	X	Y	Z	X	Y	Z
1	13	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
2	13	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
3	13	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
4	13	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
5	3	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
6	3	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
7	3	0.01	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
8	20	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
9	6	-0.01	-0.02	-0.13	-0.02	-0.05	-0.03	-0.02	-0.05	-0.04
10	6	0.09	0.15	0.10	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.01
11	6	-0.02	-0.04	0.12	0.02	0.05	-0.04	-0.02	-0.05	0.04
12	1	-0.16	-0.25	0.19	0.19	0.52	0.42	0.19	0.52	0.43
13	6	-0.08	-0.12	-0.02	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
14	1	-0.28	-0.46	-0.11	0.01	0.01	-0.06	0.01	0.02	-0.09
15	6	0.10	0.16	-0.08	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	-0.01
16	1	-0.14	-0.22	-0.13	-0.20	-0.53	0.43	0.19	0.51	-0.42
17	1	-0.09	-0.16	0.05	0.00	0.00	0.00	0.00	-0.01	0.00
18	1	-0.29	-0.47	0.14	-0.01	-0.01	-0.06	0.01	0.02	0.09

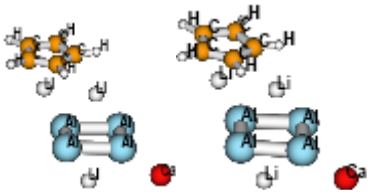
	46	47	48
	A	A	A
Frequencies --	3197.6915	3217.2031	3225.0633
Red. masses --	1.0894	1.0945	1.1018
Frc consts --	6.5631	6.6747	6.7522
IR Inten --	3.9880	5.8655	3.8420

Atom	AN	X	Y	Z	X	Y	Z	X	Y	Z
1	13	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
2	13	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
3	13	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
4	13	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
5	3	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00

6	3	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
7	3	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
8	20	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
9	6	0.00	0.00	0.00	0.00	-0.01	0.00	0.00	-0.01	0.00
10	6	0.01	0.01	-0.03	0.01	0.02	-0.06	0.01	0.01	-0.05
11	6	0.00	0.00	0.00	0.00	0.01	0.00	0.00	-0.01	0.00
12	1	0.01	0.04	0.03	0.02	0.05	0.03	0.02	0.06	0.04
13	6	-0.04	-0.06	0.00	0.00	0.00	0.00	0.02	0.04	0.00
14	1	-0.06	-0.09	0.32	-0.12	-0.18	0.68	-0.10	-0.15	0.57
15	6	0.01	0.01	0.03	-0.01	-0.02	-0.06	0.01	0.01	0.06
16	1	0.01	0.04	-0.03	-0.02	-0.05	0.03	0.02	0.06	-0.04
17	1	0.47	0.74	0.00	-0.01	-0.01	-0.01	-0.26	-0.40	0.00
18	1	-0.06	-0.09	-0.32	0.12	0.18	0.66	-0.10	-0.16	-0.60

$CpCaAl_4Li_3 \rightarrow CpLi + Al_4Li_2Ca$ **-25.8023749**

$CpCaAl_4Li_3 \rightarrow Cp^- + Al_4Li_3Ca^+$ **-141.8905656**



Charge = 0 Multiplicity = 1

Al,0,0.4495269304,1.7928215785,0.8092205327
Al,0,1.5752640367,-0.4813798254,1.4984527405
Al,0,1.5879352546,-1.1998638513,-1.0114095889
Al,0,0.4416393465,1.1049542756,-1.5950397933
Li,0,-2.287633495,1.3517323448,-0.2703162236
Li,0,-1.0318516733,-0.7998749015,0.0764999494
Li,0,2.9441925092,1.4076755563,-0.3824700913
Ca,0,4.1823550865,-1.7205135328,0.5228338875
C,0,-3.7489029252,0.3205711273,1.0647201703
C,0,-4.3500650728,1.3610369227,0.3265459216
C,0,-3.2874560516,-0.6612735847,0.1406991609
H,0,-3.6780146481,0.2635271357,2.1430872741
C,0,-4.2683126388,1.0316029952,-1.0545970368
H,0,-4.8062235251,2.2505556984,0.742460521
C,0,-3.6217511908,-0.2170063322,-1.171921589
H,0,-2.9889795872,-1.6756510249,0.4068829244
H,0,-4.6522690338,1.6243741161,-1.8750726591
H,0,-3.4435620703,-0.7556393445,-2.0937670595

State=1-A\HF=-1863.6105468

			A			A			A	
Frequencies --			-11.1707			31.0099			41.9286	
Red. masses --			3.8979			14.5581			10.0146	
Frc consts --			0.0003			0.0082			0.0104	
IR Inten --			0.0874			1.4697			0.4089	
Atom	AN	X	Y	Z	X	Y	Z	X	Y	Z
1	13	-0.01	-0.03	-0.06	-0.01	0.23	0.04	0.07	-0.16	0.07
2	13	-0.01	-0.04	0.02	0.17	0.09	0.08	0.10	-0.19	0.14
3	13	0.02	0.04	0.02	0.02	0.18	0.09	-0.13	0.07	0.15
4	13	0.02	0.04	-0.06	-0.03	0.24	0.03	-0.08	0.03	0.08
5	3	0.00	0.00	-0.06	-0.06	-0.05	-0.05	0.01	0.03	0.10
6	3	0.01	0.01	0.01	-0.11	0.07	0.29	0.07	0.00	0.45
7	3	0.00	0.00	-0.05	-0.08	0.03	0.00	0.01	-0.01	-0.13
8	20	0.01	0.00	0.06	0.18	-0.28	-0.10	-0.05	0.10	-0.16
9	6	0.15	0.12	-0.05	-0.18	-0.12	-0.06	-0.05	0.17	-0.14
10	6	0.08	0.07	0.17	-0.11	-0.18	-0.07	-0.03	0.13	-0.10
11	6	0.00	-0.01	-0.20	-0.20	-0.09	-0.06	0.05	0.03	-0.16
12	1	0.28	0.23	-0.11	-0.23	-0.09	-0.06	-0.14	0.29	-0.16
13	6	-0.11	-0.08	0.17	-0.09	-0.19	-0.07	0.08	-0.02	-0.10
14	1	0.17	0.14	0.32	-0.08	-0.22	-0.07	-0.09	0.21	-0.09
15	6	-0.17	-0.13	-0.06	-0.15	-0.14	-0.06	0.13	-0.09	-0.13
16	1	-0.01	0.00	-0.39	-0.27	-0.05	-0.07	0.06	0.03	-0.23
17	1	-0.21	-0.14	0.31	-0.04	-0.24	-0.07	0.13	-0.09	-0.07
18	1	-0.29	-0.24	-0.12	-0.14	-0.14	-0.06	0.24	-0.22	-0.14

			4			5			6	
			A			A			A	
Frequencies --			53.7037			79.4625			80.6445	
Red. masses --			5.6473			7.5719			12.1060	
Frc consts --			0.0096			0.0282			0.0464	
IR Inten --			0.3701			3.8832			0.2503	
Atom	AN	X	Y	Z	X	Y	Z	X	Y	Z
1	13	-0.06	0.05	0.02	-0.03	-0.02	-0.09	-0.12	0.07	-0.17
2	13	0.01	0.02	0.03	-0.02	-0.01	-0.16	0.10	-0.09	0.19
3	13	0.00	-0.07	0.02	0.05	0.00	-0.17	-0.03	0.04	0.20
4	13	0.05	-0.08	0.01	0.03	0.04	-0.09	0.18	-0.12	-0.18
5	3	-0.03	-0.03	-0.39	-0.04	0.00	0.22	-0.11	-0.01	0.11
6	3	0.06	-0.02	0.48	0.04	-0.03	0.59	-0.06	-0.12	-0.36
7	3	0.00	-0.02	0.14	0.00	-0.02	0.44	0.06	-0.02	0.67
8	20	-0.01	0.04	-0.05	0.01	0.01	0.07	0.03	0.05	-0.15
9	6	0.16	-0.14	-0.01	-0.13	0.10	0.03	-0.08	0.05	0.04
10	6	0.08	-0.06	-0.02	-0.10	0.07	0.03	-0.12	0.08	0.03
11	6	0.03	-0.01	-0.02	0.00	-0.02	0.03	-0.02	-0.01	0.04
12	1	0.29	-0.28	0.01	-0.23	0.19	0.02	-0.09	0.06	0.03
13	6	-0.12	0.13	-0.03	0.04	-0.05	0.04	-0.08	0.04	0.04

14	1	0.14	-0.12	-0.02	-0.17	0.14	0.02	-0.17	0.13	0.03
15	6	-0.14	0.15	-0.03	0.10	-0.11	0.04	-0.02	-0.01	0.04
16	1	0.05	-0.02	0.01	0.00	-0.02	0.00	0.03	-0.04	0.05
17	1	-0.22	0.23	-0.04	0.09	-0.10	0.04	-0.09	0.06	0.03
18	1	-0.24	0.26	-0.02	0.21	-0.21	0.04	0.01	-0.03	0.04

		7			8			9		
		A			A			A		
Frequencies --		92.0180			115.9279			116.4696		
Red. masses --		8.2016			13.3397			12.2574		
Frc consts --		0.0409			0.1056			0.0980		
IR Inten --		0.2094			1.2907			4.3836		
Atom	AN	X	Y	Z	X	Y	Z	X	Y	Z
1	13	0.10	-0.05	0.04	0.14	-0.28	0.16	0.18	0.02	-0.09
2	13	0.12	-0.06	-0.04	-0.03	-0.03	-0.13	-0.18	0.29	0.12
3	13	0.13	-0.09	-0.03	-0.15	0.31	-0.13	-0.09	0.09	0.07
4	13	0.04	-0.05	0.04	0.16	0.08	0.18	0.16	-0.20	-0.10
5	3	-0.28	-0.02	0.01	-0.08	-0.07	-0.16	-0.12	-0.16	0.09
6	3	-0.05	-0.17	-0.01	-0.08	-0.10	-0.23	-0.06	-0.25	0.27
7	3	0.13	0.00	-0.27	0.14	0.08	0.50	0.15	0.13	-0.37
8	20	0.12	0.10	0.04	-0.03	-0.11	-0.01	-0.08	-0.16	-0.01
9	6	-0.20	0.03	0.00	0.07	-0.04	-0.03	0.00	0.07	0.01
10	6	-0.30	0.13	-0.01	-0.03	0.04	-0.03	-0.10	0.15	0.01
11	6	-0.11	-0.03	0.01	0.02	-0.01	-0.04	0.12	-0.06	0.01
12	1	-0.18	0.01	0.00	0.16	-0.12	-0.02	-0.02	0.10	0.00
13	6	-0.29	0.13	-0.01	-0.13	0.13	-0.04	-0.04	0.09	0.01
14	1	-0.38	0.20	-0.02	-0.02	0.05	-0.03	-0.21	0.26	0.01
15	6	-0.18	0.04	0.00	-0.10	0.10	-0.04	0.10	-0.05	0.01
16	1	-0.02	-0.09	0.02	0.08	-0.04	-0.02	0.22	-0.12	-0.01
17	1	-0.35	0.20	-0.02	-0.22	0.22	-0.04	-0.09	0.13	0.01
18	1	-0.14	0.02	0.00	-0.16	0.16	-0.04	0.19	-0.12	0.01

		10			11			12		
		A			A			A		
Frequencies --		148.1622			158.1084			164.7012		
Red. masses --		6.4911			14.0205			21.1716		
Frc consts --		0.0840			0.2065			0.3384		
IR Inten --		3.6532			0.6751			0.9179		
Atom	AN	X	Y	Z	X	Y	Z	X	Y	Z
1	13	-0.13	0.15	0.04	0.01	-0.19	0.00	-0.28	0.09	0.12
2	13	0.10	-0.06	-0.05	-0.26	0.17	0.09	-0.12	-0.20	0.00
3	13	-0.07	0.11	-0.04	0.29	-0.14	0.09	0.38	0.13	-0.07
4	13	-0.06	0.02	0.02	-0.14	0.33	0.01	0.48	0.06	0.16
5	3	-0.13	-0.24	0.01	-0.11	-0.16	0.00	0.02	0.09	0.05
6	3	0.01	-0.31	-0.07	0.04	-0.18	-0.08	0.09	0.02	0.06
7	3	-0.14	-0.06	-0.09	-0.11	-0.06	0.22	-0.07	-0.15	-0.42

8	20	0.00	0.03	0.05	0.04	0.03	-0.16	-0.26	-0.04	-0.14
9	6	0.14	-0.08	0.00	0.09	-0.08	0.00	-0.10	0.05	0.03
10	6	-0.04	0.09	0.00	-0.07	0.06	-0.01	-0.05	0.00	0.03
11	6	0.25	-0.20	0.00	0.18	-0.17	0.00	-0.05	0.01	0.04
12	1	0.20	-0.12	0.00	0.15	-0.12	0.00	-0.16	0.10	0.03
13	6	-0.04	0.07	0.00	-0.07	0.06	-0.01	0.03	-0.06	0.04
14	1	-0.17	0.21	-0.01	-0.17	0.16	-0.01	-0.06	0.01	0.03
15	6	0.15	-0.11	0.00	0.08	-0.08	0.00	0.02	-0.05	0.04
16	1	0.42	-0.30	0.01	0.31	-0.25	0.01	-0.06	0.02	0.03
17	1	-0.16	0.18	0.00	-0.18	0.16	-0.01	0.08	-0.10	0.03
18	1	0.21	-0.16	0.00	0.12	-0.11	0.00	0.07	-0.09	0.04

	13	14	15
	A	A	A
Frequencies --	170.3780	200.9611	234.7769
Red. masses --	25.1836	7.8640	6.2263
Frc consts --	0.4307	0.1871	0.2022
IR Inten --	1.0380	13.6450	2.2141

Atom	AN	X	Y	Z	X	Y	Z	X	Y	Z
1	13	0.40	0.14	-0.13	-0.07	0.05	-0.01	0.01	0.00	-0.01
2	13	0.40	0.04	0.09	0.01	-0.10	0.01	-0.04	0.00	0.04
3	13	0.12	-0.15	-0.04	0.02	-0.10	-0.02	-0.06	0.02	-0.03
4	13	-0.06	0.19	-0.01	-0.05	0.06	0.02	0.01	-0.03	0.01
5	3	-0.02	0.03	-0.02	-0.02	-0.04	0.00	0.09	0.32	-0.01
6	3	0.12	-0.06	-0.13	-0.02	0.00	-0.01	0.46	0.50	-0.05
7	3	-0.07	-0.26	0.26	0.57	0.79	0.01	-0.01	0.01	0.00
8	20	-0.52	-0.08	0.08	-0.06	-0.05	-0.01	0.01	-0.01	0.00
9	6	0.00	-0.06	-0.02	0.02	-0.02	0.00	-0.02	-0.10	0.01
10	6	-0.06	0.00	-0.02	-0.01	0.01	0.00	-0.15	0.04	0.00
11	6	0.00	-0.05	-0.02	0.04	-0.03	0.00	0.13	-0.22	0.02
12	1	0.04	-0.09	-0.01	0.03	-0.02	0.00	0.02	-0.14	0.02
13	6	-0.09	0.03	-0.02	0.00	0.01	0.00	-0.14	0.03	0.00
14	1	-0.07	0.01	-0.02	-0.02	0.03	0.00	-0.24	0.11	-0.02
15	6	-0.07	0.01	-0.02	0.03	-0.02	0.00	0.00	-0.12	0.01
16	1	0.05	-0.08	0.00	0.06	-0.04	0.00	0.18	-0.25	0.03
17	1	-0.14	0.08	-0.03	-0.02	0.02	0.00	-0.22	0.09	0.00
18	1	-0.08	0.02	-0.02	0.04	-0.03	0.00	0.07	-0.17	0.01

	16	17	18
	A	A	A
Frequencies --	247.2668	259.5426	275.2633
Red. masses --	23.3028	16.0624	23.7983
Frc consts --	0.8394	0.6375	1.0624
IR Inten --	10.8409	46.0332	0.0047

Atom	AN	X	Y	Z	X	Y	Z	X	Y	Z
1	13	0.28	0.22	0.02	0.23	0.30	-0.02	-0.06	-0.04	-0.13

2	13	-0.26	-0.27	-0.02	-0.31	-0.28	0.06	0.02	0.01	0.63
3	13	0.39	0.38	0.03	-0.20	-0.16	-0.07	0.01	0.05	-0.63
4	13	-0.38	-0.34	-0.01	0.12	0.20	0.04	-0.06	-0.03	0.13
5	3	0.02	0.07	0.07	-0.04	-0.22	0.02	-0.03	0.04	0.02
6	3	0.09	-0.09	0.02	-0.19	0.14	0.00	0.05	-0.28	-0.02
7	3	-0.05	0.11	0.25	0.43	-0.49	0.03	-0.15	0.08	0.01
8	20	-0.02	-0.01	-0.04	0.07	0.02	0.00	0.08	0.02	0.00
9	6	0.04	-0.04	-0.02	0.02	0.00	0.00	-0.01	0.02	-0.01
10	6	0.03	-0.04	-0.02	0.00	0.03	0.00	0.04	-0.04	0.00
11	6	-0.02	0.01	-0.02	0.01	0.01	-0.01	-0.05	0.06	-0.01
12	1	0.08	-0.09	-0.01	0.03	0.00	0.00	-0.01	0.02	0.00
13	6	-0.03	0.02	-0.02	-0.01	0.03	0.00	0.04	-0.03	0.00
14	1	0.07	-0.08	-0.02	-0.02	0.05	0.00	0.09	-0.08	0.00
15	6	-0.07	0.05	-0.02	0.01	0.01	-0.01	-0.02	0.03	0.00
16	1	-0.01	0.00	-0.01	-0.01	0.02	0.00	-0.04	0.05	0.00
17	1	-0.04	0.03	-0.03	-0.04	0.06	-0.01	0.07	-0.06	0.00
18	1	-0.12	0.10	-0.02	-0.01	0.02	-0.01	-0.05	0.05	0.00

	19	20	21
	A	A	A
Frequencies --	322.0975	329.4754	333.9445
Red. masses --	7.7737	7.3438	6.3623
Frc consts --	0.4752	0.4697	0.4180
IR Inten --	32.3032	9.2229	6.5642

Atom	AN	X	Y	Z	X	Y	Z	X	Y	Z
1	13	-0.12	-0.01	-0.06	0.06	0.05	0.06	-0.06	-0.03	-0.05
2	13	0.01	0.09	-0.02	-0.06	-0.06	-0.03	0.04	0.04	0.01
3	13	-0.01	0.07	0.03	-0.08	-0.07	0.02	0.04	0.02	-0.01
4	13	-0.10	0.00	0.06	0.09	0.07	-0.06	-0.01	-0.03	0.04
5	3	0.05	0.37	0.06	0.06	0.39	0.44	-0.03	-0.23	0.65
6	3	0.23	-0.36	0.00	0.23	-0.45	0.03	-0.16	0.32	0.06
7	3	0.64	-0.43	-0.03	-0.30	0.24	-0.01	0.11	-0.10	-0.03
8	20	-0.01	0.00	0.00	0.02	0.00	0.00	-0.01	0.00	0.00
9	6	-0.01	-0.01	-0.01	0.06	-0.08	-0.04	0.15	-0.12	-0.06
10	6	0.02	-0.05	-0.01	0.05	-0.08	-0.05	0.05	-0.03	-0.06
11	6	-0.02	0.00	-0.01	-0.01	0.00	-0.05	0.03	-0.02	-0.08
12	1	0.00	-0.03	0.00	0.13	-0.14	-0.03	0.24	-0.19	-0.05
13	6	0.00	-0.03	-0.01	-0.05	0.02	-0.05	-0.07	0.09	-0.07
14	1	0.08	-0.10	-0.01	0.13	-0.16	-0.04	0.07	-0.05	-0.06
15	6	-0.04	0.02	-0.01	-0.13	0.09	-0.05	-0.10	0.10	-0.07
16	1	0.03	-0.03	0.00	0.04	-0.04	-0.04	-0.02	0.01	-0.06
17	1	0.04	-0.06	0.00	-0.04	0.01	-0.05	-0.16	0.17	-0.08
18	1	-0.05	0.02	-0.01	-0.19	0.14	-0.05	-0.19	0.17	-0.08

	22	23	24
	A	A	A

Frequencies --		337.2026			398.2630			511.3056		
Red. masses --		23.0719			6.7979			5.5730		
Frc consts --		1.5457			0.6353			0.8584		
IR Inten --		13.8906			146.5738			111.2705		
Atom	AN	X	Y	Z	X	Y	Z	X	Y	Z
1	13	-0.04	-0.03	0.61	-0.01	0.01	-0.01	-0.02	0.00	-0.01
2	13	0.04	0.02	0.14	-0.02	0.01	-0.02	0.00	0.00	0.00
3	13	0.04	0.03	-0.14	-0.03	0.01	0.02	0.00	0.00	0.00
4	13	-0.04	0.02	-0.61	0.00	0.01	0.01	-0.01	0.00	0.01
5	3	0.01	-0.09	0.06	-0.17	-0.54	0.04	0.79	-0.23	0.00
6	3	0.04	0.09	-0.01	0.72	-0.03	-0.06	0.00	-0.12	0.01
7	3	0.35	-0.21	0.00	0.00	0.02	0.00	0.00	0.00	0.00
8	20	-0.05	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
9	6	0.00	0.00	-0.01	-0.06	0.07	-0.01	-0.09	0.04	0.00
10	6	-0.01	0.00	-0.01	0.03	-0.03	0.00	-0.08	0.05	-0.01
11	6	-0.01	0.01	-0.01	-0.11	0.13	0.00	0.03	-0.04	0.01
12	1	0.00	0.00	-0.01	-0.12	0.11	-0.01	-0.20	0.13	-0.01
13	6	-0.01	0.01	0.00	0.04	-0.03	0.00	-0.08	0.05	0.00
14	1	-0.01	0.01	-0.01	0.03	-0.03	0.01	-0.22	0.17	-0.02
15	6	-0.02	0.01	0.00	-0.06	0.08	0.01	-0.08	0.03	0.00
16	1	-0.02	0.02	0.00	-0.11	0.12	0.00	-0.12	0.04	-0.01
17	1	-0.03	0.02	-0.01	0.04	-0.02	-0.01	-0.22	0.17	0.00
18	1	-0.04	0.03	0.00	-0.12	0.13	0.01	-0.18	0.11	0.00

			25			26			27	
			A			A			A	
Frequencies --		626.0967			634.0805			749.4753		
Red. masses --		5.3494			3.9801			1.2408		
Frc consts --		1.2355			0.9428			0.4106		
IR Inten --		36.0533			0.3299			15.2861		
Atom	AN	X	Y	Z	X	Y	Z	X	Y	Z
1	13	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
2	13	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
3	13	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
4	13	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
5	3	0.11	0.01	0.01	0.01	0.00	-0.02	-0.01	-0.01	0.00
6	3	0.05	-0.02	0.00	0.00	0.00	0.01	0.01	-0.02	-0.01
7	3	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
8	20	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
9	6	0.20	-0.17	0.02	0.15	-0.14	0.02	0.05	-0.07	0.00
10	6	-0.08	0.04	-0.02	-0.23	0.23	-0.02	-0.02	0.01	0.01
11	6	-0.34	0.26	-0.02	-0.03	0.02	-0.01	0.06	-0.01	0.00
12	1	0.35	-0.31	0.03	0.25	-0.23	0.03	-0.28	0.23	-0.03
13	6	-0.12	0.09	0.01	0.21	-0.22	0.01	-0.06	0.07	-0.01
14	1	-0.14	0.11	-0.03	-0.38	0.38	-0.03	0.06	-0.05	0.02

15	6	0.24	-0.20	0.00	-0.12	0.11	0.00	-0.02	0.01	0.00
16	1	-0.10	0.11	-0.02	-0.03	0.02	0.06	-0.58	0.37	0.00
17	1	-0.24	0.20	0.01	0.35	-0.35	0.02	0.37	-0.34	0.01
18	1	0.36	-0.31	0.00	-0.20	0.18	0.00	0.23	-0.25	0.00

	28	29	30
	A	A	A
Frequencies --	752.5141	774.7542	850.1318
Red. masses --	1.2536	1.1484	1.5651
Frc consts --	0.4183	0.4061	0.6664
IR Inten --	14.6543	402.7443	3.6996

Atom	AN	X	Y	Z	X	Y	Z	X	Y	Z
1	13	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
2	13	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
3	13	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
4	13	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
5	3	-0.01	0.00	0.00	-0.04	0.04	0.00	0.00	0.00	0.00
6	3	0.01	-0.01	0.00	0.00	-0.01	0.00	0.01	0.00	0.00
7	3	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
8	20	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
9	6	-0.04	0.03	0.00	0.04	-0.04	-0.01	0.05	-0.03	0.09
10	6	-0.06	0.06	-0.01	0.04	-0.03	0.00	0.00	0.05	0.00
11	6	0.05	-0.01	0.00	0.02	0.00	0.00	-0.11	-0.09	0.00
12	1	0.32	-0.34	0.05	-0.30	0.25	-0.04	-0.30	0.48	0.00
13	6	0.00	-0.01	-0.01	0.04	-0.04	0.00	0.00	0.06	0.00
14	1	0.37	-0.34	0.02	-0.35	0.34	-0.01	0.16	-0.22	-0.11
15	6	0.06	-0.07	0.02	0.03	-0.04	0.02	0.06	-0.03	-0.09
16	1	-0.42	0.27	-0.11	-0.36	0.22	-0.03	0.16	-0.24	0.03
17	1	-0.04	0.04	-0.02	-0.36	0.35	-0.03	0.18	-0.24	0.14
18	1	-0.36	0.33	0.01	-0.30	0.26	0.01	-0.32	0.49	-0.05

	31	32	33
	A	A	A
Frequencies --	860.4979	872.5596	883.1802
Red. masses --	4.0799	2.2826	1.2351
Frc consts --	1.7799	1.0239	0.5676
IR Inten --	0.3030	0.0490	0.1589

Atom	AN	X	Y	Z	X	Y	Z	X	Y	Z
1	13	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
2	13	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
3	13	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
4	13	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
5	3	0.00	0.00	0.00	-0.01	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
6	3	0.00	0.00	0.00	0.02	-0.02	0.00	0.00	0.00	0.00
7	3	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
8	20	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00

9	6	0.10	0.09	0.17	-0.05	0.03	0.16	-0.03	0.05	0.01
10	6	0.16	0.16	-0.20	0.08	0.04	0.04	0.08	-0.05	-0.01
11	6	-0.02	-0.01	0.11	-0.09	-0.15	-0.01	0.00	0.00	0.02
12	1	-0.28	-0.03	0.27	0.37	-0.18	0.16	0.27	-0.26	0.05
13	6	-0.13	-0.16	-0.21	0.10	0.05	-0.02	-0.07	0.05	-0.02
14	1	0.29	0.13	-0.11	-0.22	0.09	-0.21	-0.43	0.44	-0.04
15	6	-0.11	-0.08	0.13	-0.03	0.04	-0.17	0.02	-0.04	0.01
16	1	0.02	-0.03	-0.42	-0.49	0.10	-0.03	-0.01	0.01	-0.02
17	1	-0.30	-0.14	-0.08	-0.24	0.16	0.18	0.41	-0.42	0.02
18	1	0.30	0.06	0.26	0.39	-0.22	-0.14	-0.24	0.24	0.02

	34	35	36
	A	A	A
Frequencies --	1017.3285	1023.1161	1072.8781
Red. masses --	1.4075	1.4808	1.2522
Frc consts --	0.8582	0.9133	0.8492
IR Inten --	10.2716	38.0046	4.6441

Atom	AN	X	Y	Z	X	Y	Z	X	Y	Z
1	13	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
2	13	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
3	13	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
4	13	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
5	3	0.00	0.00	-0.01	0.01	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
6	3	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
7	3	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
8	20	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
9	6	0.01	0.01	0.07	0.03	0.04	-0.07	0.05	0.06	0.03
10	6	-0.06	-0.06	0.02	-0.02	-0.02	0.08	-0.01	-0.01	-0.03
11	6	-0.01	-0.01	-0.09	-0.07	-0.09	0.01	0.00	0.00	0.05
12	1	0.07	0.10	0.04	0.39	0.33	-0.21	0.35	0.36	-0.10
13	6	0.05	0.05	0.00	-0.03	-0.04	-0.09	0.02	0.01	-0.04
14	1	-0.19	-0.17	-0.20	0.11	0.15	0.39	-0.10	-0.16	-0.27
15	6	-0.01	0.01	0.09	0.03	0.04	0.04	-0.06	-0.07	0.02
16	1	0.04	-0.04	-0.80	-0.16	-0.05	0.12	-0.02	0.01	0.41
17	1	0.24	0.18	-0.30	0.06	0.08	-0.30	0.15	0.17	-0.32
18	1	0.04	0.01	0.11	0.39	0.36	0.20	-0.36	-0.38	-0.12

	37	38	39
	A	A	A
Frequencies --	1076.3964	1139.4407	1283.7402
Red. masses --	1.2607	5.3098	1.2877
Frc consts --	0.8606	4.0617	1.2503
IR Inten --	0.4370	12.8247	0.0042

Atom	AN	X	Y	Z	X	Y	Z	X	Y	Z
1	13	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
2	13	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00

3	13	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
4	13	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
5	3	0.00	0.00	0.00	0.01	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
6	3	0.00	0.00	0.00	-0.01	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
7	3	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
8	20	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
9	6	-0.02	-0.04	0.05	0.05	0.06	0.25	-0.04	-0.05	0.01
10	6	0.02	0.03	0.08	-0.17	-0.17	0.17	-0.02	-0.03	-0.06
11	6	-0.02	0.00	0.00	0.20	0.22	0.00	0.00	0.00	0.09
12	1	-0.29	-0.23	0.15	0.13	0.23	0.23	0.30	0.32	-0.15
13	6	0.03	0.03	-0.07	-0.15	-0.18	-0.17	0.03	0.03	-0.05
14	1	0.22	0.26	0.50	-0.26	-0.24	0.06	0.16	0.20	0.35
15	6	-0.01	-0.03	-0.05	0.07	0.05	-0.25	0.04	0.05	0.01
16	1	0.07	-0.04	-0.01	0.22	0.24	-0.01	0.02	-0.01	-0.41
17	1	0.25	0.22	-0.46	-0.25	-0.24	-0.07	-0.18	-0.18	0.35
18	1	-0.25	-0.20	-0.15	0.14	0.22	-0.23	-0.29	-0.32	-0.16

	40	41	42
	A	A	A
Frequencies --	1376.5700	1382.2622	1462.4903
Red. masses --	4.4459	4.7959	2.4158
Frc consts --	4.9637	5.3989	3.0443
IR Inten --	3.7808	0.0399	8.3068

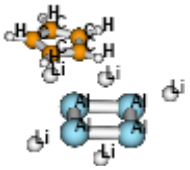
Atom	AN	X	Y	Z	X	Y	Z	X	Y	Z
1	13	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
2	13	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
3	13	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
4	13	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
5	3	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.01	0.00	0.00
6	3	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
7	3	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
8	20	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
9	6	-0.14	-0.18	-0.06	0.16	0.14	-0.19	0.11	0.11	-0.09
10	6	0.10	0.13	0.26	-0.10	-0.08	0.03	-0.02	-0.01	0.16
11	6	0.05	0.12	-0.01	-0.01	0.01	0.37	-0.08	-0.09	0.00
12	1	0.16	0.20	-0.23	-0.26	-0.27	-0.02	-0.36	-0.38	0.11
13	6	0.11	0.11	-0.26	0.11	0.09	0.02	-0.01	-0.02	-0.16
14	1	-0.17	-0.21	-0.34	-0.09	-0.10	0.03	-0.20	-0.23	-0.20
15	6	-0.13	-0.17	0.07	-0.16	-0.16	-0.19	0.10	0.12	0.09
16	1	0.24	0.01	0.03	0.04	-0.01	-0.57	-0.11	-0.10	-0.01
17	1	-0.21	-0.21	0.35	0.07	0.10	0.05	-0.21	-0.22	0.19
18	1	0.12	0.20	0.23	0.27	0.29	0.00	-0.35	-0.39	-0.13

	43	44	45
	A	A	A
Frequencies --	1468.4391	3114.7227	3194.3878

Red. masses --		2.7069			1.0903			1.0876		
Frc consts --		3.4390			6.2322			6.5390		
IR Inten --		0.3362			5.7741			0.8483		
Atom	AN	X	Y	Z	X	Y	Z	X	Y	Z
1	13	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
2	13	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
3	13	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
4	13	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
5	3	0.00	0.00	0.01	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
6	3	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
7	3	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
8	20	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
9	6	-0.08	-0.10	-0.09	0.00	0.00	0.00	0.00	-0.01	-0.02
10	6	0.13	0.14	0.09	0.00	0.00	0.00	-0.03	-0.03	0.03
11	6	0.00	0.00	0.15	-0.04	-0.07	0.00	0.00	0.00	0.00
12	1	0.11	0.11	-0.21	-0.02	-0.03	-0.08	0.04	0.08	0.28
13	6	-0.13	-0.13	0.08	0.00	0.00	0.00	0.03	0.03	0.03
14	1	-0.12	-0.14	-0.47	0.00	0.00	0.00	0.38	0.37	-0.38
15	6	0.08	0.09	-0.09	0.00	0.00	0.00	0.01	0.01	-0.03
16	1	0.02	-0.01	-0.45	0.50	0.85	0.01	0.00	0.00	0.00
17	1	0.16	0.12	-0.46	0.00	0.00	0.00	-0.33	-0.36	-0.36
18	1	-0.09	-0.11	-0.20	-0.02	-0.02	0.09	-0.07	-0.08	0.32

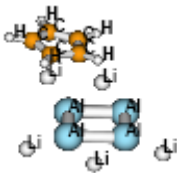
		46			47			48		
		A			A			A		
Frequencies --		3204.2620			3213.9404			3222.6578		
Red. masses --		1.0922			1.0961			1.1034		
Frc consts --		6.6072			6.6705			6.7514		
IR Inten --		8.6474			8.8509			6.5953		
Atom	AN	X	Y	Z	X	Y	Z	X	Y	Z
1	13	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
2	13	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
3	13	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
4	13	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
5	3	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
6	3	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
7	3	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
8	20	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
9	6	0.00	-0.01	-0.04	-0.01	-0.02	-0.06	-0.01	-0.01	-0.05
10	6	-0.03	-0.03	0.03	0.01	0.01	-0.01	0.03	0.03	-0.03
11	6	-0.01	-0.01	0.00	0.00	0.00	0.00	-0.01	-0.01	0.00
12	1	0.06	0.11	0.40	0.10	0.18	0.63	0.08	0.14	0.51
13	6	-0.02	-0.02	-0.02	-0.02	-0.02	-0.02	0.03	0.03	0.03
14	1	0.30	0.29	-0.30	-0.11	-0.11	0.11	-0.30	-0.30	0.30
15	6	-0.01	-0.01	0.05	0.01	0.01	-0.05	-0.01	-0.01	0.04

16	1	0.05	0.08	0.00	0.00	0.00	-0.01	0.04	0.07	0.00
17	1	0.22	0.24	0.25	0.24	0.26	0.26	-0.28	-0.31	-0.31
18	1	0.13	0.14	-0.58	-0.12	-0.13	0.55	0.09	0.09	-0.38



Al	1.142247	.992719	-1.314074
Al	2.468021	-1.286827	-1.141470
Al	2.418814	-1.131726	1.394041
Al	1.094725	1.150518	1.237689
Li	-.177408	-1.282025	.079897
Li	1.440968	3.354675	-.173661
Li	3.611389	.998097	.016370
C	-3.718733	.644701	-.103216
C	-3.201369	-.088464	-1.197875
C	-3.247091	.048678	1.090903
H	-4.370115	1.507351	-.167862
C	-2.424533	-1.156584	-.682158
H	-3.385893	.108248	-2.245770
C	-2.452871	-1.071463	.737758
H	-3.472570	.368566	2.099697
H	-1.986565	-1.952125	-1.279610
H	-2.040290	-1.788566	1.442829
Li	-1.582715	.889706	-.074312
Li	2.045046	-3.523339	.260598

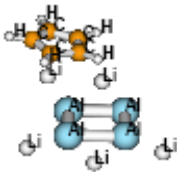
State=1-A\HF=-1201.09638



Al	.977770	1.244616	-1.294003
Al	2.322458	-1.036560	-1.228213
Al	2.306278	-.977071	1.314746
Al	.958128	1.302160	1.256508
Li	-.197953	-1.210674	.036953
Li	1.219608	3.605506	-.069147
Li	3.471784	1.281318	.000856
C	-3.821059	.502317	-.066122
C	-3.266165	-.186681	-1.170655
C	-3.319976	-.086512	1.119968

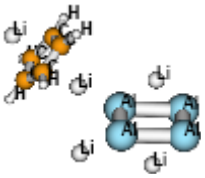
H	-4.517617	1.329783	-.119181
C	-2.435598	-1.220964	-.669584
H	-3.461022	.014463	-2.215809
C	-2.469284	-1.158950	.751866
H	-3.563824	.205457	2.132976
H	-1.965650	-1.989741	-1.278144
H	-2.022079	-1.864852	1.446594
Li	-1.705433	.866610	-.027891
Li	4.544457	-1.770126	.077502

State=1-A\HF=-1201.0961661



Al	-2.261617	1.272449	-1.054576
Al	-.873655	1.589666	1.179921
Al	-.990610	-.923022	1.603881
Al	-2.378227	-1.233044	-.631224
Li	-4.567515	.002470	-1.561861
Li	-3.433230	.458033	1.425184
Li	.184222	-.139381	-1.071301
Li	1.730621	.141762	.958789
C	3.243052	-1.236270	.146771
C	2.402839	-.945402	-.957610
C	3.837038	-.025119	.575803
H	3.418834	-2.219322	.563363
C	2.469301	.455324	-1.200132
H	1.899602	-1.690329	-1.568646
C	3.350394	1.021182	-.244144
H	4.549079	.081249	1.384799
H	2.026709	.994954	-2.033444
H	3.622024	2.066554	-.178607
Li	-1.138355	.731410	3.694241

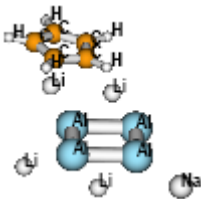
State=1-A\HF=-1201.0961715



Al	1.145460	1.286430	.679002
Al	3.506739	1.246699	-.663700

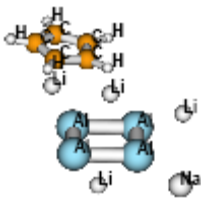
Al	3.514367	-1.235075	-.675502
Al	1.151015	-1.297686	.665038
Li	1.407215	.003665	-1.867675
Li	.452538	-.020475	2.912237
Li	3.447640	-.008069	1.786999
C	-3.566734	.324842	.933856
C	-3.363864	1.211083	-.160685
C	-3.493827	-1.008964	.441198
H	-3.725599	.615570	1.963654
C	-3.168188	.424894	-1.329863
H	-3.329482	2.290519	-.107044
C	-3.247284	-.946650	-.957968
H	-3.578136	-1.912130	1.030115
H	-2.968367	.804923	-2.322656
H	-3.111734	-1.794377	-1.615724
Li	-1.335060	-.010276	.163341
Li	-5.097622	.021648	-.518389

State=1-A\HF=-1201.0856184



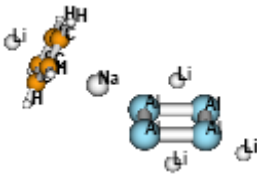
Al	-.655167	-1.410380	-1.375781
Al	-1.984403	-1.146846	.909778
Al	-1.942889	1.386458	.652496
Al	-.615711	1.141423	-1.635890
Li	2.028262	-.132498	-1.074557
Li	.525483	.100007	.993933
Li	-3.097108	-.106188	-1.592177
Na	-4.683936	.228132	1.406679
C	3.593871	-1.195886	.050536
C	4.144367	-.139200	-.713352
C	2.765568	-.628016	1.051479
H	3.789603	-2.251898	-.081101
C	3.641970	1.082732	-.204767
H	4.838141	-.246446	-1.537908
C	2.795593	.786051	.893054
H	2.297875	-1.184105	1.860084
H	3.881009	2.074211	-.566259
H	2.350783	1.526039	1.553136
Li	-.763663	-.368611	-3.823282

State=1-A\HF=-1355.8770687



13	0	-0.405018	1.657792	-1.241027
13	0	-1.990651	-0.479088	-1.311203
13	0	-1.987933	-0.483262	1.312557
13	0	-0.405739	1.654626	1.245053
3	0	2.257989	0.889336	0.004283
3	0	0.517765	-0.900650	-0.011197
3	0	-2.776435	2.053881	-0.001283
11	0	-4.782368	-0.748328	-0.000632
6	0	3.703678	-0.306652	-1.151318
6	0	4.313781	0.274005	-0.013795
6	0	2.749571	-1.254638	-0.701249
1	0	3.940083	-0.091773	-2.185184
6	0	3.723689	-0.292655	1.141794
1	0	5.101231	1.017276	-0.025388
6	0	2.762104	-1.245944	0.720861
1	0	2.199746	-1.937996	-1.343308
1	0	3.978122	-0.064650	2.168590
1	0	2.218604	-1.916616	1.380804
3	0	-2.028400	-2.832634	-0.003893

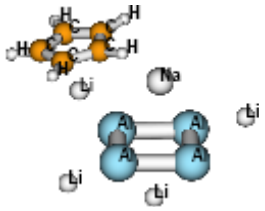
State=1-A\HF=-1355.8723945



Al	-3.487702	1.051858	1.307475
Al	-1.238202	-.442949	1.288883
Al	-1.317479	-.548363	-1.241981
Al	-3.570614	.943311	-1.248839
Li	-5.814694	.648396	.118253
Li	-3.511903	-1.547058	.132771
Li	-1.302353	2.038692	-.088875
Na	1.497252	-.083666	-.086950
C	4.083644	-.145203	-1.251521
C	4.212002	.911609	-.309134
C	3.929201	-1.360652	-.528306
H	4.087556	-.041963	-2.328841
C	4.134499	.351770	.995252

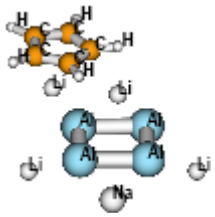
H	4.334041	1.961061	-.544716
C	3.960346	-1.053283	.860384
H	3.786473	-2.343025	-.959677
H	4.183484	.899029	1.927394
H	3.850458	-1.761824	1.671015
Li	5.797803	-.478780	-.038576

State=1-A\HF=-1355.8608798



Al	0.963139	1.336551	-1.266451
Al	2.727242	-0.633188	-1.295436
Al	2.735892	-0.656631	1.263503
Al	0.972105	1.313067	1.282728
Li	0.872072	3.639441	0.029792
Li	3.413984	1.761090	0.003257
Li	-1.712607	0.809942	0.011802
Na	-0.028513	-1.624699	-0.014808
C	-2.706910	-1.106052	0.713008
C	-3.414597	0.037257	1.160255
C	-2.712884	-1.095335	-0.709771
H	-2.333996	-1.896140	1.358374
C	-3.864012	0.746764	0.020393
H	-3.597823	0.302898	2.193224
C	-3.424307	0.054512	-1.133782
H	-2.345902	-1.875776	-1.370112
H	-4.453121	1.655376	0.029714
H	-3.616260	0.335641	-2.161053
Li	3.166148	-2.928716	-0.037995

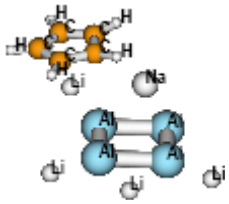
HF=-1355.8671703



Al	0.765891	1.100510	1.277058
Al	2.007295	-1.248547	1.280724
Al	2.020024	-1.254976	-1.273872
Al	0.762886	1.088044	-1.276934

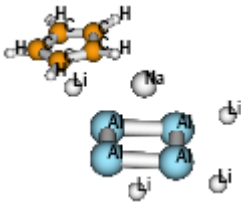
Li	4.099658	-2.350081	0.013712
Li	-1.942051	0.830529	0.006950
Li	-0.482482	-1.291909	-0.020700
Na	3.652083	1.147750	-0.003376
C	-3.232152	-0.599531	1.153013
C	-3.958666	0.523349	0.705341
C	-2.765126	-1.303053	0.006102
H	-3.082030	-0.891906	2.184149
C	-3.951027	0.519087	-0.717086
H	-4.450989	1.251740	1.337443
C	-3.220455	-0.606971	-1.150116
H	-2.364562	-2.316788	0.012478
H	-4.436279	1.243673	-1.358916
H	-3.061092	-0.906082	-2.177987
Li	0.910656	3.441937	-0.011370

State=1-A\HF=-1355.8682712



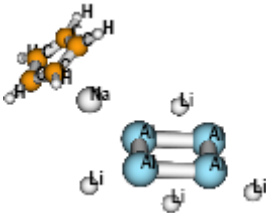
Al	2.580536	-.540704	1.368822
Al	.938097	1.528118	1.159906
Al	.978617	1.308665	-1.375446
Al	2.621279	-.760700	-1.173661
Li	-1.698949	.846265	-.100184
Li	4.895975	-1.141049	.176843
Li	3.439210	1.744139	-.096076
Na	-.079198	-1.588759	.135751
C	-2.744332	-.990836	.756665
C	-3.437353	.202192	1.078751
C	-2.721048	-1.114093	-.661120
H	-2.406364	-1.725945	1.481594
C	-3.849149	.808934	-.132415
H	-3.636452	.567167	2.077875
C	-3.399819	.003513	-1.206649
H	-2.362019	-1.962434	-1.236944
H	-4.420775	1.724367	-.221396
H	-3.565226	.190052	-2.259708
Li	.971160	3.766850	-.310806

State=1-A\HF=-1355.867975



Al	2.698357	-.635651	1.404242
Al	.964215	1.389057	1.140552
Al	1.002165	1.178743	-1.329290
Al	2.740374	-.856117	-1.191699
Li	-1.780023	.815771	-.098602
Li	5.072195	-.976492	.163133
Li	3.377744	1.699441	-.094621
Na	-.190129	-1.463065	.118269
C	-2.893496	-.990686	.752967
C	-3.540757	.228301	1.075029
C	-2.870784	-1.112856	-.663971
H	-2.578704	-1.737601	1.475849
C	-3.926061	.852037	-.136434
H	-3.730150	.599404	2.073855
C	-3.504130	.031271	-1.210378
H	-2.535825	-1.971887	-1.237961
H	-4.461569	1.788953	-.225808
H	-3.660663	.225418	-2.263487
Li	2.886887	-3.131877	.310996

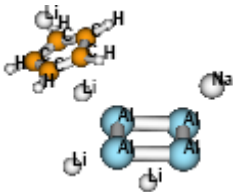
State=1-A\HF=-1355.8609858



Al	-3.320720	1.065145	1.329148
Al	-1.397756	-.774575	1.280591
Al	-1.432088	-.737626	-1.270040
Al	-3.354661	1.101555	-1.213973
Li	-5.706122	1.193611	.089811
Li	-3.849160	-1.411301	.028236
Li	-.977268	1.774887	.039391
Na	1.650675	-.506622	-.029437
C	3.896019	-.182394	-1.247625
C	3.793101	.897319	-.333789
C	4.021997	-1.379834	-.498249
H	3.926835	-.102132	-2.328214

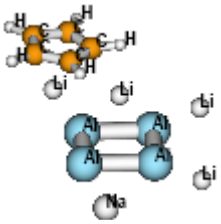
C	3.857710	.367280	.981398
H	3.745754	1.948831	-.595074
C	3.998273	-1.039523	.880448
H	4.178288	-2.372212	-.906727
H	3.855978	.941283	1.901151
H	4.124392	-1.726878	1.709418
Li	-1.054453	-3.114081	-.037388

State=1-A\HF=-1355.8356396



Al	.862874	-1.332806	1.284766
Al	3.008459	.235717	1.277347
Al	3.029704	.226331	-1.263538
Al	.879115	-1.335565	-1.290393
Li	.284473	-3.540408	-.005263
Li	3.159296	-2.235901	.012888
Li	-1.555586	-.585804	-.021124
Na	2.361515	2.942111	-.007768
C	-2.873527	1.304161	-.536198
C	-3.464357	.192486	-1.198982
C	-2.975033	1.086285	.866546
H	-2.396229	2.147763	-1.016020
C	-3.934720	-.711235	-.204922
H	-3.516308	.045267	-2.269065
C	-3.630601	-.159616	1.071437
H	-2.586817	1.734281	1.640609
H	-4.412298	-1.664392	-.388088
H	-3.830642	-.620561	2.029090
Li	-4.923822	1.163490	.011918

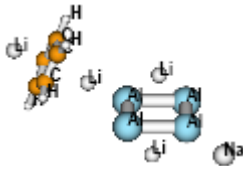
|State=1-A|HF=-1355.8624452



Al	-.805894	-1.113472	1.257008
Al	-2.063755	1.244082	1.301554
Al	-2.066981	1.238526	-1.299332

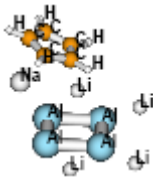
Al	-.809795	-1.119339	-1.247183
Li	-4.257025	2.133250	.001824
Li	1.954269	-.897541	.001696
Li	.496269	1.176982	-.003813
Na	-3.503778	-1.577072	.010294
C	3.248231	.531883	1.146915
C	3.969822	-.599026	.709673
C	2.792440	1.231324	-.006371
H	3.093903	.830229	2.175807
C	3.968410	-.603887	-.712231
H	4.452950	-1.327806	1.348316
C	3.245939	.524012	-1.155758
H	2.383717	2.241595	-.009417
H	4.450268	-1.337024	-1.346836
H	3.089556	.815322	-2.186354
Li	-1.468312	3.563757	-.004539

State=1-A\HF=-1355.8652621



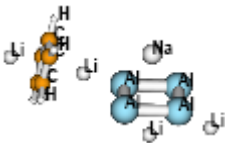
Al	-.497354	-1.254062	-.545258
Al	-2.933286	-1.282060	.659324
Al	-2.951685	1.277581	.659738
Al	-.515882	1.281284	-.542297
Li	1.880388	.034307	.074970
Li	-.875688	.015125	1.941181
Li	-2.517840	-.003037	-1.924821
Na	-5.489426	-.016913	-.433963
C	3.897519	-1.139592	-.373707
C	3.883286	.044384	-1.162583
C	3.964508	-.754864	.994648
H	3.830268	-2.152146	-.747458
C	3.938310	1.161084	-.281992
H	3.798466	.088194	-2.239759
C	3.989665	.666718	1.051625
H	3.962230	-1.425967	1.842873
H	3.909914	2.202311	-.573046
H	4.012000	1.268066	1.950470
Li	5.682395	-.031876	-.037010

State=1-A\HF=-1355.8691342



Al	-2.205330	1.438856	.803852
Al	-1.368303	-.915570	1.717920
Al	-1.321759	-1.856171	-.586159
Al	-2.153227	.454551	-1.607651
Li	-4.218877	2.002601	-.877628
Li	-3.727689	-.932580	.334113
Li	.459458	.511688	-.165444
Na	1.649504	-1.850857	.816622
C	2.624092	.517531	-.891394
C	2.596556	1.053052	.426839
C	3.429892	-.646472	-.871488
H	2.222000	.981878	-1.788178
C	3.385378	.216520	1.252988
H	2.169191	2.005111	.730926
C	3.916362	-.820437	.447365
H	3.681194	-1.254376	-1.732224
H	3.596700	.384551	2.302110
H	4.621497	-1.579098	.770341
Li	-1.247855	3.009481	-1.224456

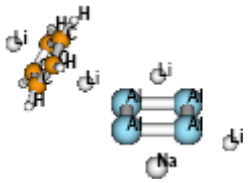
State=1-A\HF=-1355.8546171



Al	3.403455	1.227147	.371129
Al	.805588	1.383226	-.358454
Al	.792637	-1.106417	-.860814
Al	3.389899	-1.276226	-.138887
Li	-1.575975	.020414	.071927
Li	5.452774	.181756	-.945763
Li	2.652795	.461519	-2.232080
Na	1.347540	-.424708	2.117983
C	-3.705868	.391843	1.140993
C	-3.626307	1.212659	-.019123
C	-3.686133	-.967394	.720201
H	-3.741144	.740783	2.164159
C	-3.560864	.359773	-1.156576
H	-3.586760	2.293373	-.032566

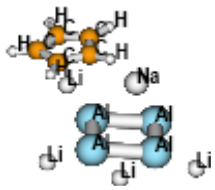
C	-3.595366	-.986737	-.699651
H	-3.701588	-1.834140	1.366907
H	-3.454108	.679389	-2.184061
H	-3.525705	-1.869734	-1.320057
Li	-5.382436	.014285	-.115856

State=1-A\HF=-1355.8631705



Al	.753471	-1.332346	.346348
Al	3.079007	-1.158002	-1.023987
Al	3.047401	1.389850	-.711585
Al	.728633	1.174754	.662621
Li	5.375618	.120402	-.682979
Li	-1.686678	-.046327	.019230
Li	.870191	.226144	-1.957989
Na	3.223009	-.231755	1.974738
C	-3.778691	-1.134580	-.478457
C	-3.774499	-.716304	.882505
C	-3.754286	.029808	-1.294722
H	-3.769846	-2.157651	-.829179
C	-3.742154	.707151	.905380
H	-3.762723	-1.365950	1.747286
C	-3.728625	1.167264	-.440842
H	-3.720535	.045487	-2.375509
H	-3.699985	1.328199	1.789922
H	-3.672235	2.199806	-.757375
Li	-5.510501	.049101	-.083660

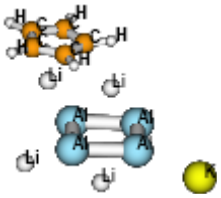
State=1-A\HF=-1355.8626675



Al	-1.607876	-0.527963	1.197506
Al	-0.067593	-2.681027	1.297623
Al	0.061941	-2.708461	-1.251902
Al	-1.474991	-0.550522	-1.343836
Li	-3.806452	0.101435	-0.197302
Li	-2.539988	-2.835143	-0.105697

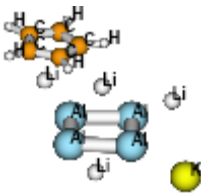
Li	-0.246603	1.850947	-0.023149
Na	1.648980	-0.386444	0.078669
C	1.900842	2.310752	-0.638590
C	0.998091	3.289996	-1.121650
C	1.835342	2.318745	0.783205
H	2.595757	1.749927	-1.256974
C	0.384617	3.907496	-0.005046
H	0.830097	3.536189	-2.161974
C	0.892610	3.303063	1.170168
H	2.471306	1.766317	1.469041
H	-0.339121	4.712147	-0.042897
H	0.630185	3.561193	2.187809
Li	-0.159511	-5.037140	0.040213

HF=-1355.8679748



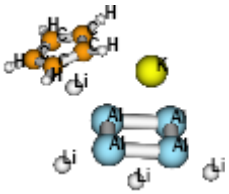
Al	.098924	1.584067	-1.282820
Al	-1.752124	-.327915	-1.264545
Al	-1.753483	-.331477	1.264269
Al	.102275	1.577039	1.282887
Li	2.619274	.603771	-.007562
Li	.638971	-1.096942	.006972
Li	-2.307697	2.187453	.006881
K	-4.884919	-.948370	-.001481
C	3.508695	-1.107807	-1.163467
C	4.498057	-.228067	-.677509
C	2.847753	-1.683748	-.041539
H	3.305314	-1.326769	-2.203620
C	4.458315	-.256587	.743914
H	5.177729	.357367	-1.284117
C	3.445823	-1.156136	1.138154
H	2.191281	-2.553240	-.080320
H	5.101904	.303236	1.410938
H	3.189026	-1.419004	2.156233
Li	.467338	3.882121	.005177

State=1-A\HF=-1793.5142063



Al	.027805	1.622171	-1.194699
Al	-1.753847	-.385695	-1.318837
Al	-1.757499	-.471895	1.276133
Al	.019737	1.542619	1.291413
Li	2.658483	.734850	.022568
Li	.789985	-.959147	-.028866
Li	-2.315085	2.112577	.054297
K	-5.010071	-.745764	-.034405
C	3.630226	-.895668	-1.181435
C	4.574868	.026094	-.682694
C	3.012344	-1.532537	-.068377
H	3.429754	-1.100667	-2.225077
C	4.549229	-.036862	.737537
H	5.216553	.661284	-1.280440
C	3.589481	-.998712	1.118352
H	2.390225	-2.425921	-.120660
H	5.167686	.541948	1.412043
H	3.354068	-1.296100	2.132119
Li	-1.720729	-2.799303	-.100002

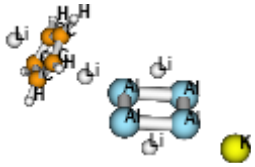
State=1-A\HF=-1793.5080487



Al	1.002772	1.382975	-1.216958
Al	2.916702	-0.448297	-1.332882
Al	2.951119	-0.573880	1.204027
Al	1.036952	1.256769	1.322056
Li	0.725806	3.657226	0.172863
Li	3.437355	1.993810	0.052534
Li	-1.642994	0.773176	0.061817
K	0.026944	-2.087172	-0.102296
C	-2.916821	-0.962465	0.703716
C	-3.439510	0.253313	1.208642
C	-2.935944	-0.891230	-0.716055
H	-2.650597	-1.822378	1.310711
C	-3.784182	1.071927	0.105692

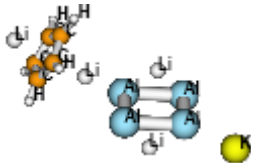
H	-3.568240	0.500928	2.254331
C	-3.470316	0.368304	-1.082522
H	-2.687121	-1.685652	-1.412999
H	-4.225720	2.059252	0.161187
H	-3.626861	0.719101	-2.094343
Li	5.298954	-0.545811	-0.097783

State=1-A\HF=-1793.509669



Al	-.058159	.768853	-1.270020
Al	-2.670861	.007854	-1.258818
Al	-2.640456	-.052756	1.284644
Al	-.032406	.713824	1.268658
Li	2.199532	-.235130	-.041559
Li	-.818534	-1.639947	-.057052
Li	-1.862418	2.399941	.057862
K	-5.586883	1.186407	.073572
C	4.172695	-1.075995	-1.200646
C	4.434413	.222127	-.678091
C	3.972919	-1.960823	-.106652
H	4.105091	-1.336598	-2.248201
C	4.394423	.137795	.742304
H	4.599796	1.120174	-1.257513
C	4.108339	-1.211365	1.094366
H	3.720203	-3.009914	-.176590
H	4.520801	.961200	1.432174
H	3.978204	-1.589982	2.098903
Li	5.926755	-1.132428	-.003656

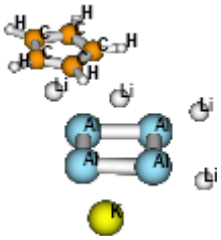
State=1-A\HF=-1793.5042804



Al	-.058159	.768853	-1.270020
Al	-2.670861	.007854	-1.258818
Al	-2.640456	-.052756	1.284644
Al	-.032406	.713824	1.268658
Li	2.199532	-.235130	-.041559
Li	-.818534	-1.639947	-.057052
Li	-1.862418	2.399941	.057862

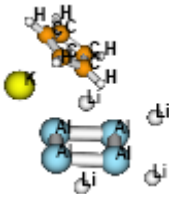
K	-5.586883	1.186407	.073572
C	4.172695	-1.075995	-1.200646
C	4.434413	.222127	-.678091
C	3.972919	-1.960823	-.106652
H	4.105091	-1.336598	-2.248201
C	4.394423	.137795	.742304
H	4.599796	1.120174	-1.257513
C	4.108339	-1.211365	1.094366
H	3.720203	-3.009914	-.176590
H	4.520801	.961200	1.432174
H	3.978204	-1.589982	2.098903
Li	5.926755	-1.132428	-.003656

State=1-A\HF=-1793.5042804



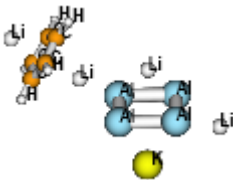
Al	-0.715743	-1.787496	-1.349022
Al	0.339800	0.656599	-1.290831
Al	0.322559	0.543523	1.303367
Al	-0.720564	-1.898418	1.132769
Li	2.348677	1.805686	0.071340
Li	-3.513437	-1.861493	-0.113881
Li	-2.245804	0.305702	-0.030601
K	2.462590	-2.263044	-0.120424
C	-4.981339	-0.575847	-1.212927
C	-5.578504	-1.761134	-0.733579
C	-4.550072	0.181594	-0.087794
H	-4.890906	-0.282147	-2.250640
C	-5.521162	-1.743564	0.687019
H	-6.016674	-2.541422	-1.343343
C	-4.891572	-0.545461	1.087119
H	-4.227584	1.222018	-0.117284
H	-5.907124	-2.507918	1.349761
H	-4.724374	-0.225151	2.107509
Li	-0.547334	2.851607	0.098590

State=1-A\HF=-1793.5045205



Al	2.698013	.831849	-1.308404
Al	1.477173	-1.533008	-1.233405
Al	1.493229	-1.534298	1.247736
Al	2.696503	.844845	1.295767
Li	4.879918	1.697827	-.006259
Li	3.933470	-1.383934	.001353
Li	-.006308	.662764	.042949
K	-2.107650	-1.675350	-.008885
C	-3.233887	.886926	1.143957
C	-2.019756	1.481917	.725304
C	-3.973635	.544063	-.011051
H	-3.561466	.776649	2.170988
C	-2.006500	1.490901	-.698801
H	-1.309058	1.974256	1.387044
C	-3.212021	.900992	-1.147396
H	-4.973543	.122870	-.021929
H	-1.280038	1.984120	-1.342122
H	-3.517616	.802188	-2.182377
Li	2.065561	3.163580	-.017006

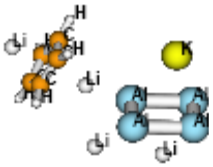
State=1-A\HF=-1793.4930384



Al	-0.502393	0.244187	-1.251875
Al	-2.661337	-1.349140	-1.274062
Al	-2.698848	-1.304683	1.283401
Al	-0.539322	0.287752	1.272784
Li	-4.943151	-1.680714	-0.024030
Li	1.930142	0.004686	0.046592
Li	-0.409738	-2.232478	0.049792
K	-3.347726	1.954155	-0.065651
C	4.027542	-0.438852	-1.107924
C	3.920166	0.948171	-0.808253
C	4.115510	-1.148304	0.121301
H	4.007472	-0.877667	-2.096023
C	3.937667	1.094157	0.608477

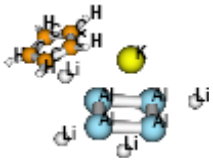
H	3.805631	1.746377	-1.529049
C	4.056647	-0.204686	1.181708
H	4.177760	-2.222204	0.231947
H	3.842502	2.024014	1.152938
H	4.067783	-0.432742	2.238796
Li	5.753047	0.200185	-0.039291

State=1-A\HF=-1793.5005922



Al	-0.844009	-1.009409	-1.304200
Al	-3.421469	-0.190020	-1.211530
Al	-3.415209	-0.332291	1.282656
Al	-0.833441	-1.149883	1.266774
Li	0.145045	-3.241020	-0.140163
Li	-2.833484	-2.642163	-0.097803
Li	1.589416	-0.366494	0.017290
K	-1.712420	2.412684	0.183775
C	3.393080	1.139431	0.624539
C	3.686629	-0.138363	1.175658
C	3.401468	1.020405	-0.794200
H	3.176934	2.036902	1.188435
C	3.880333	-1.046110	0.097195
H	3.722737	-0.383525	2.228146
C	3.702150	-0.330357	-1.120235
H	3.189300	1.809493	-1.502746
H	4.100088	-2.101389	0.188167
H	3.750573	-0.746147	-2.117210
Li	5.327958	0.512712	-0.023537

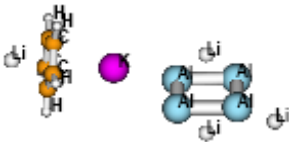
State=1-A\HF=-1793.4962389



Al	0.907840	1.369000	-1.273002
Al	2.956673	-0.287887	-1.274507
Al	2.954990	-0.283069	1.278395
Al	0.906041	1.372971	1.269199
Li	0.508704	3.667420	-0.005147
Li	3.279570	2.181323	-0.002010
Li	-1.767117	0.799241	0.001531

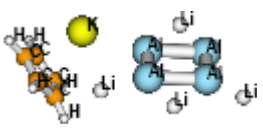
K	0.023902	-2.031873	-0.001522
C	-2.972403	-0.952116	0.710735
C	-3.557546	0.261480	1.148070
C	-2.972364	-0.950848	-0.710889
H	-2.674282	-1.767192	1.362967
C	-3.921258	1.008985	0.001630
H	-3.712945	0.553743	2.178497
C	-3.557470	0.263528	-1.146116
H	-2.674201	-1.764762	-1.364551
H	-4.407137	1.976833	0.002493
H	-3.712819	0.557580	-2.176042
Li	4.039313	-2.301308	0.006911

HF=-1793.5056997



Al	4.208847	1.264762	.260835
Al	1.597980	1.283278	-.436153
Al	1.517084	-1.233230	-.266365
Al	4.126287	-1.287215	.432207
Li	6.229512	-.148544	-.726358
Li	3.361347	-.150048	-2.061517
Li	2.324089	.167727	2.012407
K	-1.560076	.172881	.337076
C	-4.447679	-1.168542	.299266
C	-4.621733	-.139492	1.264515
C	-4.344233	-.558136	-.980209
H	-4.394686	-2.230268	.503568
C	-4.624386	1.107100	.581340
H	-4.728911	-.279469	2.332544
C	-4.452954	.848530	-.805968
H	-4.195530	-1.073641	-1.920285
H	-4.733455	2.082751	1.037412
H	-4.404534	1.592233	-1.590985
Li	-6.231830	-.096043	-.126762

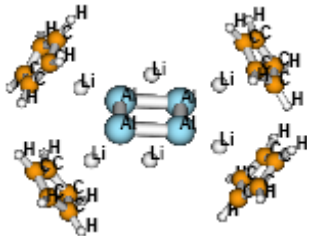
State=1-A\HF=-1793.4980695



Al	-3.887202	0.092700	1.266552
Al	-1.208809	0.083821	1.267402

Al	-1.203156	0.001177	-1.263524
Al	-3.881055	0.009909	-1.277841
Li	-5.672474	-1.469918	0.042265
Li	-2.528245	-2.090008	0.068200
Li	-2.569017	2.126047	-0.066559
K	1.856274	1.599228	-0.047245
C	3.840022	-0.451938	-1.141452
C	4.403758	0.218856	-0.033244
C	2.970410	-1.455020	-0.650032
H	4.077129	-0.280396	-2.184783
C	3.868247	-0.344753	1.147284
H	5.150481	1.004667	-0.079629
C	2.987779	-1.388036	0.774151
H	2.519723	-2.235814	-1.260577
H	4.132620	-0.077382	2.163626
H	2.547643	-2.103885	1.466083
Li	0.844669	-1.434806	0.059105

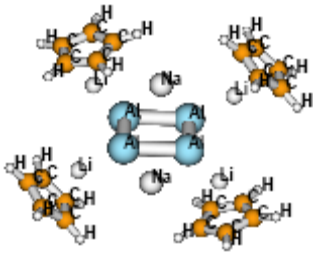
HF=-1793.4997657



Al	-1.367973	-.077741	-1.269308
Al	1.393443	.006172	-1.280964
Al	1.408669	.012925	1.240971
Al	-1.349187	-.057308	1.249275
Li	.061409	-2.078821	-.013123
Li	-3.182270	2.017456	.006271
Li	-.011757	2.022924	-.039024
Li	-3.236022	-2.142470	.028465
Li	3.255913	-2.017380	-.053073
Li	3.252954	2.028553	-.085664
C	5.367759	-2.665385	.201078
C	4.580435	-3.352718	1.161640
C	4.933070	-3.066052	-1.090607
H	6.152819	-1.947488	.415983
C	3.658864	-4.177324	.463969
H	4.652696	-3.247220	2.239220
C	3.875169	-3.998134	-.927832
H	5.322925	-2.702771	-2.036080
H	2.909441	-4.819861	.916261

H	3.315134	-4.472111	-1.727763
C	4.428596	3.694347	-1.030703
C	3.886832	4.171015	.191946
C	5.304699	2.617524	-.733487
H	4.190618	4.066185	-2.022397
C	4.437942	3.395993	1.246510
H	3.169004	4.978552	.300040
C	5.313443	2.436253	.675069
H	5.857637	2.026698	-1.456778
H	4.205790	3.498922	2.301544
H	5.872137	1.680125	1.216799
C	-3.555591	4.195460	-.435731
C	-4.402945	3.407166	-1.258950
C	-3.900685	3.942545	.919129
H	-2.774586	4.865466	-.782577
C	-5.270186	2.666632	-.414151
H	-4.372170	3.356495	-2.342460
C	-4.959631	2.997068	.932498
H	-3.422353	4.376582	1.791476
H	-6.023331	1.955640	-.738394
H	-5.432505	2.582965	1.817166
C	-5.455280	-2.192544	.065472
C	-5.007771	-2.886163	-1.090074
C	-4.973689	-2.885706	1.206729
H	-6.032556	-1.273841	.073397
C	-4.253115	-4.011215	-.663224
H	-5.186096	-2.592586	-2.119530
C	-4.230854	-4.010009	.757873
H	-5.120784	-2.590416	2.240574
H	-3.762295	-4.733051	-1.308814
H	-3.721097	-4.730275	1.390453

State=1-A\HF=-1789.2995392 (at B3LYP/6-31+G(d) level)



Al	.703358	.658499	-1.274505
Al	2.540580	-1.437431	-1.113217
Al	2.494587	-1.287644	1.399474
Al	.645808	.806249	1.237656
Li	1.533312	3.334901	-.169593

Li	-2.114174	.834056	-.078781
Li	1.652929	-3.959511	.279098
Li	5.305265	-1.434307	.188621
C	1.450044	-6.099642	.790101
C	.488658	-5.410065	1.570478
C	1.099611	-5.946457	-.579546
H	2.315147	-6.633400	1.171146
C	-.460274	-4.832439	.684170
H	.488083	-5.317782	2.651117
C	-.082635	-5.167899	-.645375
H	1.651461	-6.335924	-1.428787
H	-1.360834	-4.300433	.984167
H	-.602097	-4.877924	-1.553292
C	7.190232	-.945799	-.979032
C	7.197883	-.155685	.201110
C	7.212066	-2.310274	-.592461
H	7.144100	-.573354	-1.997150
C	7.226045	-1.032834	1.317665
H	7.193221	.929728	.243608
C	7.234470	-2.364327	.827731
H	7.190132	-3.163062	-1.263575
H	7.214892	-.738437	2.362023
H	7.236121	-3.265801	1.432620
C	3.706199	4.190073	-.251689
C	2.946158	4.688151	-1.345309
C	3.084419	4.624185	.951395
H	4.656651	3.664829	-.327986
C	1.857247	5.425014	-.818320
H	3.153938	4.517974	-2.396165
C	1.941562	5.383556	.601557
H	3.414665	4.399783	1.960118
H	1.082474	5.917241	-1.397770
H	1.240695	5.834440	1.296674
C	-4.013891	2.003636	-.147076
C	-3.994369	1.141358	-1.275560
C	-4.043559	1.197333	1.021655
H	-3.987991	3.088757	-.172234
C	-4.015020	-.197046	-.803950
H	-3.943337	1.450169	-2.314633
C	-4.045546	-.162452	.615347
H	-4.036726	1.556702	2.045567
H	-3.995195	-1.088500	-1.423225
H	-4.055337	-1.022880	1.277423
Na	-.393330	-1.873745	.113969

Na 3.586582 1.250612 .038513

State=1-A\HF=-2098.8313317