

ReO2Me3

* F R E Q U E N C I E S *

Coordinates (Cartesian)

=====

Atom angstrom		bohr Geometric Variables			
		X	Y	Z	X
Y	Z	(0:frozen, *:LT par.)			

1 Re	1.672824	0.000000	0.000000	0.000000	0.885220
0.000000	0.000000	1	2	3	
2 O	3.349267	2.783318	0.000000		1.772355
1.472868	0.000000	4	5	6	
3 O	3.151133	-2.896472	0.000000		1.667508
-1.532746	0.000000	7	8	9	
4 C	-2.489014	0.081296	0.000000		-1.317129
0.043020	0.000000	10	11	12	
5 H	-3.305568	0.951089	1.690243		-1.749231
0.503295	0.894438	13	14	15	
6 H	-3.305568	0.951089	-1.690243		-1.749231
0.503295	-0.894438	16	17	18	
7 H	-3.019126	-1.932462	0.000000		-1.597652
-1.022614	0.000000	19	20	21	
8 C	0.564464	0.004882	-3.888607		0.298701
0.002583	-2.057762	22	23	24	
9 H	2.396416	-0.251498	-4.847558		1.268128
-0.133087	-2.565217	25	26	27	
10 H	-0.719052	-1.542643	-4.372191		-0.380506
-0.816331	-2.313663	28	29	30	
11 H	-0.268803	1.820329	-4.425020		-0.142244
0.963276	-2.341619	31	32	33	
12 C	0.564464	0.004882	3.888607		0.298701
0.002583	2.057762	34	35	36	
13 H	-0.719052	-1.542643	4.372191		-0.380506
-0.816331	2.313663	37	38	39	
14 H	2.396416	-0.251498	4.847558		1.268128
-0.133087	2.565217	40	41	42	
15 H	-0.268803	1.820329	4.425020		-0.142244
0.963276	2.341619	43	44	45	

Atomic Masses:

1. Re	186.95575000
2. O	15.99491400
3. O	15.99491400
4. C	12.00000000
5. H	1.00782500
6. H	1.00782500
7. H	1.00782500
8. C	12.00000000

9. H	1.00782500
10. H	1.00782500
11. H	1.00782500
12. C	12.00000000
13. H	1.00782500
14. H	1.00782500
15. H	1.00782500

Force Constants Matrix: Computed (free variables)

1)	0.5813	0.0172	0.0000	-0.1947	-0.2321	0.0000	-0.1648
0.2146	0.0000	-0.0742					
	0.0150	0.0000	-0.0111	-0.0042	-0.0004	-0.0111	-0.0042
0.0004	-0.0095	-0.0039					
	0.0000	-0.0523	-0.0023	-0.0299	0.0026	-0.0001	0.0154
-0.0045	0.0015	-0.0125					
	-0.0048	-0.0001	-0.0080	-0.0523	-0.0023	0.0299	-0.0045
0.0015	0.0125	0.0026					
	-0.0001	-0.0154	-0.0048	-0.0001	0.0080		
2)	0.0166	0.9202	0.0000	-0.1891	-0.3835	0.0000	0.1713
-0.4094	0.0000	0.0054					
	-0.0513	0.0000	0.0092	-0.0009	0.0023	0.0092	-0.0009
-0.0023	-0.0220	-0.0005					
	0.0000	-0.0009	-0.0345	0.0004	0.0000	-0.0008	-0.0019
-0.0018	-0.0008	-0.0129					
	0.0034	-0.0006	0.0150	-0.0009	-0.0345	-0.0004	-0.0018
-0.0008	0.0129	0.0000					
	-0.0008	0.0019	0.0034	-0.0006	-0.0150		
3)	-0.0002	0.0006	0.2780	-0.0002	-0.0002	-0.0153	-0.0001
-0.0001	-0.0141	-0.0002					
	-0.0002	-0.0352	0.0132	0.0012	-0.0010	-0.0135	-0.0016
-0.0009	-0.0001	-0.0002					
	-0.0009	-0.0359	0.0001	-0.0692	0.0020	-0.0001	-0.0131
-0.0027	0.0014	-0.0117					
	-0.0029	-0.0010	-0.0114	0.0356	-0.0004	-0.0693	0.0024
-0.0017	-0.0117	-0.0023					
	-0.0002	-0.0131	0.0026	0.0007	-0.0114		
4)	-0.1930	-0.1911	0.0000	0.1642	0.2197	0.0000	0.0336
-0.0203	0.0000	-0.0018					
	-0.0045	0.0000	0.0010	0.0002	-0.0001	0.0010	0.0002
0.0001	-0.0004	0.0007					
	0.0000	-0.0035	-0.0023	-0.0026	0.0005	-0.0004	-0.0005
0.0013	-0.0002	-0.0005					
	0.0004	-0.0008	0.0002	-0.0035	-0.0023	0.0026	0.0013
-0.0002	0.0005	0.0005					
	-0.0004	0.0005	0.0004	-0.0008	-0.0002		
5)	-0.2326	-0.3829	0.0000	0.2199	0.3887	0.0000	0.0162
-0.0257	0.0000	-0.0044					
	0.0136	0.0000	-0.0036	0.0001	-0.0008	-0.0036	0.0001
0.0008	0.0020	-0.0002					
	0.0000	0.0053	0.0048	-0.0037	-0.0020	0.0003	-0.0036
0.0006	0.0010	0.0016					
	-0.0005	0.0001	-0.0023	0.0053	0.0048	0.0037	0.0006
0.0010	-0.0016	-0.0020					
	0.0003	0.0036	-0.0005	0.0001	0.0023		
6)	-0.0001	-0.0005	-0.0160	0.0001	-0.0001	0.0225	0.0000
-0.0001	-0.0024	0.0001					
	-0.0001	0.0026	-0.0010	0.0001	0.0000	0.0010	-0.0002
-0.0001	0.0000	-0.0001					
	-0.0002	-0.0045	-0.0095	-0.0061	-0.0010	0.0001	0.0012

```

0.0001 -0.0002 -0.0001
      0.0009 -0.0006 0.0018 0.0045 0.0092 -0.0061 0.0000
0.0000 -0.0001 0.0012
      -0.0003 0.0012 -0.0008 0.0004 0.0018
7)      -0.1648 0.1719 0.0000 0.0337 0.0165 0.0000 0.1342
-0.1996 0.0000 -0.0023
      0.0014 0.0000 0.0006 0.0008 -0.0004 0.0006 0.0008
0.0004 0.0010 0.0018
      0.0000 -0.0036 0.0047 -0.0019 0.0009 0.0003 -0.0002
0.0008 0.0006 0.0004
      0.0012 0.0001 -0.0007 -0.0036 0.0047 0.0019 0.0008
0.0006 -0.0004 0.0009
      0.0003 0.0002 0.0012 0.0001 0.0007
8)      0.2151 -0.4115 0.0000 -0.0203 -0.0264 0.0000 -0.1998
0.4143 0.0000 0.0036
      0.0107 0.0000 0.0006 0.0002 -0.0002 0.0006 0.0002
0.0002 0.0060 -0.0012
      0.0000 -0.0045 0.0045 0.0043 0.0022 -0.0010 0.0040
0.0004 -0.0006 0.0016
      -0.0008 0.0004 -0.0014 -0.0045 0.0045 -0.0043 0.0004
-0.0006 -0.0016 0.0022
      -0.0010 -0.0040 -0.0008 0.0004 0.0014
9)      -0.0003 0.0000 -0.0149 0.0000 0.0000 -0.0023 0.0000
-0.0001 0.0232 0.0000
      0.0000 0.0014 -0.0007 -0.0002 0.0001 0.0007 0.0003
0.0001 -0.0001 0.0000
      0.0003 -0.0021 0.0102 -0.0070 -0.0018 0.0001 0.0012
0.0006 0.0000 0.0020
      -0.0007 -0.0001 -0.0001 0.0021 -0.0103 -0.0069 -0.0007
0.0000 0.0020 0.0017
      -0.0002 0.0012 0.0006 0.0001 -0.0001
10)      -0.0750 0.0055 0.0000 -0.0014 -0.0045 0.0000 -0.0023
0.0037 0.0000 0.2847
      -0.0397 0.0000 -0.0711 0.0456 0.0801 -0.0711 0.0456
-0.0801 -0.0467 -0.0578
      0.0000 -0.0073 0.0005 0.0082 -0.0008 0.0005 0.0003
-0.0005 -0.0002 -0.0011
      -0.0006 0.0004 -0.0016 -0.0073 0.0005 -0.0082 -0.0005
-0.0002 0.0011 -0.0008
      0.0005 -0.0003 -0.0006 0.0004 0.0016
11)      0.0146 -0.0501 0.0000 -0.0045 0.0135 0.0000 0.0008
0.0116 0.0000 -0.0395
      0.4737 0.0000 0.0505 -0.0867 -0.0916 0.0505 -0.0867
0.0916 -0.0765 -0.2739
      0.0000 0.0015 -0.0016 0.0005 0.0013 0.0012 -0.0003
0.0003 0.0015 -0.0007
      -0.0013 0.0008 0.0007 0.0015 -0.0016 -0.0005 0.0003
0.0015 0.0007 0.0013
      0.0012 0.0003 -0.0013 0.0008 -0.0007
12)      0.0010 0.0013 -0.0363 0.0001 0.0003 0.0028 0.0001
0.0003 0.0015 0.0001
      0.0003 0.5315 0.0905 -0.0872 -0.2198 -0.0903 0.0878
-0.2198 0.0001 0.0003
      -0.0374 0.0113 -0.0001 -0.0090 0.0010 0.0006 -0.0009
0.0020 0.0012 -0.0006
      0.0011 -0.0002 -0.0007 -0.0111 0.0007 -0.0090 -0.0018
-0.0006 -0.0006 -0.0007
      0.0000 -0.0008 -0.0009 0.0008 -0.0007
13)      -0.0112 0.0082 0.0131 0.0010 -0.0036 -0.0010 0.0004
0.0006 -0.0008 -0.0711
      0.0504 0.0906 0.0783 -0.0478 -0.0840 0.0035 -0.0057

```

```

-0.0091  0.0026 -0.0039
          -0.0075 -0.0007 -0.0002  0.0000  0.0000 -0.0002  0.0002
-0.0001  0.0000  0.0003
          -0.0001 -0.0002  0.0003 -0.0030  0.0012 -0.0001  0.0000
0.0003 -0.0002  0.0012
          -0.0005 -0.0009 -0.0008 -0.0009 -0.0012
    14)   -0.0043 -0.0014  0.0014  0.0004 -0.0001 -0.0001  0.0006
0.0007 -0.0004  0.0455
          -0.0870 -0.0877 -0.0477  0.0926  0.0989 -0.0056  0.0061
0.0112  0.0118 -0.0121
          -0.0244 -0.0004  0.0001 -0.0003 -0.0003 -0.0004  0.0011
0.0002  0.0000  0.0001
          -0.0003  0.0001  0.0004 -0.0005  0.0007 -0.0003  0.0006
-0.0006  0.0002 -0.0005
          0.0000 -0.0001 -0.0002  0.0003 -0.0003
    15)   -0.0012  0.0016 -0.0005 -0.0003 -0.0009 -0.0001 -0.0004
-0.0005  0.0002  0.0799
          -0.0917 -0.2199 -0.0842  0.0989  0.2398  0.0087 -0.0114
-0.0175 -0.0002  0.0015
          0.0000  0.0020 -0.0005 -0.0009  0.0002 -0.0001 -0.0002
-0.0003  0.0001  0.0005
          -0.0003 -0.0003  0.0004 -0.0049  0.0004 -0.0015 -0.0003
0.0002  0.0005 -0.0006
          0.0002 -0.0006 -0.0014 -0.0001  0.0003
    16)   0.0000  0.0000  0.0000  0.0000  0.0000  0.0000  0.0000
0.0000  0.0000  0.0000
          0.0000  0.0000  0.0000  0.0000  0.0000  0.0000  0.0000
0.0000  0.0000  0.0000
          0.0000  0.0000  0.0000  0.0000  0.0000  0.0000  0.0000
0.0000  0.0000  0.0000
          0.0000  0.0000  0.0000  0.0000  0.0000
    17)   0.0000  0.0000  0.0000  0.0000  0.0000  0.0000  0.0000
0.0000  0.0000  0.0000
          0.0000  0.0000  0.0000  0.0000  0.0000  0.0000  0.0000
0.0000  0.0000  0.0000
          0.0000  0.0000  0.0000  0.0000  0.0000  0.0000  0.0000
0.0000  0.0000  0.0000
          0.0000  0.0000  0.0000  0.0000  0.0000
    18)   0.0000  0.0000  0.0000  0.0000  0.0000  0.0000  0.0000
0.0000  0.0000  0.0000
          0.0000  0.0000  0.0000  0.0000  0.0000  0.0000  0.0000
0.0000  0.0000  0.0000
          0.0000  0.0000  0.0000  0.0000  0.0000  0.0000  0.0000
0.0000  0.0000  0.0000
          0.0000  0.0000  0.0000  0.0000  0.0000
    19)   -0.0095 -0.0213  0.0000 -0.0004  0.0024  0.0000  0.0010
0.0062  0.0000 -0.0467
          -0.0763  0.0000  0.0027  0.0121  0.0000  0.0027  0.0121
0.0000  0.0499  0.0668
          0.0000  0.0001  0.0000 -0.0004  0.0003  0.0005  0.0001
0.0002  0.0004  0.0005
          0.0000  0.0004  0.0002  0.0001  0.0000  0.0004  0.0002
0.0004 -0.0005  0.0003
          0.0005 -0.0001  0.0000  0.0004 -0.0002
    20)   -0.0043  0.0001  0.0000  0.0007 -0.0002  0.0000  0.0016

```

```

-0.0007  0.0000 -0.0578
          -0.2740  0.0000 -0.0038 -0.0119  0.0017 -0.0038 -0.0119
-0.0017  0.0666  0.2989
          0.0000  0.0002  0.0004 -0.0005 -0.0002  0.0005  0.0001
0.0002  0.0004  0.0003
          0.0001  0.0005 -0.0002  0.0002  0.0004  0.0005  0.0002
0.0004 -0.0003 -0.0002
          0.0005 -0.0001  0.0001  0.0005  0.0002
21)      0.0000  0.0000 -0.0008  0.0000  0.0000 -0.0002  0.0000
0.0000  0.0002  0.0000
          0.0000 -0.0375 -0.0075 -0.0243  0.0000  0.0075  0.0243
0.0000  0.0000  0.0000
          0.0401 -0.0002  0.0007 -0.0003 -0.0002 -0.0004  0.0001
0.0003 -0.0002 -0.0006
          0.0005 -0.0003 -0.0001  0.0002 -0.0007 -0.0003 -0.0003
0.0002 -0.0006  0.0002
          0.0004  0.0001 -0.0005  0.0003  0.0000
22)      -0.0524 -0.0020 -0.0353 -0.0036  0.0050 -0.0045 -0.0039
-0.0047 -0.0020 -0.0065
          0.0014  0.0110 -0.0007 -0.0003  0.0020 -0.0032 -0.0006
0.0046  0.0000 -0.0001
          -0.0003  0.5164  0.0026 -0.0135 -0.2317  0.0266  0.1133
-0.1453 -0.1250 -0.0421
          -0.0840  0.0947 -0.0293  0.0160 -0.0006 -0.0047  0.0002
-0.0007 -0.0017 -0.0023
          0.0000  0.0036  0.0004  0.0001 -0.0010
23)      -0.0033 -0.0356  0.0002 -0.0022  0.0040 -0.0092  0.0043
0.0044  0.0101  0.0003
          -0.0022 -0.0003 -0.0003  0.0001 -0.0004  0.0012  0.0005
-0.0007 -0.0005 -0.0003
          0.0009  0.0027  0.5120 -0.0002  0.0258 -0.0480 -0.0160
-0.1279 -0.1908 -0.0558
          0.0979 -0.2473  0.0711 -0.0006 -0.0024  0.0004  0.0001
-0.0001  0.0001  0.0000
          0.0001  0.0001 -0.0001 -0.0002 -0.0004
24)      -0.0300  0.0007 -0.0678 -0.0025 -0.0037 -0.0066 -0.0019
0.0044 -0.0075  0.0081
          0.0004 -0.0096 -0.0003  0.0000 -0.0005 -0.0002  0.0003
-0.0017 -0.0004 -0.0004
          -0.0004 -0.0131  0.0002  0.2755  0.0952 -0.0138 -0.0878
-0.0348 -0.0460 -0.0431
          -0.0243  0.0593 -0.0471  0.0049 -0.0002 -0.0037 -0.0002
-0.0001 -0.0006 -0.0011
          0.0002  0.0015  0.0000  0.0002 -0.0006
25)      0.0024 -0.0011  0.0025  0.0004 -0.0024 -0.0011  0.0007
0.0020 -0.0019 -0.0008
          0.0009  0.0011 -0.0001 -0.0004  0.0006  0.0010 -0.0006
0.0004  0.0003 -0.0004
          -0.0001 -0.2315  0.0257  0.0952  0.2527 -0.0303 -0.1113
-0.0139  0.0040  0.0085
          -0.0091 -0.0009  0.0056 -0.0022 -0.0002  0.0010  0.0000
-0.0001  0.0000  0.0003
          -0.0002 -0.0007  0.0000 -0.0003 -0.0001
26)      -0.0007 -0.0019  0.0001 -0.0004 -0.0004  0.0003  0.0000
-0.0009  0.0001  0.0005
          0.0008  0.0001 -0.0002  0.0001  0.0001 -0.0004 -0.0003
-0.0003  0.0002  0.0000
          -0.0004  0.0266 -0.0481 -0.0138 -0.0299  0.0453  0.0155
-0.0185  0.0031  0.0103
          0.0213 -0.0020 -0.0120  0.0002  0.0002 -0.0001 -0.0001
-0.0004 -0.0001 -0.0001

```

		-0.0002	0.0000	0.0000	-0.0003	0.0001		
27)	0.0155	-0.0025	-0.0133	-0.0004	-0.0036	0.0012	-0.0002	
0.0038	0.0012	0.0004						
	-0.0003	-0.0009	0.0004	-0.0001	-0.0004	0.0010	-0.0002	
-0.0006	0.0001	0.0000						
	0.0000	0.1135	-0.0162	-0.0879	-0.1113	0.0155	0.0919	
-0.0076	0.0014	0.0035						
	-0.0084	0.0007	0.0037	-0.0035	-0.0001	0.0014	0.0001	
0.0000	0.0004	0.0005						
	-0.0001	-0.0008	0.0000	-0.0001	0.0002			
28)	-0.0037	-0.0006	-0.0027	0.0012	0.0005	0.0000	0.0007	
0.0006	0.0007	-0.0006						
	0.0002	0.0018	-0.0002	0.0003	0.0001	0.0000	0.0006	
0.0002	0.0001	0.0003						
	0.0003	-0.1452	-0.1276	-0.0346	-0.0139	-0.0183	-0.0076	
0.1541	0.1356	0.0386						
	0.0075	0.0105	0.0036	0.0002	0.0003	0.0000	0.0000	
0.0001	-0.0002	0.0000						
	0.0000	0.0000	0.0000	0.0001	-0.0001			
29)	0.0011	-0.0011	0.0012	-0.0002	0.0005	-0.0002	0.0002	
-0.0004	0.0000	-0.0004						
	0.0011	0.0009	0.0000	0.0000	0.0005	0.0004	-0.0008	
-0.0005	0.0000	0.0001						
	-0.0001	-0.1249	-0.1906	-0.0458	0.0044	0.0033	0.0015	
0.1355	0.2039	0.0494						
	-0.0169	-0.0174	-0.0071	-0.0004	0.0002	0.0001	-0.0001	
-0.0001	0.0001	0.0000						
	-0.0001	-0.0001	-0.0001	-0.0002	0.0001			
30)	-0.0126	-0.0136	-0.0117	-0.0005	0.0014	-0.0001	0.0005	
0.0015	0.0020	-0.0011						
	-0.0007	-0.0004	0.0004	0.0002	0.0005	0.0003	-0.0004	
0.0005	0.0006	0.0001						
	-0.0006	-0.0422	-0.0559	-0.0431	0.0087	0.0101	0.0034	
0.0386	0.0493	0.0484						
	0.0057	0.0063	0.0020	0.0018	-0.0001	-0.0007	0.0002	
-0.0002	-0.0003	0.0000						
	0.0000	0.0005	0.0002	-0.0001	-0.0002			
31)	-0.0047	0.0036	-0.0030	0.0004	-0.0007	0.0010	0.0011	
-0.0008	-0.0007	-0.0005						
	-0.0012	0.0008	-0.0002	0.0001	0.0000	-0.0007	-0.0002	
0.0013	-0.0001	0.0001						
	0.0006	-0.0842	0.0980	-0.0242	-0.0090	0.0213	-0.0084	
0.0076	-0.0168	0.0057						
	0.0898	-0.1034	0.0272	0.0004	0.0000	-0.0001	0.0000	
0.0000	-0.0001	0.0000						
	0.0000	0.0001	0.0001	0.0000	-0.0001			
32)	0.0002	0.0005	-0.0005	-0.0009	0.0000	-0.0006	-0.0003	
0.0011	0.0000	0.0005						
	0.0009	-0.0006	-0.0001	0.0005	-0.0002	-0.0010	0.0005	
0.0001	0.0001	0.0006						
	-0.0004	0.0950	-0.2468	0.0592	-0.0008	-0.0014	0.0008	
0.0103	-0.0171	0.0063						
	-0.1035	0.2652	-0.0641	0.0001	0.0005	0.0000	-0.0001	
0.0002	0.0000	-0.0002						
	0.0003	0.0000	-0.0001	0.0003	0.0000			
33)	-0.0087	0.0152	-0.0115	0.0002	-0.0025	0.0019	-0.0008	
-0.0015	-0.0002	-0.0017						
	0.0005	-0.0006	0.0002	-0.0001	0.0004	0.0012	0.0000	
0.0002	0.0001	-0.0003						
	0.0000	-0.0294	0.0710	-0.0471	0.0056	-0.0121	0.0038	
0.0035	-0.0072	0.0020						

	0.0272	-0.0641	0.0517	0.0010	0.0002	-0.0007	0.0000
-0.0002	-0.0002	0.0001					
	-0.0002	0.0003	0.0000	-0.0001	-0.0001		
34)	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000
0.0000	0.0000	0.0000					
	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000
0.0000	0.0000	0.0000					
	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000
0.0000	0.0000	0.0000					
	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000
0.0000	0.0000	0.0000					
	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000		
35)	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000
0.0000	0.0000	0.0000					
	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000
0.0000	0.0000	0.0000					
	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000
0.0000	0.0000	0.0000					
	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000
0.0000	0.0000	0.0000					
	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000		
36)	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000
0.0000	0.0000	0.0000					
	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000
0.0000	0.0000	0.0000					
	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000
0.0000	0.0000	0.0000					
	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000
0.0000	0.0000	0.0000					
	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000		
37)	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000
0.0000	0.0000	0.0000					
	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000
0.0000	0.0000	0.0000					
	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000
0.0000	0.0000	0.0000					
	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000
0.0000	0.0000	0.0000					
	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000		
38)	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000
0.0000	0.0000	0.0000					
	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000
0.0000	0.0000	0.0000					
	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000
0.0000	0.0000	0.0000					
	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000
0.0000	0.0000	0.0000					
	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000		
39)	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000
0.0000	0.0000	0.0000					
	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000
0.0000	0.0000	0.0000					
	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000
0.0000	0.0000	0.0000					
	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000		
40)	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000
0.0000	0.0000	0.0000					
	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000
0.0000	0.0000	0.0000					

	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000
0.0000	0.0000	0.0000					
	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000
0.0000	0.0000	0.0000					
	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000		
41)	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000
0.0000	0.0000	0.0000					
	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000
0.0000	0.0000	0.0000					
	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000
0.0000	0.0000	0.0000					
	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000
0.0000	0.0000	0.0000					
	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000		
42)	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000
0.0000	0.0000	0.0000					
	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000
0.0000	0.0000	0.0000					
	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000
0.0000	0.0000	0.0000					
	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000
0.0000	0.0000	0.0000					
	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000		
43)	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000
0.0000	0.0000	0.0000					
	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000
0.0000	0.0000	0.0000					
	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000
0.0000	0.0000	0.0000					
	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000
0.0000	0.0000	0.0000					
	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000		
44)	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000
0.0000	0.0000	0.0000					
	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000
0.0000	0.0000	0.0000					
	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000
0.0000	0.0000	0.0000					
	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000		
45)	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000
0.0000	0.0000	0.0000					
	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000
0.0000	0.0000	0.0000					
	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000
0.0000	0.0000	0.0000					
	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000
0.0000	0.0000	0.0000					
	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000		

Dipole: -0.752467 -0.008566 0.000000

Derivatives:

1)	0.676770	0.061464	0.000000
2)	0.032343	1.571866	0.000000
3)	0.001519	-0.001219	1.025746
4)	-0.398293	-0.487409	0.000000
5)	-0.549040	-0.900387	0.000000
6)	-0.002210	0.002131	-0.254575
7)	-0.324044	0.447107	0.000000
8)	0.508174	-0.943515	0.000000

9)	-0.002387	0.000623	-0.282216
10)	-0.126473	-0.058676	0.000000
11)	-0.047065	0.022417	0.000000
12)	0.000483	0.000733	0.157777
13)	-0.042161	0.016589	0.008202
14)	0.035493	0.034438	-0.050373
15)	0.083655	-0.057917	-0.066387
16)	0.000000	0.000000	0.000000
17)	0.000000	0.000000	0.000000
18)	0.000000	0.000000	0.000000
19)	-0.007950	0.011374	0.000061
20)	-0.022703	-0.058617	0.000000
21)	0.000408	-0.000427	0.065363
22)	0.143793	-0.007493	0.172878
23)	-0.008124	0.048038	-0.005703
24)	-0.110431	0.009231	-0.165073
25)	-0.065312	0.017090	-0.055904
26)	0.015072	0.076204	0.000389
27)	-0.008931	-0.002042	-0.141131
28)	0.018200	-0.056626	-0.033436
29)	-0.053372	0.013532	-0.022743
30)	0.006954	0.018303	0.021925
31)	0.042725	0.049789	-0.017504
32)	0.040695	-0.007403	0.024253
33)	-0.004714	-0.015340	0.011934
34)	0.000000	0.000000	0.000000
35)	0.000000	0.000000	0.000000
36)	0.000000	0.000000	0.000000
37)	0.000000	0.000000	0.000000
38)	0.000000	0.000000	0.000000
39)	0.000000	0.000000	0.000000
40)	0.000000	0.000000	0.000000
41)	0.000000	0.000000	0.000000
42)	0.000000	0.000000	0.000000
43)	0.000000	0.000000	0.000000
44)	0.000000	0.000000	0.000000
45)	0.000000	0.000000	0.000000

=====

Normal Modes in Symmetry Displacements *** (cartesians, not
mass-weighted) ***

=====

=== AA ===

Symmetry Displacements

		1			2		
3							
		-----			-----		
	1.Re	0.040	0.000	0.000	0.000	0.039	0.000
0.000	0.000	0.000					
	2.O	-0.096	0.000	0.000	0.019	-0.110	0.000
0.194	0.051	0.000					
	3.O	-0.096	0.000	0.000	-0.020	-0.109	0.000

-0.003	0.046	0.000						
4.C		-0.096	0.000	0.000		0.001	-0.070	0.000
-0.069	-0.078	0.000						
5.H		-0.096	0.000	0.000		0.007	-0.064	0.000
-0.088	-0.096	0.000						
6.H		-0.096	0.000	0.000		0.007	-0.064	0.000
-0.088	-0.096	0.000						
7.H		-0.096	0.000	0.000		-0.013	-0.066	0.000
-0.025	-0.089	0.000						
8.C		-0.096	0.000	0.000		0.000	-0.091	0.000
-0.067	-0.011	0.000						
9.H		-0.096	0.000	0.000		-0.002	-0.104	0.000
-0.062	0.030	0.000						
10.H		-0.096	0.000	0.000		-0.011	-0.082	0.000
-0.033	-0.039	0.000						
11.H		-0.096	0.000	0.000		0.013	-0.085	0.000
-0.107	-0.029	0.000						
12.C		-0.096	0.000	0.000		0.000	-0.091	0.000
-0.067	-0.011	0.000						
13.H		-0.096	0.000	0.000		-0.011	-0.082	0.000
-0.033	-0.039	0.000						
14.H		-0.096	0.000	0.000		-0.002	-0.104	0.000
-0.062	0.030	0.000						
15.H		-0.096	0.000	0.000		0.013	-0.085	0.000
-0.107	-0.029	0.000						

6	4				5		
-----			-----				
1.Re	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000
0.000 0.000	0.000						
2.O	0.000	0.197	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000
0.000 0.000	0.000						
3.O	-0.051	-0.115	0.000	0.000	0.185	-0.081	0.000
0.000 0.145	0.000						
4.C	0.019	0.017	0.000	0.000	-0.064	0.088	0.000
0.004 0.076	0.000						
5.H	0.040	0.036	0.000	0.000	-0.038	0.112	0.000
0.060 0.129	0.000						
6.H	0.040	0.036	0.000	0.000	-0.038	0.112	0.000
0.060 0.129	0.000						
7.H	-0.028	0.030	0.000	0.000	-0.124	0.103	0.000
-0.126 0.110	0.000						
8.C	0.017	-0.054	0.000	0.000	-0.066	-0.004	0.000
-0.001 -0.121	0.000						
9.H	0.011	-0.097	0.000	0.000	-0.074	-0.058	0.000
-0.018 -0.239	0.000						
10.H	-0.019	-0.024	0.000	0.000	-0.112	0.035	0.000
-0.101 -0.038	0.000						
11.H	0.060	-0.035	0.000	0.000	-0.012	0.021	0.000
0.116 -0.067	0.000						
12.C	0.017	-0.054	0.000	0.000	-0.066	-0.004	0.000
-0.001 -0.121	0.000						
13.H	-0.019	-0.024	0.000	0.000	-0.112	0.035	0.000
-0.101 -0.038	0.000						
14.H	0.011	-0.097	0.000	0.000	-0.074	-0.058	0.000
-0.018 -0.239	0.000						
15.H	0.060	-0.035	0.000	0.000	-0.012	0.021	0.000
0.116 -0.067	0.000						

9		7			8		
		-----			-----		
1.Re	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000
0.000	0.000	0.000					
2.O	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000
0.000	0.000	0.000					
3.O	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000
0.000	0.000	0.000					
4.C	0.247	-0.003	0.000	0.000	0.000	0.177	0.000
0.000	0.000	0.000					
5.H	-0.091	-0.005	0.000	0.000	-0.080	-0.362	0.000
0.000	0.000	0.000					
6.H	-0.091	-0.005	0.000	0.000	-0.080	-0.362	0.000
0.000	0.000	0.000					
7.H	-0.086	-0.004	0.000	0.000	0.164	-0.338	0.000
0.000	0.000	0.000					
8.C	-0.090	0.002	0.000	0.000	0.000	-0.034	0.000
0.000	0.000	0.204					
9.H	-0.089	0.005	0.000	0.000	0.022	0.122	0.000
0.000	0.000	0.000					
10.H	-0.087	0.000	0.000	0.000	0.131	-0.143	0.000
0.000	0.000	0.000					
11.H	-0.093	0.000	0.000	0.000	-0.154	-0.104	0.000
0.000	0.000	0.000					
12.C	-0.090	0.002	0.000	0.000	0.000	-0.034	0.000
0.000	0.000	-0.204					
13.H	-0.087	0.000	0.000	0.000	0.131	-0.143	0.000
0.000	0.000	0.000					
14.H	-0.089	0.005	0.000	0.000	0.022	0.122	0.000
0.000	0.000	0.000					
15.H	-0.093	0.000	0.000	0.000	-0.154	-0.104	0.000
0.000	0.000	0.000					
12		10			11		
		-----			-----		
1.Re	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000
0.000	0.000	0.000					
2.O	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000
0.000	0.000	0.000					
3.O	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000
0.000	0.000	0.000					
4.C	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000
0.000	0.000	0.000					
5.H	-0.283	0.000	0.000	0.000	0.052	-0.117	0.000
0.000	0.000	0.704					
6.H	-0.283	0.000	0.000	0.000	0.052	-0.117	0.000
0.000	0.000	-0.704					
7.H	-0.283	0.000	0.000	0.000	-0.107	-0.133	0.000
0.000	0.000	0.000					
8.C	0.107	0.000	0.000	0.000	0.000	0.097	0.000
0.000	0.000	0.000					
9.H	-0.283	0.000	0.000	0.000	-0.014	-0.432	0.000
0.000	0.000	0.000					
10.H	-0.283	0.000	0.000	0.000	-0.085	-0.260	0.000

18			16			17		
-----			-----			-----		
1.Re	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000
0.000	0.000	0.000						
2.O	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000
0.000	0.000	0.000						
3.O	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000
0.000	0.000	0.000						
4.C	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000
0.000	0.000	0.000						

5.H	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000
0.000	0.000	0.000					
6.H	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000
0.000	0.000	0.000					
7.H	0.000	0.764	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000
0.000	0.000	0.000					
8.C	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000
0.000	0.000	0.000					
9.H	0.030	0.097	0.000	0.000	0.000	0.000	0.704
0.573	-0.038	0.000					
10.H	0.181	-0.266	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000
-0.319	0.023	0.000					
11.H	-0.211	-0.213	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000
-0.253	0.015	0.000					
12.C	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000
0.000	0.000	0.000					
13.H	0.181	-0.266	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000
-0.319	0.023	0.000					
14.H	0.030	0.097	0.000	0.000	0.000	0.000	-0.704
0.573	-0.038	0.000					
15.H	-0.211	-0.213	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000
-0.253	0.015	0.000					

			19			20	
21							
			-----			-----	

1.Re	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000
0.000	0.000	0.000					
2.O	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000
0.000	0.000	0.000					
3.O	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000
0.000	0.000	0.000					
4.C	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000
0.000	0.000	0.000					
5.H	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000
0.000	0.000	0.000					
6.H	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000
0.000	0.000	0.000					
7.H	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000
0.000	0.000	0.000					
8.C	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000
0.000	0.000	0.000					
9.H	0.000	0.410	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000
0.000	0.000	0.000					
10.H	-0.346	-0.159	0.000	0.000	0.000	0.704	0.000
0.066	0.494	0.000					
11.H	0.346	-0.251	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000
-0.066	-0.494	0.000					
12.C	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000
0.000	0.000	0.000					
13.H	-0.346	-0.159	0.000	0.000	0.000	-0.704	0.000
0.066	0.494	0.000					
14.H	0.000	0.410	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000
0.000	0.000	0.000					
15.H	0.346	-0.251	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000
-0.066	-0.494	0.000					

1.Re	0.000	0.000	0.000
2.O	0.000	0.000	0.000
3.O	0.000	0.000	0.000
4.C	0.000	0.000	0.000
5.H	0.000	0.000	0.000
6.H	0.000	0.000	0.000
7.H	0.000	0.000	0.000
8.C	0.000	0.000	0.000
9.H	0.000	0.000	0.000
10.H	0.000	0.000	0.000
11.H	0.000	0.000	0.704
12.C	0.000	0.000	0.000
13.H	0.000	0.000	0.000
14.H	0.000	0.000	0.000
15.H	0.000	0.000	-0.704

Largest computed component in inactive z Dipole derivative= 0.4770E-17
(symmetry index= 1)
Deviation may result from numerical integration and/or the non-linearity
in the transformations between Cartesian and Z-matrix coordinates.

Frequencies and Normal Modes

	1	2	3	4	5
6	7	8			
	80.0500	226.9520	247.5504	269.8457	291.4220
468.2396	515.9699	726.3047			
1	0.03975091	-0.09971220	0.20394381	-0.05795113	0.71912048
0.19156134	-0.45777470	-0.07878212			
2	0.20022631	-0.65419894	-0.00317660	0.22037130	-0.10537471
0.02733625	-0.00775511	0.04163230			
3	-0.17100807	-0.59796857	0.28917094	-0.34488170	-0.17869322
0.10748549	-0.18432068	0.08709100			
4	0.29108078	-0.02169821	-0.16402979	0.45935270	0.41335439
0.03708968	-0.02309268	0.08102660			
5	0.32432480	0.35647448	0.38874667	-0.44996546	-0.04384694
0.08642068	-0.14885983	-0.14699203			
6	0.78777353	0.00597680	0.18902557	0.08481794	-0.24886739
0.02190573	0.01793339	0.19149248			
7	0.03254019	-0.09497962	0.21719814	-0.13069540	0.28060788
-0.64221518	0.37551521	0.13767037			
8	0.18861362	-0.14421631	-0.32761145	-0.24272525	0.05518349
-0.07849886	0.09470365	-0.57722729			
9	-0.00006523	-0.05936951	0.13945633	-0.12194733	0.21303421
0.54391559	0.65417057	0.04332073			
10	-0.00016000	0.01047680	-0.01261040	-0.02559543	-0.05416816
0.13391646	-0.14410199	0.04083803			
11	-0.00696765	-0.01077046	0.17452850	0.16162755	-0.04021847
0.01357661	-0.01193197	-0.05755510			
12	0.00040119	0.00056348	-0.00079467	0.00603150	-0.00446645
0.00480200	-0.00330248	-0.05740631			
13	-0.00043701	-0.00025567	0.01015710	-0.16804860	0.15930683
-0.23213132	0.05643978	0.46332059			
14	0.14736803	-0.08096014	-0.35067108	-0.29604303	0.09454657

```

-0.03515248  0.00071063  0.08309562
  15      0.01751318 -0.09799841  0.29668264  0.12440371  0.06239944
-0.26717752  0.16474871 -0.54441188
  16      0.18474280 -0.09221667 -0.46623547 -0.36542009  0.09120947
-0.01430026  0.00489351  0.04299424
  17     -0.00629042  0.01750692 -0.07549134  0.08273390 -0.02514023
0.25832960  0.25557509 -0.08051895
  18     -0.00455761  0.00991665 -0.02073998  0.02185569 -0.01905864
0.01866092  0.00957890 -0.00632676
  19     -0.02046397  0.01960481 -0.00152331 -0.00690654  0.00077132
0.00295049  0.00316928  0.04285230
  20      0.11307603 -0.12261566  0.11513382 -0.06984846  0.11324904
0.08340622  0.12336972 -0.04154116
  21      0.00299240 -0.00228549  0.00540408 -0.00516680 -0.00226035
0.00010970 -0.00040380  0.00715348
  22     -0.11168126  0.05359772  0.09251216 -0.11669703  0.11407509
0.09129920  0.15350237  0.16551987

```

```

          9          10          11          12          13
14         15         16
          753.2053      817.9406      957.6726      990.2302      1181.8401
1229.3845      1390.2635      1402.2365
-----

```

```

-----
  1      0.02740879  0.09966767 -0.00372012 -0.40202692 -0.03001138
0.00569415  0.00370394  0.02168222
  2      0.04391336 -0.00580616  0.68263688 -0.02999410 -0.01002678
0.00918748 -0.01417493 -0.00953709
  3      0.07979702  0.17928951 -0.43959860  0.30613121  0.00493843
0.00767290  0.00093509  0.00458195
  4      0.08832275  0.06329667 -0.17380994  0.67297224  0.03006350
0.03934464 -0.00397054 -0.01120532
  5     -0.03734696  0.16745360  0.41171689  0.40194662  0.00239512
0.02145693 -0.00167010 -0.00281941
  6      0.15403314 -0.02298813 -0.32719182 -0.32369037 -0.01271974
-0.02317882 -0.01308859  0.00627319
  7     -0.03228104  0.17762996  0.00418200 -0.03949466 -0.23038963
0.37988942  0.02278532  0.02720783
  8      0.16748844 -0.06425866 -0.09462378 -0.00133667 -0.06122544
0.12206810 -0.00660938 -0.13229506
  9     -0.01669163 -0.04336760 -0.00012267 -0.04993337  0.35325437
0.18914792 -0.00878479 -0.05900507
 10     -0.00990949 -0.41457110 -0.00155446  0.05498631 -0.07198381
0.45909799  0.05450303  0.43251741
 11     -0.42191864  0.00779096 -0.05418209  0.00226497 -0.03545691
0.05203947 -0.53184818 -0.00134881
 12      0.01148794 -0.00770145 -0.01485596  0.00592504  0.07986695
-0.12774512 -0.03989594 -0.18576949
 13     -0.08417434 -0.05144146  0.06355765  0.02484387  0.29617959
-0.35842718  0.01124156  0.07575210
 14     -0.09314054  0.00225485  0.01247828  0.00797351  0.19041325
-0.33184764 -0.08551937  0.25559301
 15      0.10380518 -0.14680695 -0.07385153  0.01686228  0.27596487
-0.34728910 -0.01375465  0.25762796
 16     -0.10188252  0.01293821 -0.01495964 -0.00173792 -0.06626636
0.10761202 -0.14436255 -0.01413822
 17     -0.06959198  0.58718906 -0.00914546 -0.06361448 -0.40936338
-0.22223579  0.04782679  0.27080498
 18      0.00942056  0.06649102  0.00407273  0.01264375 -0.17352473
-0.07138747  0.18939143  0.52153453

```

```

19      0.15723236  0.02351365  0.02429067 -0.00834371  0.02688884
-0.02268020  0.67709244 -0.20492433
20     -0.54789785 -0.47426357 -0.07189604  0.08971473 -0.42164413
-0.26187382  0.27848391 -0.10538068
21     -0.00801305 -0.05467748  0.00199080  0.00186760  0.21333944
0.15300938  0.11897809  0.46761997
22      0.61934338 -0.33720804  0.07813180  0.06414727 -0.42098903
-0.23391274 -0.30779928  0.03461878

```

	17	18	19	20	21	22
	1452.7717	2941.6255	2951.3585	3037.5097	3054.2831	3091.4623
	-----	-----	-----	-----	-----	-----
1	-0.01349204	0.00078255	-0.00168243	-0.00171812	0.00130064	0.00043391
2	-0.01933898	-0.00006914	-0.00106485	-0.00015210	-0.00110332	-0.00265243
3	0.00063001	0.00044789	-0.00002104	-0.00021594	-0.00135001	0.00033118
4	0.00709074	0.00102236	-0.00089391	-0.00038952	-0.00015077	-0.00025570
5	-0.00180494	0.00053277	0.00071174	0.00019512	-0.00106862	0.00003849
6	-0.00677451	-0.00089338	-0.00121027	-0.00146986	-0.00102563	-0.00094801
7	0.09208060	0.00640944	-0.15918849	0.08583555	0.02077046	0.00558112
8	-0.32882134	0.01851948	-0.17927439	-0.44589881	-0.09112427	-0.03077917
9	0.02435542	-0.14640629	-0.00922510	-0.00567462	0.01309162	0.00432671
10	-0.06829635	0.18471370	-0.11648655	-0.03682484	0.56259061	-0.06760459
11	-0.11847901	-0.02346987	-0.05892158	-0.09675652	-0.09536257	-0.65850801
12	-0.51480089	0.01171987	-0.49639217	0.63708574	0.13470016	0.04220928
13	-0.48961771	0.08648906	0.13399002	-0.37037111	0.18910778	0.00014717
14	0.50323412	0.03247276	-0.48964740	0.01895509	0.03105070	-0.14400795
15	0.10801338	0.04527441	0.28284219	0.17755332	0.24102463	-0.05532164
16	-0.06388338	-0.04870485	0.58188016	0.42470972	0.06135136	-0.13818950
17	-0.11232269	0.36459013	0.02225188	-0.04097966	0.23205998	0.00435284
18	-0.21004622	-0.76341228	-0.04251688	0.01403616	-0.12932342	-0.06871838
19	0.02769876	0.07588973	0.01115551	0.04429232	0.03338964	-0.67819133
20	0.01517544	0.06827009	0.00323837	0.01720026	-0.12769770	0.14985647
21	-0.17881718	0.44506546	0.01535262	0.14810396	-0.66545077	-0.00288130
22	-0.00024875	0.07865423	0.00403017	0.04082195	-0.13392098	-0.17018998

Intensities

=====

Intensity (degeneracy not counted)	Frequency cm-1	Dipole Strength 1e-40 esu2 cm2	Absorption km/mole
	-----	-----	-----
	80.049998	52.744044	1.058310
	226.951985	26.737661	1.521022
	247.550358	14.940431	0.927053
	269.845725	8.386761	0.567267
	291.422016	9.890349	0.722457
	468.239558	3.345282	0.392626
	515.969928	39.345498	5.088591
	726.304732	12.190479	2.219309
	753.205282	6.316212	1.192472
	817.940591	25.687765	5.266549
	957.672608	585.625063	140.577168
	990.230172	195.558452	48.538999
	1181.840136	1.300525	0.385262
	1229.384492	6.754918	2.081545
	1390.263464	55.585685	19.370380
	1402.236500	25.254745	8.876512
	1452.771714	11.830442	4.308007

2941.625541	4.007152	2.954617
2951.358479	11.202743	8.287517
3037.509706	13.860464	10.552941
3054.283134	17.444944	13.355401
3091.462322	4.098698	3.176054

=== AAA ===

Symmetry Displacements

3	1			2		
	-----			-----		
1.Re	0.000	0.000	0.039	0.000	0.000	0.000
0.000 0.000	0.000					
2.O	0.000	0.000	-0.107	0.000	0.000	0.183
0.000 0.000	0.000					
3.O	0.000	0.000	-0.105	0.000	0.000	-0.044
0.000 0.000	0.178					
4.C	0.000	0.000	-0.076	0.000	0.000	-0.022
0.000 0.000	-0.028					
5.H	0.009	0.000	-0.072	0.024	0.034	-0.027
0.029 -0.027	0.000					
6.H	-0.009	0.000	-0.072	-0.024	-0.034	-0.027
-0.029 0.027	0.000					
7.H	0.000	0.000	-0.073	0.000	0.000	0.026
0.000 0.000	-0.052					
8.C	-0.020	0.000	-0.092	-0.056	-0.077	-0.064
-0.067 0.063	-0.082					
9.H	-0.025	0.000	-0.102	-0.070	-0.096	-0.086
-0.083 0.079	-0.117					
10.H	-0.023	0.000	-0.085	-0.063	-0.087	-0.015
-0.075 0.071	-0.085					
11.H	-0.023	0.000	-0.088	-0.064	-0.088	-0.088
-0.076 0.072	-0.038					
12.C	0.020	0.000	-0.092	0.056	0.077	-0.064
0.067 -0.063	-0.082					
13.H	0.023	0.000	-0.085	0.063	0.087	-0.015
0.075 -0.071	-0.085					
14.H	0.025	0.000	-0.102	0.070	0.096	-0.086
0.083 -0.079	-0.117					
15.H	0.023	0.000	-0.088	0.064	0.088	-0.088
0.076 -0.072	-0.038					
6	4			5		
	-----			-----		
1.Re	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000
0.000 0.000	0.000					
2.O	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000
0.000 0.000	0.000					
3.O	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000
0.000 0.000	0.000					
4.C	0.000	0.000	0.234	0.000	0.000	0.000
0.000 0.000	0.000					
5.H	-0.023	0.001	-0.134	0.011	0.000	-0.264

0.107	0.000	0.161					
6.H		0.023	-0.001	-0.134	-0.011	0.000	-0.264
-0.107	0.000	0.161					
7.H		0.000	0.000	-0.129	0.000	0.000	-0.266
0.000	0.000	0.143					
8.C		0.054	-0.002	-0.080	-0.024	0.000	0.106
0.115	0.000	0.000					
9.H		0.067	-0.002	-0.054	-0.031	0.000	-0.300
-0.307	0.000	-0.200					
10.H		0.061	-0.002	-0.097	-0.028	0.000	-0.280
-0.277	0.000	-0.002					
11.H		0.061	-0.002	-0.092	-0.028	0.000	-0.283
-0.280	0.000	-0.031					
12.C		-0.054	0.002	-0.080	0.024	0.000	0.106
-0.115	0.000	0.000					
13.H		-0.061	0.002	-0.097	0.028	0.000	-0.280
0.277	0.000	-0.002					
14.H		-0.067	0.002	-0.054	0.031	0.000	-0.300
0.307	0.000	-0.200					
15.H		-0.061	0.002	-0.092	0.028	0.000	-0.283
0.280	0.000	-0.031					

			7			8	
9							
1.Re	0.000	0.000	0.000		0.000	0.000	0.000
0.000	0.000	0.000					
2.O	0.000	0.000	0.000		0.000	0.000	0.000
0.000	0.000	0.000					
3.O	0.000	0.000	0.000		0.000	0.000	0.000
0.000	0.000	0.000					
4.C	0.000	0.000	0.000		0.000	0.000	0.000
0.000	0.000	0.000					
5.H	0.000	0.117	-0.065		-0.043	0.018	0.585
0.691	0.001	0.000					
6.H	0.000	-0.117	-0.065		0.043	-0.018	0.585
-0.691	-0.001	0.000					
7.H	0.000	0.000	0.134		0.000	0.000	-0.226
0.000	0.000	-0.047					
8.C	0.000	0.110	0.000		0.000	0.000	0.000
0.000	0.000	0.000					
9.H	-0.001	-0.335	0.017		0.124	-0.053	-0.105
0.078	-0.003	0.039					
10.H	-0.001	-0.302	0.107		0.112	-0.048	-0.171
0.070	-0.003	-0.010					
11.H	-0.001	-0.306	-0.126		0.113	-0.048	-0.196
0.071	-0.003	-0.005					
12.C	0.000	-0.110	0.000		0.000	0.000	0.000
0.000	0.000	0.000					
13.H	0.001	0.302	0.107		-0.112	0.048	-0.171
-0.070	0.003	-0.010					
14.H	0.001	0.335	0.017		-0.124	0.053	-0.105
-0.078	0.003	0.039					
15.H	0.001	0.306	-0.126		-0.113	0.048	-0.196
-0.071	0.003	-0.005					

-----				-----		
1.Re	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000
0.000 0.000	0.000					
2.O	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000
0.000 0.000	0.000					
3.O	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000
0.000 0.000	0.000					
4.C	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000
0.000 0.000	0.000					
5.H	0.000	0.690	0.000	0.000	0.000	0.000
0.000 0.000	0.000					
6.H	0.000	-0.690	0.000	0.000	0.000	0.000
0.000 0.000	0.000					
7.H	0.000	0.000	-0.026	0.000	0.000	0.879
0.000 0.000	0.000					
8.C	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000
0.000 0.000	0.000					
9.H	-0.003	0.081	-0.001	0.110	0.061	-0.106
-0.124 0.017	0.551					
10.H	-0.003	0.073	-0.021	0.099	0.055	-0.193
-0.112 0.015	-0.275					
11.H	-0.003	0.074	0.035	0.100	0.056	-0.140
-0.113 0.015	-0.275					
12.C	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000
0.000 0.000	0.000					
13.H	0.003	-0.073	-0.021	-0.099	-0.055	-0.193
0.112 -0.015	-0.275					
14.H	0.003	-0.081	-0.001	-0.110	-0.061	-0.106
0.124 -0.017	0.551					
15.H	0.003	-0.074	0.035	-0.100	-0.056	-0.140
0.113 -0.015	-0.275					

13				14		
15	-----			-----		
1.Re	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000
0.000 0.000	0.000					
2.O	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000
0.000 0.000	0.000					
3.O	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000
0.000 0.000	0.000					
4.C	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000
0.000 0.000	0.000					
5.H	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000
0.000 0.000	0.000					
6.H	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000
0.000 0.000	0.000					
7.H	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000
0.000 0.000	0.000					
8.C	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000
0.000 0.000	0.000					
9.H	0.556	0.004	0.000	0.000	0.569	0.000
0.000 0.000	0.000					
10.H	-0.304	0.003	0.014	0.005	-0.272	0.104
0.024 0.177	0.465					
11.H	-0.307	0.003	-0.014	0.005	-0.275	-0.104
0.024 0.179	-0.465					
12.C	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000

```

0.000    0.000    0.000
   13.H           0.304 -0.003    0.014           -0.005    0.272    0.104
-0.024 -0.177    0.465
   14.H           -0.556 -0.004    0.000           0.000 -0.569    0.000
0.000    0.000    0.000
   15.H           0.307 -0.003   -0.014           -0.005    0.275   -0.104
-0.024 -0.179   -0.465

```

	16			17		
	-----			-----		
1.Re	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000
2.O	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000
3.O	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000
4.C	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000
5.H	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000
6.H	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000
7.H	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000
8.C	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000
9.H	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000
10.H	0.501	0.000	0.000	0.000	0.501	0.000
11.H	-0.495	0.000	0.000	0.000	-0.495	0.000
12.C	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000
13.H	-0.501	0.000	0.000	0.000	-0.501	0.000
14.H	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000
15.H	0.495	0.000	0.000	0.000	0.495	0.000

Largest computed component in inactive x Dipole derivative= 0.2385E-17
(symmetry index= 2)
Deviation may result from numerical integration and/or the non-linearity
in the transformations between Cartesian and Z-matrix coordinates.

Largest computed component in inactive y Dipole derivative= 0.7373E-17
(symmetry index= 2)
Deviation may result from numerical integration and/or the non-linearity
in the transformations between Cartesian and Z-matrix coordinates.

Frequencies and Normal Modes

```

=====
6          1          2          3          4          5
          7          8
509.5039  113.0778  205.0068  239.0230  263.7567  388.4565
          744.1922  760.6060
          -----
1  -0.14829776  0.71052752  0.05856576 -0.08820338 -0.31830429
-0.58962405 -0.05794469  0.00826276
2   0.09979155 -0.38601990 -0.70667330 -0.38319073 -0.18948597
-0.39029746 -0.04642702  0.05745875
3  -0.06972590 -0.56235806  0.45959898  0.35732576 -0.26722966
-0.51271588 -0.03353928 -0.04248761
4   0.07882343  0.02870097  0.00993355  0.02135601  0.67718805
-0.41015496  0.07253536 -0.00126929
5  -0.09646548 -0.02910369 -0.01715276  0.00078528 -0.24896508
0.15162230 -0.04932810 -0.00786647
6   0.08296160 -0.00127873  0.00396300 -0.00724086  0.13041933
-0.09011670  0.58458928  0.01150586

```

7	0.21934169	0.02304533	0.00730308	-0.05159750	-0.04544144
-0.00621724	-0.00515227	-0.64615758			
8	-0.31840509	-0.02566943	-0.09730261	0.08490613	0.41088332
-0.13586600	-0.17476855	-0.06425492			
9	0.09475328	-0.01010243	0.00820791	0.01179594	0.13456201
0.04210476	-0.18588553	0.01476827			
10	0.62986204	0.04454397	0.17205871	-0.11182927	-0.14763475
0.00221487	-0.02083449	0.10333442			
11	0.57110613	0.03885638	0.14289752	-0.07737485	0.18384311
-0.12881881	-0.18687073	0.07582023			
12	-0.02356556	-0.00432340	-0.00313695	0.00852590	0.06172879
0.02629387	-0.72408675	-0.10371038			
13	0.02262156	0.01405566	-0.04491408	0.07880203	0.00219241
-0.00327023	-0.07265656	-0.01527682			
14	0.16517433	0.10376422	-0.32251673	0.56106924	-0.05142219
-0.00751241	0.01470861	-0.05581997			
15	-0.03820973	-0.02095571	0.03632469	-0.16855788	0.00824490
0.10112004	-0.72861691				-0.00622757
16	0.17041578	0.10763214	-0.34130108	0.57673656	-0.05138640
-0.00993120	0.02878627	-0.10597705			
17	-0.02400121	-0.02066769	0.04561373	-0.08107466	0.00547553
0.00549735	0.05092326	0.01082532			

	9	10	11	12	13
14	15	16			
	876.8534	1185.3423	1386.8620	1403.3545	1412.6493
2943.0275	3050.1445	3069.8352			
-----	-----	-----	-----	-----	-----
1	0.09084929	0.03417113	-0.00260999	-0.00547243	-0.00817657
-0.00418651	0.00226121	-0.00097621			
2	0.03247416	0.00113592	0.00049421	-0.00627099	-0.00395473
0.00040821	0.00157058	-0.00049957			
3	0.05222343	0.00261891	-0.00352799	-0.00290748	-0.00131184
0.00097608	0.00111688	-0.00068989			
4	-0.36275705	0.00258659	-0.12800973	-0.11567439	-0.22608769
-0.00563366	0.07882590	-0.37545534			
5	-0.18017422	0.79930011	-0.10926931	-0.18899807	-0.11639517
-0.29067450	0.03658784	-0.28803045			
6	0.29252904	0.31368107	0.03715170	0.36088494	-0.11760521
0.10721207	-0.52563530	0.01182871			
7	-0.01112598	-0.00681853	-0.40110789	0.09786924	0.15849942
-0.02615269	0.09331439	-0.02538787			
8	0.16121639	0.28707552	-0.08436062	-0.17059971	0.03299090
-0.15397987	0.00632564	0.69534189			
9	0.82503577	-0.02069559	-0.14764659	-0.22288534	-0.23505885
-0.02603164	0.15204179	-0.32138260			
10	-0.12346149	0.00240626	-0.18803195	-0.25008289	-0.48832472
0.01524368	-0.09958935	0.39903156			
11	0.10059508	0.26586633	0.32833602	0.12564366	0.55617881
-0.14198779	0.10746986	0.00848338			
12	-0.06958122	0.09996627	0.04817278	0.32814260	-0.19014627
0.29583126	-0.44949274	-0.09600574			
13	0.00787334	-0.17993137	0.15408518	0.48456191	-0.34327854
-0.75118621	0.09579727	0.02668317			
14	-0.02177857	0.02570980	0.52853411	-0.26950572	-0.15256539
0.10727944	-0.00138499	-0.02747291			
15	0.02486776	-0.00835996	0.38108385	-0.15276618	-0.13536826
-0.00822276	-0.03017344	0.02665755			
16	-0.00130268	0.03196917	-0.41139149	0.21683470	0.11610231

0.05878478 0.07047933 0.04479547
17 0.01331491 0.25266917 0.13202510 0.41040133 -0.28824644
0.43780156 0.66761805 0.12569491

17

3090.1592

1 0.00040740
2 0.00016339
3 0.00007611
4 0.02530970
5 0.02722691
6 -0.09324873
7 -0.56850541
8 -0.07976460
9 0.03374086
10 0.07268455
11 0.09668072
12 -0.00431386
13 -0.05045832
14 -0.38528317
15 0.48774077
16 0.50425191
17 -0.03774031

Intensities
=====

Frequency Intensity (degeneracy not counted) cm-1	Dipole Strength 1e-40 esu2 cm2	Absorption km/mole
-----	-----	-----
113.077827	5.684426	0.161117
205.006838	208.019046	10.689306
239.023024	3.636835	0.217892
263.756676	13.294944	0.878958
388.456456	1.301600	0.126735
509.503902	111.561530	14.247545
744.192196	215.377503	40.175706
760.605997	1.563243	0.298033
876.853401	0.252043	0.055396
1185.342252	8.709874	2.587818
1386.861968	1.517324	0.527460
1403.354528	0.173193	0.060922
1412.649252	13.870971	4.911558
2943.027545	1.461210	1.077916
3050.144514	1.030749	0.788046
3069.835238	21.379478	16.450922
3090.159223	0.016222	0.012565

Zero-Point Energy : 0.113270 a.u.
===== 3.082246 eV

=====

Vibrations and Normal Modes *** (cartesian coordinates, NOT

mass-weighted) ***

=====

The headers on the normal mode eigenvectors below give the Frequency in cm⁻¹
(a negative value means an imaginary frequency, no output for
(almost-)zero frequencies)

80.050				113.078		
205.007						
-----				-----		
1.Re	0.003	0.013	0.000	0.000	0.000	0.006
0.000 0.000	0.085					
2.O	-0.056	0.045	0.000	0.000	0.000	-0.035
0.000 0.000	-0.450					
3.O	0.065	0.042	0.000	0.000	0.000	0.001
0.000 0.000	-0.485					
4.C	0.007	0.215	0.000	0.000	0.000	-0.030
0.000 0.000	-0.071					
5.H	0.068	0.273	0.000	-0.087	-0.472	0.169
-0.081 0.109	-0.164					
6.H	0.068	0.273	0.000	0.087	0.472	0.169
0.081 -0.109	-0.164					
7.H	-0.141	0.255	0.000	0.000	0.000	-0.644
0.000 0.000	0.041					
8.C	-0.022	-0.231	0.000	-0.019	-0.012	0.004
0.143 -0.010	0.000					
9.H	-0.046	-0.368	-0.008	-0.030	-0.110	0.011
0.207 0.158	0.093					
10.H	-0.074	-0.231	0.136	-0.096	0.053	0.004
0.317 -0.151	-0.002					
11.H	0.025	-0.249	-0.134	0.078	0.029	-0.007
-0.010 -0.089	-0.009					
12.C	-0.022	-0.231	0.000	0.019	0.012	0.004
-0.143 0.010	0.000					
13.H	-0.074	-0.231	-0.136	0.096	-0.053	0.004
-0.317 0.151	-0.002					
14.H	-0.046	-0.368	0.008	0.030	0.110	0.011
-0.207 -0.158	0.093					
15.H	0.025	-0.249	0.134	-0.078	-0.029	-0.007
0.010 0.089	-0.009					
226.952				239.023		
247.550						
-----				-----		
1.Re	0.008	0.049	0.000	0.000	0.000	-0.004
-0.010 0.000	0.000					
2.O	0.230	-0.073	0.000	0.000	0.000	0.216
-0.044 0.021	0.000					
3.O	-0.177	-0.035	0.000	0.000	0.000	-0.170
-0.072 -0.035	0.000					
4.C	-0.007	-0.189	0.000	0.000	0.000	0.000
0.016 0.043	0.000					
5.H	-0.116	-0.292	-0.001	-0.010	-0.130	0.062
0.036 0.060	0.001					
6.H	-0.116	-0.292	0.001	0.010	0.130	0.062
0.036 0.060	-0.001					
7.H	0.246	-0.256	0.000	0.000	0.000	-0.161

-0.029	0.056	0.000						
8.C		-0.068	-0.132	0.023		-0.015	-0.134	0.000
0.107	-0.012	-0.034						
9.H		-0.081	-0.041	-0.024		0.018	0.087	0.003
0.207	0.321	0.064						
10.H		0.059	-0.284	0.166		0.233	-0.373	0.096
0.422	-0.256	-0.098						
11.H		-0.255	-0.246	-0.073		-0.310	-0.304	-0.105
-0.194	-0.167	-0.079						
12.C		-0.068	-0.132	-0.023		0.015	0.134	0.000
0.107	-0.012	0.034						
13.H		0.059	-0.284	-0.166		-0.233	0.373	0.096
0.422	-0.256	0.098						
14.H		-0.081	-0.041	0.024		-0.018	-0.087	0.003
0.207	0.321	-0.064						
15.H		-0.255	-0.246	0.073		0.310	0.304	-0.105
-0.194	-0.167	0.079						

			263.757				269.846	
291.422								
			-----				-----	
			-----				-----	
1.Re		0.000	0.000	-0.004		-0.003	0.012	0.000
-0.071	0.010	0.000						
2.O		0.000	0.000	-0.069		-0.081	0.069	0.000
0.263	-0.209	0.000						
3.O		0.000	0.000	0.102		-0.147	-0.062	0.000
0.236	0.190	0.000						
4.C		0.000	0.000	0.011		0.050	-0.079	0.000
-0.056	-0.035	0.000						
5.H		0.004	-0.119	0.075		0.032	-0.105	0.006
-0.073	-0.055	0.008						
6.H		-0.004	0.119	0.075		0.032	-0.105	-0.006
-0.073	-0.055	-0.008						
7.H		0.000	0.000	-0.134		0.127	-0.099	0.000
-0.040	-0.044	0.000						
8.C		0.000	0.053	0.002		0.107	-0.037	-0.035
0.192	-0.035	-0.108						
9.H		0.056	0.438	0.004		0.121	-0.373	0.082
0.247	-0.190	0.044						
10.H		0.307	-0.188	-0.049		-0.127	0.170	-0.069
0.101	0.069	-0.198						
11.H		-0.349	-0.098	0.044		0.452	0.100	-0.116
0.374	0.027	-0.199						
12.C		0.000	-0.053	0.002		0.107	-0.037	0.035
0.192	-0.035	0.108						
13.H		-0.307	0.188	-0.049		-0.127	0.170	0.069
0.101	0.069	0.198						
14.H		-0.056	-0.438	0.004		0.121	-0.373	-0.082
0.247	-0.190	-0.044						
15.H		0.349	0.098	0.044		0.452	0.100	0.116
0.374	0.027	0.199						

			388.456				468.240	
509.504								
			-----				-----	
			-----				-----	
1.Re		0.000	0.000	0.021		0.014	0.002	0.000
0.000	0.000	0.048						

2.O	0.000	0.000	0.001	0.006	0.018	0.000
0.000 0.000	0.017					
3.O	0.000	0.000	0.009	-0.010	-0.011	0.000
0.000 0.000	0.025					
4.C	0.000	0.000	-0.326	-0.358	-0.023	0.000
0.000 0.000	0.058					
5.H	-0.093	0.164	-0.448	-0.267	0.057	0.006
-0.015 0.002	0.053					
6.H	0.093	-0.164	-0.448	-0.267	0.057	-0.006
0.015 -0.002	0.053					
7.H	0.000	0.000	-0.151	-0.461	0.011	0.000
0.000 0.000	0.054					
8.C	-0.155	0.014	0.028	0.078	-0.011	0.210
-0.066 0.004	-0.356					
9.H	-0.222	0.067	-0.113	0.151	-0.043	0.344
-0.099 0.008	-0.403					
10.H	-0.154	-0.014	0.119	0.096	0.008	0.111
-0.084 -0.008	-0.279					
11.H	-0.242	-0.005	0.106	0.158	-0.001	0.122
-0.106 0.003	-0.305					
12.C	0.155	-0.014	0.028	0.078	-0.011	-0.210
0.066 -0.004	-0.356					
13.H	0.154	0.014	0.119	0.096	0.008	-0.111
0.084 0.008	-0.279					
14.H	0.222	-0.067	-0.113	0.151	-0.043	-0.344
0.099 -0.008	-0.403					
15.H	0.242	0.005	0.106	0.158	-0.001	-0.122
0.106 -0.003	-0.305					

		515.970			726.305	
744.192						
		-----			-----	

1.Re	-0.036	-0.001	0.000	0.004	-0.002	0.000
0.000 0.000	-0.002					
2.O	0.016	-0.026	0.000	-0.028	-0.018	0.000
0.000 0.000	-0.002					
3.O	0.036	0.019	0.000	0.028	-0.033	0.000
0.000 0.000	0.002					
4.C	0.318	0.037	0.000	-0.053	0.123	0.000
0.000 0.000	0.025					
5.H	0.197	-0.070	-0.005	-0.361	-0.253	0.045
-0.068 -0.021	0.001					
6.H	0.197	-0.070	0.005	-0.361	-0.253	-0.045
0.068 0.021	0.001					
7.H	0.458	-0.007	0.000	0.721	-0.095	0.000
0.000 0.000	-0.026					
8.C	0.033	-0.003	0.268	-0.005	0.020	-0.010
0.085 0.001	0.000					
9.H	0.089	0.013	0.361	0.024	-0.051	0.064
-0.187 -0.004	-0.498					
10.H	0.077	-0.008	0.174	0.034	-0.028	0.033
-0.087 0.031	0.356					
11.H	0.064	-0.005	0.217	0.001	-0.015	-0.131
-0.119 -0.024	0.231					
12.C	0.033	-0.003	-0.268	-0.005	0.020	0.010
-0.085 -0.001	0.000					
13.H	0.077	-0.008	-0.174	0.034	-0.028	-0.033
0.087 -0.031	0.356					
14.H	0.089	0.013	-0.361	0.024	-0.051	-0.064

0.187	0.004	-0.498					
15.H		0.064	-0.005	-0.217		0.001	-0.015
0.119	0.024	0.231					0.131

			753.205			760.606	
817.941							
1.Re	0.001	0.002	0.000		0.000	0.000	0.000
-0.004	0.000	0.000					
2.O	0.015	0.018	0.000		0.000	0.000	0.010
-0.028	-0.025	0.000					
3.O	-0.016	0.015	0.000		0.000	0.000	-0.012
-0.020	0.017	0.000					
4.C	-0.012	0.033	0.000		0.000	0.000	-0.001
-0.014	0.013	0.000					
5.H	-0.083	-0.049	0.009		0.015	-0.002	0.007
-0.051	-0.031	0.006					
6.H	-0.083	-0.049	-0.009		-0.015	0.002	0.007
-0.051	-0.031	-0.006					
7.H	0.156	-0.013	0.000		0.000	0.000	-0.002
0.074	-0.012	0.000					
8.C	-0.003	-0.082	-0.004		0.001	-0.084	-0.002
0.104	-0.001	0.010					
9.H	0.010	0.200	-0.053		0.002	0.206	-0.075
-0.158	-0.008	-0.470					
10.H	-0.059	0.099	-0.420		-0.061	0.100	-0.418
-0.079	0.037	0.379					
11.H	0.062	0.092	0.475		0.053	0.090	0.495
-0.106	-0.022	0.270					
12.C	-0.003	-0.082	0.004		-0.001	0.084	-0.002
0.104	-0.001	-0.010					
13.H	-0.059	0.099	0.420		0.061	-0.100	-0.418
-0.079	0.037	-0.379					
14.H	0.010	0.200	0.053		-0.002	-0.206	-0.075
-0.158	-0.008	0.470					
15.H	0.062	0.092	-0.475		-0.053	-0.090	0.495
-0.106	-0.022	-0.270					

			876.853			957.673	
990.230							
1.Re	0.000	0.000	-0.004		0.001	-0.093	0.000
0.057	0.004	0.000					
2.O	0.000	0.000	0.004		0.252	0.462	0.000
-0.352	-0.547	0.000					
3.O	0.000	0.000	0.002		-0.257	0.545	0.000
-0.283	0.503	0.000					
4.C	0.000	0.000	0.100		-0.004	0.078	0.000
0.023	-0.002	0.000					
5.H	-0.640	0.088	-0.245		-0.158	-0.135	0.037
-0.025	-0.012	-0.015					
6.H	0.640	-0.088	-0.245		-0.158	-0.135	-0.037
-0.025	-0.012	0.015					
7.H	0.000	0.000	-0.152		0.294	-0.009	0.000
-0.014	0.010	0.000					
8.C	-0.012	0.000	0.005		0.002	0.042	0.000
-0.047	-0.003	0.037					

9.H	0.010	0.025	0.039	-0.004	-0.082	0.023
0.030	0.015	0.162				
10.H	0.016	-0.008	-0.050	0.045	-0.055	0.178
0.060	-0.008	-0.228				
11.H	0.014	0.006	-0.020	-0.032	-0.037	-0.193
0.080	-0.004	-0.163				
12.C	0.012	0.000	0.005	0.002	0.042	0.000
-0.047	-0.003	-0.037				
13.H	-0.016	0.008	-0.050	0.045	-0.055	-0.178
0.060	-0.008	0.228				
14.H	-0.010	-0.025	0.039	-0.004	-0.082	-0.023
0.030	0.015	-0.162				
15.H	-0.014	-0.006	-0.020	-0.032	-0.037	0.193
0.080	-0.004	0.163				

	1181.840			1185.342		
1229.384	-----			-----		
	-----			-----		
1.Re	-0.001	0.000	0.000	0.000	0.000	0.001
0.000	0.000	0.000				
2.O	0.004	0.008	0.000	0.000	0.000	-0.004
-0.001	-0.008	0.000				
3.O	0.002	-0.005	0.000	0.000	0.000	-0.003
-0.001	0.011	0.000				
4.C	-0.059	-0.011	0.000	0.000	0.000	-0.002
-0.100	-0.021	0.000				
5.H	0.248	0.114	0.061	0.017	0.007	0.006
0.423	0.214	0.097				
6.H	0.248	0.114	-0.061	-0.017	-0.007	0.006
0.423	0.214	-0.097				
7.H	0.297	-0.089	0.000	0.000	0.000	-0.001
0.498	-0.153	0.000				
8.C	0.017	-0.001	0.079	0.017	-0.001	0.088
-0.014	-0.001	-0.042				
9.H	-0.169	0.028	-0.315	-0.186	0.021	-0.338
0.089	0.017	0.169				
10.H	0.006	0.113	-0.324	0.007	0.133	-0.392
0.004	-0.081	0.199				
11.H	-0.019	-0.118	-0.324	-0.028	-0.141	-0.387
0.040	0.081	0.178				
12.C	0.017	-0.001	-0.079	-0.017	0.001	0.088
-0.014	-0.001	0.042				
13.H	0.006	0.113	0.324	-0.007	-0.133	-0.392
0.004	-0.081	-0.199				
14.H	-0.169	0.028	0.315	0.186	-0.021	-0.338
0.089	0.017	-0.169				
15.H	-0.019	-0.118	0.324	0.028	0.141	-0.387
0.040	0.081	-0.178				

	1386.862			1390.263		
1402.236	-----			-----		
	-----			-----		
1.Re	0.000	0.000	0.000	0.000	0.001	0.000
-0.001	0.000	0.000				
2.O	0.000	0.000	0.000	0.000	-0.001	0.000
0.001	0.001	0.000				
3.O	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000

0.002	-0.004	0.000					
4.C		0.000	0.000	0.031	-0.005	0.002	0.000
-0.004	0.024	0.000					
5.H		0.096	0.184	-0.030	0.041	-0.019	0.029
0.073	-0.179	0.135					
6.H		-0.096	-0.184	-0.030	0.041	-0.019	-0.029
0.073	-0.179	-0.135					
7.H		0.000	0.000	-0.327	-0.014	0.005	0.000
-0.111	0.040	0.000					
8.C		0.000	0.046	0.001	-0.004	0.050	0.002
-0.043	-0.005	0.012					
9.H		-0.081	-0.460	-0.022	-0.097	-0.502	-0.035
-0.117	0.129	-0.196					
10.H		0.256	-0.125	-0.184	0.302	-0.157	-0.202
0.257	-0.262	0.076					
11.H		-0.167	0.010	0.197	-0.156	0.028	0.224
0.431	0.199	-0.025					
12.C		0.000	-0.046	0.001	-0.004	0.050	-0.002
-0.043	-0.005	-0.012					
13.H		-0.256	0.125	-0.184	0.302	-0.157	0.202
0.257	-0.262	-0.076					
14.H		0.081	0.460	-0.022	-0.097	-0.502	0.035
-0.117	0.129	0.196					
15.H		0.167	-0.010	0.197	-0.156	0.028	-0.224
0.431	0.199	0.025					

			1403.355			1412.649	
1452.772							
			-----			-----	
			-----			-----	
1.Re		0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000
-0.001	-0.001	0.000					
2.O		0.000	0.000	0.001	0.000	0.000	0.000
0.001	0.004	0.000					
3.O		0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.001
0.001	0.000	0.000					
4.C		0.000	0.000	0.027	0.000	0.000	-0.054
0.025	-0.060	0.000					
5.H		0.111	0.170	-0.019	-0.178	-0.328	0.053
-0.273	0.439	-0.373					
6.H		-0.111	-0.170	-0.019	0.178	0.328	0.053
-0.273	0.439	0.373					
7.H		0.000	0.000	-0.305	0.000	0.000	0.587
0.213	-0.090	0.000					
8.C		-0.042	-0.012	0.010	-0.023	0.019	0.007
-0.014	0.002	0.005					
9.H		-0.095	0.187	-0.176	-0.097	-0.155	-0.104
-0.049	0.010	-0.081					
10.H		0.209	-0.233	0.098	0.253	-0.190	-0.061
0.120	-0.107	0.011					
11.H		0.435	0.187	-0.053	0.136	0.105	0.076
0.153	0.073	0.000					
12.C		0.042	0.012	0.010	0.023	-0.019	0.007
-0.014	0.002	-0.005					
13.H		-0.209	0.233	0.098	-0.253	0.190	-0.061
0.120	-0.107	-0.011					
14.H		0.095	-0.187	-0.176	0.097	0.155	-0.104
-0.049	0.010	0.081					
15.H		-0.435	-0.187	-0.053	-0.136	-0.105	0.076
0.153	0.073	0.000					

2951.358		2941.626			2943.028		
		-----			-----		
1.Re		0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000
0.000	0.000	0.000					
2.O		0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	-0.001
0.000	0.000	0.000					
3.O		0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	-0.001
0.000	0.000	0.000					
4.C		0.001	0.003	0.000	0.000	0.000	0.001
0.040	0.032	0.000					
5.H		-0.003	0.007	0.008	0.003	-0.005	-0.007
-0.143	0.192	0.356					
6.H		-0.003	0.007	-0.008	-0.003	0.005	-0.007
-0.143	0.192	-0.356					
7.H		-0.014	-0.054	0.000	0.000	0.000	-0.001
-0.184	-0.770	0.000					
8.C		0.019	-0.003	-0.030	-0.020	0.003	0.031
-0.002	0.000	0.002					
9.H		-0.522	0.074	0.261	0.525	-0.074	-0.264
0.031	-0.005	-0.016					
10.H		0.175	0.205	0.049	-0.173	-0.203	-0.049
-0.004	-0.005	-0.002					
11.H		0.115	-0.243	0.056	-0.115	0.241	-0.057
-0.008	0.012	-0.003					
12.C		0.019	-0.003	0.030	0.020	-0.003	0.031
-0.002	0.000	-0.002					
13.H		0.175	0.205	-0.049	0.173	0.203	-0.049
-0.004	-0.005	0.002					
14.H		-0.522	0.074	-0.261	-0.525	0.074	-0.264
0.031	-0.005	0.016					
15.H		0.115	-0.243	-0.056	0.115	-0.241	-0.057
-0.008	0.012	0.003					
3054.283		3037.510			3050.145		
		-----			-----		
1.Re		0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000
0.000	0.000	0.000					
2.O		0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000
0.000	0.000	0.000					
3.O		0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000
0.000	0.000	0.000					
4.C		0.022	-0.083	0.000	0.000	0.000	0.019
0.005	-0.017	0.000					
5.H		-0.201	0.218	0.469	0.049	-0.060	-0.113
-0.046	0.048	0.099					
6.H		-0.201	0.218	-0.469	-0.049	0.060	-0.113
-0.046	0.048	-0.099					
7.H		0.153	0.554	0.000	0.000	0.000	0.006
0.029	0.107	0.000					
8.C		-0.012	0.006	-0.001	-0.060	0.011	-0.003
0.061	-0.006	0.003					
9.H		0.054	-0.006	-0.030	0.313	-0.044	-0.170
-0.319	0.046	0.171					
10.H		0.035	0.046	0.013	0.237	0.306	0.086

-0.256	-0.328	-0.094					
11.H		0.049	-0.111	0.030		0.166	-0.390
-0.151	0.358	-0.099					0.107
12.C		-0.012	0.006	0.001		0.060	-0.011
0.061	-0.006	-0.003					-0.003
13.H		0.035	0.046	-0.013		-0.237	-0.306
-0.256	-0.328	0.094					0.086
14.H		0.054	-0.006	0.030		-0.313	-0.306
-0.319	0.046	-0.171					0.044
15.H		0.049	-0.111	-0.030		-0.166	-0.170
-0.151	0.358	0.099					0.390
							0.107

			3069.835			3090.159	
3091.462							
1.Re		0.000	0.000	0.000		0.000	0.000
0.000	0.000	0.000				0.000	0.000
2.O		0.000	0.000	0.000		0.000	0.000
0.000	0.000	0.000				0.000	0.000
3.O		0.000	0.000	0.000		0.000	0.000
0.000	0.000	0.000				0.000	0.000
4.C		0.000	0.000	0.092		0.000	0.000
-0.001	0.006	0.000				0.000	0.006
5.H		0.258	-0.299	-0.564		0.017	-0.019
0.014	-0.015	-0.031				-0.017	-0.037
6.H		-0.258	0.299	-0.564		0.019	-0.037
0.014	-0.015	0.031				0.000	0.000
7.H		0.000	0.000	0.023		0.000	-0.001
-0.014	-0.047	0.000				-0.011	-0.066
8.C		0.012	0.002	0.000		-0.011	0.001
0.008	0.066	-0.001				0.006	-0.014
9.H		-0.071	0.011	0.037		-0.014	-0.004
0.008	0.013	-0.003				0.324	0.377
10.H		-0.066	-0.084	-0.027		0.377	0.115
-0.313	-0.363	-0.111				0.421	-0.122
11.H		-0.019	0.048	-0.015		-0.204	0.421
0.210	-0.436	0.126				0.421	-0.122
12.C		-0.012	-0.002	0.000		0.011	0.066
0.008	0.066	0.001				0.066	0.001
13.H		0.066	0.084	-0.027		-0.324	-0.377
-0.313	-0.363	0.111				-0.377	0.115
14.H		0.071	-0.011	0.037		-0.006	-0.014
0.008	0.013	0.003				0.014	-0.004
15.H		0.019	-0.048	-0.015		0.204	-0.421
0.210	-0.436	-0.126				-0.421	-0.122

List of All Frequencies:

Intensities
=====

Frequency	Dipole Strength	Absorption
Intensity (degeneracy not counted)		
cm-1	1e-40 esu2 cm2	km/mole
-----	-----	-----

80.049998	52.744044	1.058310
113.077827	5.684426	0.161117
205.006838	208.019046	10.689306
226.951985	26.737661	1.521022
239.023024	3.636835	0.217892
247.550358	14.940431	0.927053
263.756676	13.294944	0.878958
269.845725	8.386761	0.567267
291.422016	9.890349	0.722457
388.456456	1.301600	0.126735
468.239558	3.345282	0.392626
509.503902	111.561530	14.247545
515.969928	39.345498	5.088591
726.304732	12.190479	2.219309
744.192196	215.377503	40.175706
753.205282	6.316212	1.192472
760.605997	1.563243	0.298033
817.940591	25.687765	5.266549
876.853401	0.252043	0.055396
957.672608	585.625063	140.577168
990.230172	195.558452	48.538999
1181.840136	1.300525	0.385262
1185.342252	8.709874	2.587818
1229.384492	6.754918	2.081545
1386.861968	1.517324	0.527460
1390.263464	55.585685	19.370380
1402.236500	25.254745	8.876512
1403.354528	0.173193	0.060922
1412.649252	13.870971	4.911558
1452.771714	11.830442	4.308007
2941.625541	4.007152	2.954617
2943.027545	1.461210	1.077916
2951.358479	11.202743	8.287517
3037.509706	13.860464	10.552941
3050.144514	1.030749	0.788046
3054.283134	17.444944	13.355401
3069.835238	21.379478	16.450922
3090.159223	0.016222	0.012565
3091.462322	4.098698	3.176054

=====
Statistical Thermal Analysis *** ideal gas assumed ***
=====

Pressure: 1.000000 atm.
Temperature: 298.150000 K

Moments of Inertia (and direction vectors)
=====

676.1688	769.3874	894.8487

0.0000	0.9999	-0.0109
0.0000	0.0109	0.9999
1.0000	0.0000	0.0000

Temp			
Transl	Rotat	Vibrat	Total

-----	-----	-----	-----

298.15	Entropy (cal/mole-K):		
42.612	27.634	24.166	94.412
	Internal Energy (Kcal/mole):		
0.889	0.889	75.217	76.994
	Constant Volume Heat Capacity (cal/mole-K):		
2.981	2.981	27.681	33.643
