Supporting Information

A Computational Study of Low Coordinate Rhenium Diolates, Metallaoxetanes, Oxo Complexes and Carbenes.

Sanja Narancic and Peter Chen*

Geometry optimization on all structures was performed using DFT BP86 method (quasirelativistic Pauli approach) implemented in ADF program, with DZP basis sets for atoms C, H, O, N and TZP for Re. Small relativistic core potentials, implemented in ADF, are employed for Re, C, O and N. Optimized structures are recalculated (SP) with CCSD/6-311**G in conjunction with small Hay- Wadt[1] relativistic effective core potential for Re. The split of the Hay-Wadt basis set for Re is given below:

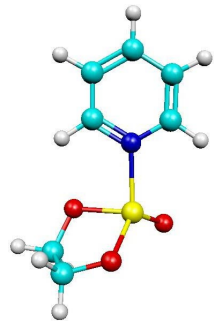
S	2.18500000	-1.62237300
	1.45100000	1.99386470
	0.458500000	0.453116600
S	2.18500000	1.54597520
	1.45100000	-2.07589270
	0.458500000	-1.19223960
	0.231400000	1.22728640
S	0.566000000E-01	1.00000000
P	3.35800000	-0.231866700
	1.27100000	0.745868300
	0.464400000	0.463268600
P	0.496000000	-0.131137000
	0.890000000E-01	1.05036710
P	0.280000000E-01	1.00000000
D	1.11600000	0.468988800
	0.426700000	0.620959100
D	0.137800000	1.00000000

It should be noted that there are in some cases artifactual negative frequencies associated with rotation of the pyridine ligand. The rotation occurs in a six-fold or nearly six-fold potential which accordingly to symmetry

must have exceedingly small barriers. The negative frequency is accordingly an artifact produced by trying to analyze an inherently flat potential with a harmonic model. Moreover, we have rotated the pyridine in steps and found numerically that the potential is indeed flat with ripples no more than 2 kcal/mol. Lastly, it is important for the calculation of the enthalphy and entropy that the proper partition function is used. For the degree of freedom corresponding to the pyridine rotation as well as rotation of the ethylene ligand in the case of the pi complexes, adiabatic free rotor partition functions are used. This is more correct than the typical assumption that all vibrations are harmonic.

(1).P. J. Hay, W. R. Wadt, J. Chem. Phys. 82 (1985) 299-310.

I



CCSD=-629.7095608

ATOMS cartesian

C	0.008309	-0.000353	0.000063
C	1.390669	-0.000856	0.000025
C	2.062039	1.220891	-0.000023
C	1.332423	2.394610	-0.029683
N	-0.030242	2.395609	-0.004960
C	-0.685601	1.203519	0.019057
Re	-1.026972	4.241540	0.084355
O	-2.535736	3.280451	0.709810
C	-3.743837	4.103935	0.574855
C	-3.684458	4.711886	-0.818455
O	-2.278378	5.084319	-1.012926
O	-0.305154	5.123790	1.328080
H	-3.727080	4.882921	1.352214
H	-1.770361	1.253907	0.070553
H	-0.558066	-0.931499	0.005008
H	1.946548	-0.939121	-0.001451
H	3.150512	1.272547	0.004987
H	1.821109	3.366775	-0.060634
H	-4.606839	3.443147	0.734227
H	-3.960174	3.992850	-1.602989
H	-4.286137	5.625347	-0.913430

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)

	33.047			58.123			101.532		
1.C	-0.027	0.021	-0.178	-0.059	0.052	-0.074	-0.137	0.125	0.036
2.C	-0.029	-0.004	0.025	-0.060	0.006	-0.187	-0.138	0.027	0.104
3.C	-0.010	-0.013	0.188	-0.018	-0.016	-0.068	-0.057	-0.019	-0.009
4.C	0.018	0.001	0.130	0.022	0.013	0.132	0.028	0.034	-0.131
5.N	0.013	0.023	-0.063	0.023	0.054	0.204	0.031	0.131	-0.141
6.C	-0.010	0.033	-0.207	-0.016	0.072	0.124	-0.049	0.173	-0.097
7.Re	0.017	0.017	-0.158	0.028	0.045	0.155	0.092	0.167	0.044
8.O	0.089	0.061	0.073	0.014	0.100	0.218	0.187	-0.038	-0.037
9.C	0.069	0.036	0.113	0.001	0.048	0.017	0.086	-0.200	-0.010
10.C	-0.072	-0.099	0.048	0.068	-0.190	-0.080	0.054	-0.089	0.038
11.O	-0.095	-0.108	-0.127	0.066	-0.149	-0.037	0.009	0.138	0.121
12.O	0.115	0.145	-0.305	-0.054	0.201	0.091	0.071	0.090	0.111
13.H	0.138	0.112	0.036	-0.061	0.183	-0.117	-0.059	-0.257	0.049
14.H	-0.015	0.041	-0.343	-0.011	0.106	0.207	-0.045	0.246	-0.148
15.H	-0.044	0.031	-0.314	-0.090	0.070	-0.140	-0.208	0.169	0.093
16.H	-0.044	-0.012	0.058	-0.090	-0.012	-0.361	-0.202	-0.011	0.229
17.H	-0.010	-0.031	0.355	-0.016	-0.055	-0.133	-0.053	-0.095	0.007
18.H	0.039	-0.006	0.244	0.052	0.001	0.226	0.098	-0.005	-0.207
19.H	0.091	0.043	0.263	0.009	0.054	0.084	0.172	-0.333	-0.097
20.H	-0.144	-0.178	0.145	0.166	-0.342	0.025	0.205	-0.076	-0.026
21.H	-0.089	-0.114	0.017	0.027	-0.239	-0.286	-0.083	-0.177	0.072

	142.521			157.462			207.950		
1.C	0.009	-0.027	-0.105	0.031	-0.006	0.001	-0.048	0.093	-0.051
2.C	0.013	0.046	0.106	0.031	-0.045	0.062	-0.051	0.019	-0.087
3.C	-0.039	0.072	0.032	0.065	-0.064	0.021	0.018	-0.016	-0.004
4.C	-0.095	0.029	-0.150	0.098	-0.039	-0.047	0.089	0.033	0.070
5.N	-0.096	-0.041	-0.206	0.096	0.006	-0.080	0.086	0.091	0.030
6.C	-0.057	-0.065	-0.253	0.070	0.015	-0.074	0.027	0.129	0.004
7.Re	0.013	-0.064	0.134	-0.024	-0.015	-0.085	-0.046	-0.005	-0.013
8.O	-0.041	0.014	0.145	0.019	-0.084	-0.111	-0.048	-0.032	-0.064
9.C	0.030	0.119	0.092	0.058	-0.007	0.003	0.019	0.082	0.034
10.C	0.067	-0.082	0.015	-0.047	0.057	0.030	-0.033	-0.154	-0.053

11.O	0.074	-0.063	0.062	-0.014	-0.165	-0.218	-0.072	0.055	0.030
12.O	-0.032	-0.155	0.228	-0.666	0.178	0.139	-0.078	-0.296	0.211
13.H	0.136	0.231	-0.020	0.187	-0.052	0.048	0.230	0.209	-0.096
14.H	-0.065	-0.104	-0.346	0.070	0.042	-0.101	0.031	0.185	0.016
15.H	0.062	-0.059	-0.121	0.001	0.012	0.019	-0.103	0.127	-0.074
16.H	0.055	0.071	0.300	0.005	-0.062	0.140	-0.101	-0.010	-0.162
17.H	-0.042	0.123	0.128	0.067	-0.098	0.048	0.021	-0.084	0.008
18.H	-0.144	0.053	-0.204	0.129	-0.054	-0.076	0.137	0.011	0.151
19.H	-0.031	0.229	0.211	0.031	0.042	0.057	-0.042	0.215	0.250
20.H	0.141	-0.212	0.109	-0.315	0.164	0.027	0.164	-0.367	0.072
21.H	0.044	-0.115	-0.157	0.109	0.176	0.195	-0.200	-0.288	-0.273

	223.769			243.461			290.727		
1.C	-0.086	0.043	0.076	0.056	-0.130	-0.017	-0.077	0.022	-0.027
2.C	-0.085	0.134	-0.047	0.058	-0.012	-0.085	-0.076	0.029	-0.068
3.C	-0.109	0.148	0.034	-0.074	0.056	0.036	-0.046	0.014	-0.007
4.C	-0.152	0.096	0.083	-0.201	-0.023	0.091	-0.029	0.013	-0.011
5.N	-0.136	-0.013	0.075	-0.191	-0.106	0.030	-0.024	-0.004	-0.003
6.C	-0.141	-0.003	0.148	-0.078	-0.184	0.044	-0.061	0.018	0.036
7.Re	0.124	-0.106	-0.105	-0.007	0.130	-0.021	0.036	-0.094	-0.007
8.O	0.149	-0.141	-0.124	0.047	0.047	-0.075	0.042	-0.009	0.103
9.C	0.175	-0.130	-0.053	0.107	0.134	0.026	0.035	0.010	0.035
10.C	0.115	-0.014	-0.020	0.048	-0.015	-0.027	0.143	-0.088	0.024
11.O	0.140	-0.233	-0.224	0.017	0.180	-0.005	0.063	0.355	0.308
12.O	0.055	-0.147	-0.028	-0.080	0.022	0.098	-0.164	0.165	-0.093
13.H	0.201	-0.198	0.015	0.276	0.210	-0.052	0.010	0.049	-0.006
14.H	-0.137	-0.003	0.177	-0.085	-0.300	0.020	-0.056	0.050	0.092
15.H	-0.020	0.004	0.083	0.145	-0.185	-0.062	-0.072	0.019	-0.033
16.H	-0.043	0.160	-0.189	0.149	0.042	-0.214	-0.084	0.025	-0.134
17.H	-0.111	0.176	0.003	-0.080	0.185	0.044	-0.045	-0.013	-0.006
18.H	-0.226	0.133	0.065	-0.273	0.013	0.115	-0.040	0.019	-0.042
19.H	0.164	-0.125	-0.083	0.052	0.241	0.174	0.033	0.010	0.017
20.H	-0.137	0.118	-0.051	0.218	-0.170	0.055	0.567	-0.279	0.049
21.H	0.260	0.101	0.166	-0.103	-0.131	-0.177	-0.154	-0.312	-0.226

	303.477			378.917			391.576		
1.C	-0.016	0.023	-0.064	0.004	-0.004	-0.198	-0.054	0.045	-0.073
2.C	-0.019	0.031	0.025	0.006	-0.001	-0.014	-0.059	0.034	0.084
3.C	-0.024	0.036	0.045	0.011	-0.004	0.218	-0.058	0.037	0.033
4.C	-0.022	0.037	0.058	0.010	-0.010	-0.166	-0.051	0.046	-0.139
5.N	-0.023	0.019	0.045	0.014	-0.004	-0.003	-0.055	0.054	0.052
6.C	-0.015	0.019	-0.062	0.014	-0.002	0.193	-0.034	0.055	0.094
7.Re	-0.126	-0.041	0.103	0.019	0.003	0.016	-0.230	0.025	-0.047
8.O	-0.118	-0.357	-0.328	-0.026	0.002	-0.050	0.125	-0.108	0.366
9.C	0.102	-0.015	0.016	-0.024	0.011	-0.011	0.158	-0.156	0.009
10.C	-0.008	-0.073	-0.015	-0.024	0.006	-0.007	0.204	0.010	0.003
11.O	-0.020	-0.040	0.032	-0.013	-0.011	0.026	0.124	0.088	-0.240
12.O	-0.064	0.099	-0.024	0.001	-0.006	0.033	-0.080	-0.062	-0.086
13.H	0.603	0.034	-0.043	0.001	0.014	-0.014	-0.084	-0.219	0.079
14.H	-0.017	0.003	-0.137	0.028	0.009	0.501	-0.027	0.040	0.225
15.H	-0.016	0.023	-0.135	0.008	-0.007	-0.409	-0.070	0.055	-0.172
16.H	-0.013	0.035	0.052	0.005	-0.001	-0.041	-0.063	0.031	0.187
17.H	-0.024	0.034	0.069	0.010	-0.008	0.426	-0.057	0.029	0.062
18.H	-0.035	0.044	0.094	0.007	-0.019	-0.484	-0.054	0.040	-0.329
19.H	-0.115	0.334	0.275	-0.025	0.017	0.009	0.124	-0.178	-0.251
20.H	0.026	-0.140	0.036	-0.016	0.004	-0.007	0.081	0.133	-0.066
21.H	-0.055	-0.106	-0.043	-0.012	0.013	-0.017	0.162	0.004	0.210

	427.930			582.624			642.234		
1.C	0.004	-0.004	-0.153	-0.023	0.036	-0.006	-0.116	-0.186	-0.055
2.C	0.001	0.004	0.280	-0.023	0.018	-0.018	-0.140	-0.024	-0.044
3.C	-0.001	0.007	-0.124	-0.003	0.006	-0.053	-0.182	0.036	-0.033
4.C	-0.014	-0.008	-0.014	0.003	0.012	-0.051	0.060	0.161	-0.031
5.N	-0.004	-0.007	0.358	0.003	0.028	-0.037	0.078	0.022	-0.048
6.C	-0.015	-0.007	-0.017	-0.012	0.043	-0.010	0.122	-0.037	-0.041
7.Re	0.031	0.005	0.018	0.022	0.059	-0.064	0.016	0.008	0.012
8.O	0.013	0.037	-0.019	-0.176	0.031	-0.075	0.135	0.272	-0.211
9.C	0.001	0.017	0.015	-0.147	0.070	0.157	0.043	0.066	0.049
10.C	0.001	0.001	0.017	0.188	0.000	0.145	0.008	0.056	0.061
11.O	0.001	0.032	0.033	0.188	-0.023	-0.050	0.038	0.193	-0.219
12.O	-0.004	-0.017	0.051	0.050	0.048	-0.071	0.055	0.022	-0.008
13.H	0.002	0.014	0.018	-0.320	-0.141	0.372	-0.186	-0.145	0.262
14.H	-0.023	-0.027	-0.161	-0.011	0.063	0.022	0.132	0.081	0.052
15.H	0.010	-0.009	-0.427	-0.032	0.041	0.026	-0.194	-0.141	0.035
16.H	0.001	0.005	0.609	-0.039	0.008	0.004	0.042	0.084	0.051
17.H	-0.001	0.013	-0.361	-0.002	-0.007	-0.065	-0.177	-0.130	0.085
18.H	-0.028	-0.007	-0.162	0.010	0.008	-0.057	0.111	0.143	0.098
19.H	0.016	-0.001	0.025	-0.190	0.017	-0.245	0.243	-0.247	-0.154
20.H	0.038	-0.026	0.029	0.314	-0.270	0.350	0.048	-0.168	0.251
21.H	-0.029	-0.022	-0.016	0.200	-0.046	-0.275	-0.138	-0.065	-0.110

	643.203			655.028			677.153		
1.C	-0.013	-0.271	-0.050	0.198	0.159	0.040	-0.022	-0.034	0.332
2.C	-0.056	-0.090	0.001	0.175	-0.312	0.010	-0.025	0.016	0.133

3.C	-0.280	0.075	-0.078	-0.234	-0.116	0.042	-0.020	0.020	0.336
4.C	0.018	0.232	-0.003	-0.213	-0.056	-0.008	0.013	0.031	0.042
5.N	0.070	0.065	-0.031	-0.174	0.292	0.027	0.016	-0.001	0.269
6.C	0.255	-0.078	0.019	0.139	0.170	0.013	0.012	-0.011	0.028
7.Re	-0.012	-0.009	-0.030	0.004	-0.012	0.005	-0.021	0.005	0.059
8.O	-0.097	-0.197	0.138	0.033	0.073	-0.047	0.009	0.059	0.036
9.C	-0.038	-0.041	-0.035	0.016	0.016	0.017	-0.013	0.019	0.018
10.C	-0.006	-0.031	-0.041	0.023	0.007	0.013	0.030	-0.021	0.008
11.O	-0.029	-0.150	0.169	0.006	0.010	-0.018	0.016	-0.079	0.085
12.O	-0.030	-0.026	-0.008	0.001	0.013	-0.004	-0.037	0.029	0.056
13.H	0.130	0.104	-0.184	-0.053	-0.033	0.066	-0.059	0.031	0.007
14.H	0.262	-0.032	0.081	0.126	-0.153	-0.068	-0.009	0.001	-0.478
15.H	-0.161	-0.185	-0.025	-0.118	0.351	-0.008	-0.025	-0.033	0.003
16.H	0.249	0.092	0.091	0.163	-0.321	-0.039	0.011	0.040	-0.391
17.H	-0.279	-0.019	-0.072	-0.252	0.245	0.017	-0.017	-0.025	-0.014
18.H	0.115	0.187	0.056	0.066	-0.201	-0.047	0.005	0.016	-0.496
19.H	-0.177	0.180	0.105	0.072	-0.071	-0.039	0.019	-0.022	0.005
20.H	-0.036	0.130	-0.177	0.020	-0.050	0.066	0.050	-0.038	0.017
21.H	0.115	0.064	0.074	0.003	-0.012	-0.037	0.067	-0.004	-0.054

	682.513			746.363			820.861		
1.C	0.045	-0.032	0.157	0.005	-0.004	-0.207	-0.013	0.011	0.003
2.C	0.040	-0.052	0.076	0.005	-0.001	-0.400	-0.014	0.001	-0.029
3.C	0.014	-0.034	0.208	-0.005	0.003	-0.203	-0.002	-0.007	-0.049
4.C	0.060	-0.008	0.060	-0.007	-0.005	-0.313	0.005	-0.004	-0.038
5.N	0.064	0.014	0.150	0.000	-0.004	0.034	0.008	0.009	0.000
6.C	0.076	-0.004	-0.001	-0.009	-0.002	-0.298	-0.008	0.012	0.022
7.Re	0.129	-0.001	0.062	0.002	-0.003	-0.049	0.027	0.019	0.016
8.O	-0.171	-0.274	0.196	0.004	-0.039	-0.044	0.197	-0.110	0.077
9.C	-0.043	-0.003	0.018	0.012	-0.030	0.000	-0.051	0.219	0.039
10.C	-0.068	0.026	-0.022	-0.016	0.024	0.026	0.067	0.170	0.048
11.O	0.046	0.334	-0.370	-0.024	0.032	0.023	-0.139	-0.018	0.034
12.O	0.064	-0.009	0.048	0.023	-0.055	-0.025	0.059	0.014	-0.004
13.H	0.117	0.015	0.000	0.055	-0.041	0.011	-0.124	-0.146	0.386
14.H	0.064	-0.001	-0.289	0.007	-0.004	0.055	-0.007	0.015	0.003
15.H	0.000	-0.006	-0.046	0.015	-0.006	0.463	-0.017	0.014	0.008
16.H	0.063	-0.038	-0.199	0.010	0.002	0.188	-0.024	-0.005	-0.014
17.H	0.014	-0.043	0.035	-0.011	0.019	0.511	-0.002	-0.014	-0.014
18.H	0.098	-0.036	-0.202	-0.015	0.013	0.129	0.011	-0.007	-0.009
19.H	-0.266	0.275	0.032	-0.002	-0.007	0.017	-0.009	0.063	-0.433
20.H	-0.064	-0.024	0.021	-0.032	0.075	-0.015	0.137	-0.249	0.396
21.H	-0.282	-0.100	0.064	-0.016	0.032	0.095	-0.100	0.016	-0.443

	836.947			845.675			918.343		
1.C	0.021	0.007	-0.025	0.004	0.005	-0.205	-0.005	0.008	-0.045
2.C	0.016	-0.004	-0.019	0.007	0.002	-0.053	-0.004	0.009	-0.115
3.C	0.003	-0.001	-0.008	-0.004	0.005	0.157	0.005	0.001	-0.081
4.C	-0.004	-0.009	0.000	-0.005	0.007	0.246	0.002	0.012	0.109
5.N	0.010	-0.017	0.003	0.004	0.001	0.045	-0.002	0.012	-0.015
6.C	0.021	-0.003	-0.012	0.000	0.004	-0.185	0.005	0.002	0.069
7.Re	-0.012	-0.015	0.005	-0.007	-0.003	0.113	0.000	0.005	0.044
8.O	0.257	-0.125	-0.018	-0.038	-0.056	-0.056	-0.015	-0.001	0.032
9.C	-0.302	0.028	0.103	-0.040	-0.035	-0.073	0.025	-0.016	0.068
10.C	-0.336	-0.038	-0.082	0.046	0.065	-0.028	-0.015	0.042	0.035
11.O	0.343	0.015	0.043	0.063	0.073	0.092	0.001	0.023	0.064
12.O	0.000	-0.015	0.038	-0.088	-0.097	0.218	0.002	-0.020	0.055
13.H	0.012	0.082	0.026	-0.095	-0.107	-0.001	-0.015	-0.043	0.097
14.H	0.022	-0.013	-0.038	0.028	0.019	0.404	-0.019	-0.028	-0.544
15.H	0.016	0.012	-0.053	0.005	0.008	0.389	-0.008	0.009	0.010
16.H	0.012	-0.006	-0.012	0.012	0.005	0.011	-0.009	0.006	0.376
17.H	0.001	0.015	0.048	-0.003	0.010	-0.362	0.003	-0.007	0.346
18.H	-0.014	-0.004	0.040	-0.005	-0.018	-0.410	0.001	-0.014	-0.598
19.H	-0.079	-0.147	0.533	-0.044	-0.059	-0.194	0.049	-0.054	0.052
20.H	-0.090	0.029	-0.209	0.107	0.102	-0.083	0.011	0.017	0.047
21.H	0.103	0.211	-0.364	0.050	0.068	-0.024	-0.014	0.038	-0.005

	925.766			934.282			949.432		
1.C	0.036	-0.011	0.002	0.013	-0.019	-0.018	-0.003	-0.003	-0.108
2.C	0.036	-0.006	-0.013	0.019	0.007	-0.003	-0.005	0.011	-0.041
3.C	0.023	-0.002	-0.008	0.007	0.019	0.012	0.012	0.003	0.107
4.C	0.014	-0.005	0.035	-0.009	0.013	0.014	0.007	0.000	-0.055
5.N	0.019	-0.020	-0.009	-0.021	0.002	-0.007	-0.012	0.019	-0.002
6.C	0.030	-0.021	0.014	-0.012	-0.024	-0.016	0.008	-0.003	0.100
7.Re	-0.001	-0.025	-0.006	-0.040	-0.026	-0.002	-0.002	0.001	0.018
8.O	0.104	-0.044	-0.037	0.028	-0.033	-0.060	-0.004	-0.005	0.002
9.C	-0.152	0.060	-0.174	-0.247	-0.156	0.144	-0.006	-0.001	0.001
10.C	0.089	-0.209	0.165	0.209	-0.019	-0.168	0.003	0.004	0.013
11.O	-0.007	-0.013	-0.039	-0.187	-0.004	-0.063	0.005	0.012	0.019
12.O	-0.005	-0.019	-0.007	-0.066	-0.016	0.012	-0.005	-0.005	0.035
13.H	0.029	0.160	-0.288	0.088	0.089	-0.099	-0.010	-0.006	0.005
14.H	0.025	-0.028	-0.120	-0.014	-0.036	-0.030	-0.018	-0.052	-0.574
15.H	0.038	-0.013	-0.005	0.037	-0.035	-0.012	0.004	-0.006	0.444
16.H	0.041	-0.003	0.118	0.035	0.016	0.009	-0.007	0.010	0.178
17.H	0.022	0.010	0.104	0.007	0.029	0.020	0.016	-0.018	-0.516
18.H	0.010	-0.010	-0.176	-0.016	0.016	-0.003	0.014	0.011	0.358
19.H	-0.290	0.253	-0.169	-0.181	-0.115	0.648	-0.007	-0.003	-0.009

20.H	-0.153	0.105	-0.026	0.033	0.216	-0.332	0.002	0.020	-0.001
21.H	0.091	-0.158	0.640	0.317	0.075	-0.044	0.006	0.008	0.027

	973.498			1002.021			1010.940		
1.C	-0.004	-0.005	-0.089	0.124	0.208	-0.012	-0.066	-0.101	-0.012
2.C	0.002	-0.001	0.136	-0.129	0.222	0.015	0.072	-0.089	0.005
3.C	0.012	0.000	-0.060	-0.251	-0.018	0.002	0.110	0.024	0.030
4.C	0.003	0.005	0.008	-0.163	-0.255	0.006	0.063	0.099	0.024
5.N	-0.007	0.013	0.015	0.180	-0.287	0.002	-0.055	0.144	0.024
6.C	0.001	-0.002	0.030	0.296	0.018	0.013	-0.129	0.018	0.014
7.Re	0.000	0.001	-0.001	0.017	0.001	0.023	0.043	0.058	0.103
8.O	-0.001	0.002	-0.001	0.008	0.004	0.004	0.038	0.024	-0.011
9.C	-0.001	0.003	-0.005	0.005	-0.019	0.018	-0.006	0.032	0.017
10.C	0.001	-0.003	-0.003	0.031	0.007	0.007	0.009	0.039	0.044
11.O	0.001	-0.001	-0.005	-0.004	-0.011	0.005	0.060	0.011	0.070
12.O	0.000	0.006	0.001	-0.063	-0.107	-0.121	-0.362	-0.470	-0.589
13.H	-0.002	0.005	-0.008	0.013	0.014	-0.013	-0.062	0.061	-0.010
14.H	-0.006	-0.022	-0.188	0.314	-0.007	-0.126	-0.138	0.118	-0.017
15.H	-0.006	-0.002	0.543	0.103	0.253	0.091	-0.054	-0.125	-0.018
16.H	-0.005	-0.002	-0.685	-0.135	0.249	-0.070	0.123	-0.072	-0.012
17.H	0.009	0.003	0.402	-0.282	0.037	0.025	0.120	0.057	0.020
18.H	0.005	0.002	-0.079	-0.145	-0.292	0.064	0.097	0.096	0.136
19.H	-0.002	0.003	-0.006	0.018	-0.021	0.078	0.072	-0.040	0.127
20.H	0.000	-0.001	-0.005	0.047	0.008	-0.002	-0.006	0.043	0.047
21.H	0.001	-0.002	0.000	0.014	-0.005	-0.009	0.069	0.072	0.006

	1044.797			1055.595			1076.164		
1.C	0.139	0.208	-0.019	-0.097	-0.083	-0.004	-0.038	-0.054	0.038
2.C	0.137	-0.233	0.008	0.082	-0.177	-0.001	0.024	-0.019	0.025
3.C	-0.256	-0.026	0.016	0.106	0.024	0.005	-0.047	-0.030	-0.008
4.C	0.157	0.246	-0.006	-0.056	-0.066	0.001	-0.012	-0.083	-0.022
5.N	0.168	-0.289	0.001	0.088	-0.160	0.000	0.049	-0.014	-0.005
6.C	-0.298	-0.021	0.034	0.070	0.022	0.008	-0.057	0.003	0.028
7.Re	0.005	-0.009	0.008	0.035	-0.050	0.002	0.015	-0.014	-0.030
8.O	0.005	-0.005	0.006	0.032	-0.040	0.004	-0.002	-0.032	-0.010
9.C	0.004	-0.023	0.000	0.031	-0.050	-0.003	0.069	0.133	0.102
10.C	0.011	0.002	0.010	0.040	-0.028	0.008	0.011	-0.134	-0.112
11.O	0.006	-0.013	0.005	0.035	-0.047	-0.001	-0.005	0.011	-0.012
12.O	0.002	-0.017	0.006	0.043	-0.049	0.009	0.037	0.008	-0.052
13.H	0.038	-0.017	-0.006	0.074	-0.042	-0.012	-0.372	0.029	0.214
14.H	-0.312	0.162	-0.127	0.086	0.301	-0.065	-0.052	0.178	0.021
15.H	0.253	0.145	0.088	-0.536	0.175	0.019	0.028	-0.099	0.069
16.H	0.137	-0.241	-0.021	0.081	-0.195	0.008	0.190	0.078	0.032
17.H	-0.257	-0.155	-0.028	0.090	0.523	-0.011	-0.059	0.124	-0.022
18.H	0.043	0.315	0.009	-0.311	0.057	0.013	0.105	-0.147	-0.034
19.H	-0.012	0.004	0.027	0.016	-0.022	0.027	0.228	-0.164	-0.271
20.H	0.052	-0.012	0.007	0.079	-0.043	0.009	-0.448	0.113	-0.178
21.H	-0.022	-0.023	-0.016	0.011	-0.050	-0.017	0.334	0.114	0.225

	1079.366			1165.833			1171.702		
1.C	0.106	0.109	0.017	-0.030	0.018	0.000	0.012	0.013	-0.019
2.C	-0.011	-0.009	0.008	0.051	0.028	0.000	0.015	0.022	-0.005
3.C	0.139	0.050	-0.001	0.002	-0.036	-0.003	0.004	0.024	0.014
4.C	0.056	0.160	-0.011	-0.003	0.001	-0.003	-0.007	0.022	0.019
5.N	-0.038	-0.031	0.002	-0.025	-0.016	-0.001	-0.006	0.006	0.005
6.C	0.161	-0.020	-0.002	-0.001	0.000	-0.001	0.005	0.001	-0.014
7.Re	0.025	0.019	-0.011	-0.002	-0.001	-0.002	-0.021	0.001	0.013
8.O	0.028	-0.016	-0.007	-0.001	-0.004	-0.001	-0.023	0.010	0.004
9.C	0.048	0.045	0.047	-0.002	0.000	0.003	-0.025	-0.075	-0.068
10.C	0.016	-0.075	-0.052	-0.003	-0.002	0.000	-0.018	-0.046	-0.004
11.O	-0.002	0.011	-0.003	-0.004	-0.005	-0.002	-0.026	0.041	0.023
12.O	0.010	0.028	-0.031	-0.002	-0.001	-0.003	-0.041	-0.007	0.028
13.H	-0.182	0.010	0.087	-0.020	0.010	-0.006	0.270	-0.227	0.066
14.H	0.156	-0.379	0.056	-0.005	-0.116	0.014	0.005	-0.015	-0.026
15.H	-0.117	0.255	0.017	-0.434	0.263	-0.002	-0.011	0.027	-0.034
16.H	-0.398	-0.238	0.015	0.569	0.337	0.000	0.040	0.036	-0.008
17.H	0.160	-0.208	-0.008	0.023	-0.515	0.001	0.005	0.008	0.027
18.H	-0.272	0.331	-0.013	-0.117	0.057	0.004	-0.024	0.031	0.032
19.H	0.138	-0.112	-0.120	0.009	-0.013	0.005	-0.159	0.104	-0.046
20.H	-0.169	0.042	-0.095	0.021	0.007	-0.016	-0.493	-0.220	0.312
21.H	0.145	0.027	0.107	-0.025	-0.015	0.013	0.497	0.246	-0.321

	1202.496			1209.198			1283.604		
1.C	-0.022	0.008	-0.032	0.023	-0.042	-0.005	0.108	-0.133	0.000
2.C	-0.016	0.001	-0.022	0.001	-0.013	-0.001	-0.229	-0.129	-0.002
3.C	-0.019	0.004	0.001	0.020	-0.038	0.003	-0.073	0.149	-0.006
4.C	-0.003	-0.002	0.012	-0.081	0.018	0.003	0.269	-0.147	0.004
5.N	-0.009	0.004	0.004	-0.003	-0.006	0.002	-0.409	-0.246	0.007
6.C	-0.021	-0.010	-0.022	0.018	0.085	0.001	0.005	0.290	0.006
7.Re	-0.012	0.002	0.021	-0.002	-0.001	0.003	-0.034	-0.024	0.004
8.O	-0.039	-0.052	-0.005	-0.007	-0.008	0.000	-0.039	-0.021	0.007
9.C	-0.012	0.024	-0.067	-0.003	0.005	-0.011	-0.033	-0.003	0.003
10.C	0.012	0.036	0.086	0.002	0.004	0.012	-0.038	-0.018	0.015
11.O	-0.015	0.030	0.013	-0.005	0.004	0.002	-0.040	-0.016	0.006

12.O	-0.014	-0.012	0.047	-0.002	-0.001	0.008	-0.031	-0.027	0.003
13.H	-0.347	0.319	-0.351	-0.044	0.039	-0.044	-0.020	-0.021	0.020
14.H	-0.024	-0.082	-0.017	0.039	0.529	-0.039	-0.004	0.353	-0.014
15.H	-0.066	0.035	-0.052	0.378	-0.258	0.000	-0.049	-0.034	0.012
16.H	-0.018	0.000	-0.032	-0.001	-0.016	-0.002	0.308	0.192	0.002
17.H	-0.023	0.075	0.009	0.040	-0.448	0.008	-0.066	0.038	0.009
18.H	0.050	-0.028	0.034	-0.470	0.208	0.004	0.376	-0.210	-0.041
19.H	0.417	-0.414	0.339	0.070	-0.070	0.052	-0.011	-0.028	0.015
20.H	-0.029	-0.071	0.205	-0.009	-0.010	0.029	-0.018	0.012	-0.020
21.H	0.211	0.132	-0.171	0.034	0.019	-0.025	0.029	0.020	-0.030

	1297.301			1306.073			1344.539		
1.C	-0.049	0.036	-0.006	-0.022	0.009	0.047	0.100	0.009	-0.007
2.C	-0.049	0.018	0.045	-0.013	0.030	0.007	0.143	0.106	-0.006
3.C	-0.035	0.007	0.064	-0.036	0.033	-0.036	0.042	0.106	-0.003
4.C	-0.017	0.018	0.031	-0.061	0.030	-0.039	-0.049	0.096	-0.002
5.N	-0.021	0.034	-0.019	-0.051	0.010	0.000	-0.033	0.000	0.004
6.C	-0.034	0.037	-0.038	-0.036	-0.012	0.042	0.047	-0.062	0.000
7.Re	0.004	0.051	-0.066	-0.078	-0.007	-0.007	-0.038	-0.002	0.005
8.O	-0.070	0.072	-0.093	-0.065	-0.013	0.064	-0.011	-0.044	0.002
9.C	-0.082	0.173	-0.262	-0.050	0.015	0.028	-0.031	-0.076	0.012
10.C	0.097	0.080	-0.214	-0.166	-0.137	0.155	-0.050	-0.065	0.006
11.O	0.080	0.052	-0.101	-0.166	-0.042	-0.018	-0.059	-0.031	0.009
12.O	-0.029	0.045	-0.043	-0.055	0.027	-0.049	-0.059	0.015	0.008
13.H	0.367	-0.386	0.280	0.158	-0.283	0.315	-0.079	-0.040	-0.023
14.H	-0.034	0.081	-0.078	-0.034	-0.005	0.073	0.081	0.580	-0.019
15.H	-0.086	0.059	-0.024	-0.012	0.003	0.079	-0.204	0.193	-0.003
16.H	-0.079	0.001	0.071	-0.021	0.026	0.010	-0.241	-0.121	-0.006
17.H	-0.034	-0.014	0.104	-0.037	0.048	-0.068	0.056	-0.225	0.001
18.H	0.026	-0.003	0.044	-0.047	0.023	-0.073	0.527	-0.188	0.012
19.H	0.363	-0.276	0.242	0.085	-0.126	0.143	-0.024	-0.090	-0.013
20.H	-0.111	-0.001	-0.064	0.425	0.265	-0.411	-0.045	-0.080	0.017
21.H	-0.208	-0.084	0.127	0.281	0.106	-0.261	-0.075	-0.082	0.005

	1445.676			1448.514			1457.805		
1.C	-0.276	0.093	0.008	0.015	-0.007	0.013	-0.023	0.013	0.009
2.C	-0.179	-0.124	0.003	0.002	0.016	-0.001	-0.027	0.028	0.006
3.C	-0.035	-0.303	0.000	-0.012	0.032	0.002	-0.040	0.033	-0.006
4.C	-0.109	0.053	-0.004	-0.002	-0.003	0.020	-0.042	0.021	-0.016
5.N	-0.191	-0.129	0.014	0.005	0.018	0.033	-0.043	0.018	-0.013
6.C	0.010	-0.137	0.006	-0.017	0.015	0.031	-0.040	0.010	-0.001
7.Re	-0.033	-0.036	0.011	-0.011	0.006	0.059	-0.058	0.009	-0.029
8.O	-0.058	0.000	0.019	-0.016	0.000	0.071	-0.055	0.006	-0.014
9.C	-0.047	0.031	0.041	-0.052	-0.004	0.140	-0.085	-0.006	0.005
10.C	-0.021	0.029	0.024	0.001	0.001	0.121	-0.112	-0.003	-0.084
11.O	-0.017	-0.006	0.018	-0.015	0.012	0.080	-0.078	-0.009	-0.041
12.O	-0.007	-0.056	0.007	-0.001	-0.004	0.058	-0.063	0.025	-0.040
13.H	0.141	0.111	-0.050	0.564	0.235	-0.140	0.230	0.119	-0.140
14.H	0.055	0.334	0.012	-0.021	-0.033	0.042	-0.040	0.007	-0.003
15.H	0.275	-0.219	0.002	-0.047	0.029	0.011	-0.036	0.020	0.017
16.H	0.317	0.170	0.004	-0.047	-0.012	-0.015	-0.032	0.026	0.014
17.H	-0.047	0.304	-0.014	-0.012	-0.020	-0.007	-0.040	0.038	-0.008
18.H	0.348	-0.146	0.010	-0.061	0.024	0.021	-0.071	0.035	-0.026
19.H	0.000	-0.059	-0.114	0.177	-0.396	-0.384	0.025	-0.204	-0.265
20.H	-0.095	0.066	0.014	-0.261	0.231	-0.011	0.404	-0.445	0.169
21.H	-0.031	0.022	-0.011	-0.188	-0.138	-0.143	0.229	0.259	0.464

	1465.123			1550.799			1595.218		
1.C	-0.155	0.098	0.002	-0.154	-0.034	0.001	0.215	-0.213	-0.001
2.C	0.026	0.012	-0.001	0.415	0.259	0.003	-0.090	0.103	0.001
3.C	0.010	0.228	-0.003	-0.099	-0.136	0.003	0.090	-0.290	0.004
4.C	-0.169	0.118	-0.003	0.202	0.050	0.003	-0.184	0.187	-0.006
5.N	0.000	0.010	-0.002	-0.094	-0.056	0.006	0.066	-0.098	-0.002
6.C	-0.002	0.207	-0.002	0.127	0.182	-0.002	-0.092	0.237	0.004
7.Re	-0.056	0.075	-0.002	0.028	0.022	0.001	0.007	-0.011	-0.002
8.O	-0.050	0.064	0.001	0.035	0.008	-0.001	0.006	-0.006	0.000
9.C	-0.058	0.056	0.002	0.027	0.000	-0.002	0.005	-0.006	-0.001
10.C	-0.060	0.055	-0.003	0.026	0.001	-0.003	0.007	-0.007	-0.002
11.O	-0.064	0.065	-0.002	0.021	0.012	0.001	0.007	-0.008	-0.002
12.O	-0.061	0.081	-0.002	0.017	0.026	0.002	0.008	-0.009	-0.003
13.H	-0.030	0.059	-0.003	0.025	-0.003	0.001	0.013	-0.008	0.001
14.H	-0.029	-0.500	0.009	0.106	-0.280	0.008	-0.143	-0.392	0.002
15.H	0.323	-0.203	-0.005	0.059	-0.194	-0.008	-0.354	0.120	0.007
16.H	0.029	-0.011	-0.002	-0.493	-0.276	0.000	-0.066	0.146	-0.002
17.H	0.045	-0.347	0.002	-0.140	0.194	-0.002	0.073	0.358	-0.007
18.H	0.452	-0.197	0.010	-0.177	0.239	-0.002	0.410	-0.082	0.006
19.H	-0.042	0.031	-0.015	0.031	-0.006	-0.003	0.007	-0.008	0.000
20.H	-0.049	0.042	0.006	0.022	0.000	-0.002	0.007	-0.011	0.001
21.H	-0.062	0.055	0.015	0.015	-0.006	-0.003	0.010	-0.004	0.002

	2981.990			2991.950			3051.670		
1.C	0.018	-0.009	-0.018	0.008	-0.004	-0.002	0.007	0.005	0.033
2.C	0.018	-0.010	-0.003	0.008	-0.010	-0.008	0.007	-0.010	0.017
3.C	0.018	-0.010	0.006	0.013	-0.012	0.001	0.019	-0.017	-0.009

4.C	0.019	-0.010	0.000	0.017	-0.009	0.016	0.031	-0.009	-0.018
5.N	0.019	-0.009	-0.014	0.017	-0.004	0.022	0.031	0.005	-0.003
6.C	0.018	-0.009	-0.024	0.013	-0.002	0.013	0.019	0.012	0.023
7.Re	0.019	-0.009	-0.022	0.025	-0.001	0.045	0.052	0.017	-0.019
8.O	0.013	-0.010	-0.040	0.023	-0.001	0.041	0.049	0.042	0.013
9.C	0.046	-0.029	-0.109	0.018	0.002	0.059	0.109	0.121	0.032
10.C	0.031	-0.001	-0.041	0.065	0.020	0.115	0.060	-0.008	-0.004
11.O	0.031	-0.006	-0.033	0.025	0.015	0.059	0.048	0.013	-0.017
12.O	0.006	-0.011	-0.013	0.033	-0.016	0.051	0.075	0.028	-0.040
13.H	0.034	0.593	0.543	0.028	-0.044	0.021	0.066	-0.269	-0.340
14.H	0.021	-0.008	-0.035	0.013	0.002	0.018	0.019	0.024	0.034
15.H	0.018	-0.008	-0.026	0.004	-0.002	-0.009	-0.003	0.011	0.053
16.H	0.017	-0.009	0.001	0.004	-0.011	-0.020	-0.003	-0.015	0.024
17.H	0.018	-0.010	0.018	0.012	-0.017	-0.003	0.019	-0.028	-0.022
18.H	0.020	-0.010	0.007	0.020	-0.011	0.024	0.040	-0.017	-0.038
19.H	-0.410	-0.347	0.005	0.123	0.080	0.040	-0.568	-0.422	0.154
20.H	0.005	-0.089	-0.144	-0.171	-0.511	-0.517	0.080	0.154	0.164
21.H	0.023	0.013	-0.058	-0.297	0.536	0.034	-0.157	0.365	-0.039

	3067.656			3128.525			3136.032		
1.C	0.044	-0.046	0.010	0.024	0.022	-0.001	0.027	-0.005	0.002
2.C	0.044	-0.023	0.022	0.044	-0.064	-0.001	0.026	-0.061	0.002
3.C	0.024	-0.011	0.016	-0.029	-0.006	-0.001	0.058	-0.029	0.002
4.C	0.004	-0.024	-0.001	0.019	0.012	-0.001	-0.010	-0.090	0.004
5.N	0.004	-0.047	-0.012	0.009	-0.007	-0.001	0.019	-0.030	0.001
6.C	0.023	-0.058	-0.007	0.007	-0.007	0.000	0.008	-0.028	0.002
7.Re	-0.028	-0.063	-0.038	0.009	-0.007	0.000	0.022	-0.028	0.001
8.O	-0.017	-0.082	-0.041	0.009	-0.007	0.000	0.020	-0.024	0.001
9.C	-0.053	-0.141	-0.073	0.009	-0.007	0.000	0.022	-0.021	0.000
10.C	-0.006	-0.204	-0.095	0.009	-0.007	0.000	0.023	-0.022	0.000
11.O	-0.033	-0.094	-0.056	0.009	-0.007	0.000	0.024	-0.025	0.000
12.O	-0.054	-0.039	-0.040	0.009	-0.007	0.000	0.024	-0.029	0.001
13.H	-0.045	0.109	0.149	0.009	-0.008	0.000	0.023	-0.022	-0.001
14.H	0.027	-0.076	-0.017	0.040	-0.007	-0.001	0.107	-0.030	-0.002
15.H	0.059	-0.057	0.014	-0.179	-0.324	0.000	-0.161	-0.316	0.003
16.H	0.060	-0.013	0.035	-0.385	0.661	0.000	-0.164	0.265	0.004
17.H	0.023	0.007	0.025	0.457	0.013	0.001	-0.478	-0.063	0.001
18.H	-0.011	-0.014	-0.006	-0.097	-0.219	0.007	0.344	0.620	-0.021
19.H	0.255	0.098	-0.114	0.009	-0.007	0.000	0.019	-0.020	0.000
20.H	0.138	0.261	0.377	0.009	-0.007	0.000	0.022	-0.022	0.000
21.H	-0.458	0.517	-0.150	0.009	-0.008	0.000	0.026	-0.021	0.000

	3143.476			3151.856			3167.551		
1.C	-0.101	-0.141	0.003	-0.064	0.010	0.003	0.066	0.033	-0.005
2.C	-0.039	-0.126	0.002	-0.094	0.012	0.002	0.052	0.029	-0.004
3.C	-0.064	-0.105	0.000	-0.134	-0.027	0.000	0.040	0.026	-0.002
4.C	-0.040	-0.129	0.000	-0.076	-0.064	0.002	0.034	0.010	0.000
5.N	-0.024	-0.076	0.000	-0.056	-0.007	0.001	0.040	0.011	-0.001
6.C	-0.029	-0.065	0.002	-0.088	-0.001	0.003	0.135	0.001	-0.007
7.Re	0.002	-0.062	-0.002	-0.042	0.001	0.000	0.027	0.005	0.000
8.O	-0.012	-0.040	0.001	-0.050	0.015	0.001	0.034	-0.007	-0.002
9.C	0.000	-0.022	0.000	-0.042	0.025	0.001	0.028	-0.015	-0.002
10.C	0.008	-0.025	0.000	-0.038	0.023	0.001	0.025	-0.013	-0.001
11.O	0.013	-0.045	-0.002	-0.035	0.011	0.000	0.022	-0.003	0.000
12.O	0.015	-0.071	-0.003	-0.034	-0.004	-0.001	0.020	0.008	0.002
13.H	0.012	-0.022	-0.001	-0.036	0.025	0.000	0.022	-0.013	0.002
14.H	-0.209	-0.046	0.008	0.173	-0.004	-0.007	-0.921	0.048	0.036
15.H	0.369	0.662	0.003	-0.209	-0.205	0.004	-0.055	-0.192	-0.003
16.H	-0.275	0.228	0.003	0.105	-0.349	0.002	0.112	-0.054	-0.004
17.H	0.206	-0.115	0.000	0.660	-0.002	0.004	0.150	0.038	0.000
18.H	0.161	0.249	-0.015	0.184	0.457	-0.017	0.089	0.138	-0.003
19.H	-0.009	-0.009	0.002	-0.050	0.031	0.003	0.033	-0.022	-0.003
20.H	-0.003	-0.022	0.001	-0.045	0.024	0.000	0.030	-0.014	-0.001
21.H	0.021	-0.016	-0.001	-0.030	0.028	0.000	0.017	-0.015	0.000

```
====================================
Normal Modes in Z-matrix coordinates
====================================
```

	33.047			58.123			101.532		
1.C	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000
2.C	-0.006	0.000	0.000	-0.004	0.000	0.000	-0.005	0.000	0.000
3.C	0.004	-0.007	0.000	0.008	0.002	0.000	-0.006	-0.011	0.000
4.C	-0.006	0.012	-0.032	-0.005	0.006	-0.074	0.017	0.020	0.143
5.N	0.011	-0.009	0.045	0.005	-0.008	-0.038	-0.016	-0.012	0.011
6.C	0.001	-0.001	-0.010	0.009	0.004	0.141	0.016	-0.015	-0.192
7.Re	-0.056	0.027	0.036	-0.079	0.111	0.664	0.067	0.121	-0.660
8.O	-0.015	-0.023	0.711	0.025	0.078	-0.137	0.013	-0.401	0.085
9.C	-0.001	-0.002	-0.019	0.001	-0.008	0.494	-0.057	0.071	0.331
10.C	0.002	-0.005	0.016	-0.016	-0.021	0.045	-0.003	-0.022	-0.099
11.O	-0.001	0.002	0.003	0.021	-0.020	-0.124	0.023	0.010	-0.050
12.O	0.003	0.008	0.692	0.002	0.308	-0.159	0.002	0.176	0.047
13.H	0.001	0.002	0.002	0.002	-0.008	-0.118	-0.001	0.007	-0.018

14.H	-0.003	0.016	-0.044	0.002	-0.012	-0.074	-0.019	0.003	0.138
15.H	-0.001	0.000	-0.010	0.000	0.003	0.076	0.000	0.017	-0.092
16.H	-0.001	0.002	-0.025	0.001	-0.005	-0.059	0.001	0.003	0.095
17.H	0.000	-0.002	-0.017	0.001	-0.006	-0.058	0.000	-0.011	0.106
18.H	-0.002	0.006	0.026	0.003	0.010	0.017	-0.003	0.004	-0.052
19.H	0.000	0.005	0.006	0.000	0.011	-0.115	0.004	-0.012	-0.028
20.H	0.000	0.000	-0.022	0.001	0.001	0.172	0.001	-0.030	0.219
21.H	0.000	0.000	-0.019	-0.002	-0.001	0.170	-0.003	0.011	0.228

	142.521			157.462			207.950		
1.C	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000
2.C	0.012	0.000	0.000	0.002	0.000	0.000	-0.005	0.000	0.000
3.C	-0.006	0.016	0.000	0.000	-0.001	0.000	0.004	0.003	0.000
4.C	-0.009	-0.015	0.128	0.015	0.003	0.038	0.005	0.007	-0.037
5.N	-0.001	-0.006	0.074	0.002	0.003	-0.007	0.005	-0.018	-0.033
6.C	0.003	0.028	-0.232	0.012	-0.017	-0.033	-0.012	0.008	0.082
7.Re	-0.171	-0.150	-0.535	0.101	0.120	-0.072	-0.048	0.127	0.095
8.O	0.022	0.105	0.227	-0.020	0.010	0.022	-0.002	0.056	-0.005
9.C	0.017	-0.073	0.274	0.002	-0.087	-0.182	0.000	-0.066	-0.171
10.C	-0.024	-0.043	0.187	-0.009	0.043	0.107	-0.033	-0.088	0.284
11.O	0.017	-0.045	-0.261	0.023	0.053	0.200	0.011	-0.065	-0.388
12.O	0.008	0.184	0.123	-0.015	0.366	-0.369	-0.002	-0.223	-0.144
13.H	0.004	-0.013	-0.268	0.003	0.013	0.178	0.003	-0.008	-0.417
14.H	0.003	0.004	0.080	-0.001	-0.005	0.001	-0.001	-0.001	-0.049
15.H	0.000	-0.009	-0.108	0.000	0.004	-0.017	-0.001	0.007	0.044
16.H	0.000	-0.006	0.086	0.001	0.001	0.036	0.000	-0.002	-0.018
17.H	0.000	0.007	0.106	0.000	-0.006	0.026	0.000	-0.007	-0.042
18.H	0.002	0.004	-0.015	0.003	-0.001	-0.008	-0.001	0.013	-0.017
19.H	-0.001	0.019	-0.253	-0.001	-0.005	0.175	-0.001	0.030	-0.378
20.H	0.001	0.014	0.245	-0.002	-0.011	-0.528	0.002	0.020	0.395
21.H	-0.001	0.002	0.225	0.000	-0.032	-0.503	0.000	0.023	0.360

	223.769			243.461			290.727		
1.C	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000
2.C	0.001	0.000	0.000	0.006	0.000	0.000	0.002	0.000	0.000
3.C	0.002	0.053	0.000	-0.009	-0.027	0.000	0.002	0.023	0.000
4.C	-0.048	-0.032	-0.146	-0.002	-0.005	-0.132	-0.014	-0.012	-0.066
5.N	-0.037	-0.038	0.020	-0.025	0.063	0.002	-0.007	-0.019	0.046
6.C	-0.012	0.103	0.127	0.033	-0.051	0.138	-0.002	0.035	0.018
7.Re	-0.469	-0.196	0.158	0.278	-0.240	0.099	-0.160	-0.014	-0.002
8.O	-0.019	-0.155	-0.061	-0.044	-0.232	0.015	-0.017	0.028	0.043
9.C	-0.050	-0.019	-0.123	-0.022	-0.106	-0.116	0.033	-0.004	0.056
10.C	0.031	0.042	-0.010	-0.029	-0.069	0.266	-0.037	-0.037	-0.057
11.O	-0.008	0.055	0.236	0.040	-0.026	-0.358	-0.002	-0.002	-0.305
12.O	0.012	-0.006	-0.170	0.002	0.038	-0.130	-0.018	0.160	0.006
13.H	0.001	0.010	0.243	0.002	-0.002	-0.381	-0.002	0.008	-0.309
14.H	-0.006	0.012	-0.046	0.001	0.008	-0.034	-0.001	0.002	-0.042
15.H	-0.001	-0.005	0.080	0.002	-0.015	0.060	-0.001	0.000	0.033
16.H	-0.001	-0.030	-0.127	0.001	0.012	-0.111	0.000	-0.012	-0.057
17.H	-0.002	0.008	-0.074	0.000	0.016	-0.072	-0.001	-0.001	-0.025
18.H	0.000	0.034	0.101	-0.001	-0.045	0.095	0.001	0.017	0.065
19.H	0.002	-0.024	0.212	0.000	0.008	-0.362	-0.002	0.008	-0.272
20.H	-0.002	-0.008	-0.441	0.001	-0.018	0.319	0.002	0.000	0.573
21.H	0.000	-0.010	-0.424	-0.002	0.022	0.303	-0.001	0.014	0.569

	303.477			378.917			391.576		
1.C	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000
2.C	-0.005	0.000	0.000	0.002	0.000	0.000	-0.008	0.000	0.000
3.C	0.002	0.002	0.000	0.000	0.006	0.000	0.007	-0.008	0.000
4.C	0.001	0.005	0.057	0.006	-0.014	-0.314	0.014	0.007	0.027
5.N	0.000	-0.012	-0.005	-0.002	-0.007	0.589	0.013	-0.011	0.260
6.C	-0.009	0.006	-0.056	0.003	0.000	-0.270	-0.018	-0.016	-0.265
7.Re	-0.003	0.037	-0.016	0.009	0.005	-0.309	0.099	0.088	-0.098
8.O	0.018	-0.080	-0.175	0.025	0.008	-0.153	-0.143	-0.082	0.064
9.C	-0.032	-0.209	-0.375	-0.001	0.023	-0.031	-0.039	-0.284	0.251
10.C	0.003	-0.063	0.486	-0.010	-0.021	0.048	0.133	0.239	-0.416
11.O	-0.014	-0.083	-0.354	0.003	-0.023	-0.012	-0.045	0.220	0.162
12.O	0.009	0.032	0.129	0.000	0.008	-0.130	-0.019	-0.173	-0.116
13.H	0.002	-0.039	-0.420	0.000	-0.003	-0.020	0.003	-0.003	0.244
14.H	-0.003	0.006	0.060	0.002	-0.003	-0.167	-0.002	0.001	0.023
15.H	0.000	0.005	-0.047	0.000	-0.002	-0.026	0.000	0.008	-0.136
16.H	0.000	-0.002	0.033	0.001	-0.003	-0.306	0.001	0.005	-0.033
17.H	0.000	-0.004	0.041	0.000	0.001	-0.056	0.001	-0.008	0.092
18.H	-0.001	0.012	-0.018	0.001	0.004	0.463	-0.002	0.011	0.152
19.H	-0.002	0.018	-0.432	0.000	0.013	-0.008	0.004	-0.145	0.079
20.H	-0.002	0.026	0.061	0.000	0.003	0.013	0.000	-0.022	-0.306
21.H	0.000	0.024	0.008	0.000	0.002	0.004	0.001	-0.020	-0.236

	427.930			582.624			642.234		
1.C	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000
2.C	-0.003	0.000	0.000	0.001	0.000	0.000	-0.039	0.000	0.000
3.C	0.002	0.002	0.000	-0.001	0.004	0.000	0.053	0.059	0.000
4.C	-0.010	-0.002	0.478	0.003	-0.011	0.023	-0.036	0.211	-0.002
5.N	-0.003	0.004	-0.065	0.002	0.006	-0.021	-0.029	-0.258	-0.010

6.C	-0.002	0.004	-0.337	-0.012	0.004	0.014	0.049	0.046	0.028
7.Re	-0.024	-0.004	0.159	0.035	-0.004	0.018	0.032	-0.064	-0.015
8.O	-0.016	-0.032	-0.265	0.356	0.025	-0.066	-0.493	0.100	-0.042
9.C	-0.005	0.029	-0.105	-0.049	0.091	-0.209	-0.103	0.262	-0.098
10.C	-0.010	-0.020	0.016	-0.006	-0.390	0.041	-0.026	-0.172	0.069
11.O	0.007	-0.002	-0.013	0.043	0.363	-0.031	0.164	0.155	0.060
12.O	-0.002	-0.069	-0.290	0.003	-0.016	-0.015	0.015	-0.003	0.055
13.H	0.000	0.008	-0.017	0.000	0.357	0.125	-0.002	0.246	0.182
14.H	0.000	0.009	0.296	0.003	-0.003	-0.025	0.000	-0.136	-0.094
15.H	0.000	-0.001	-0.378	0.000	-0.005	0.005	0.004	0.171	0.093
16.H	0.000	0.001	0.270	0.000	0.001	0.027	0.000	-0.126	0.086
17.H	0.000	0.002	0.368	0.000	0.005	0.001	-0.003	-0.173	-0.100
18.H	-0.001	-0.001	-0.105	0.000	-0.001	-0.025	0.006	0.127	-0.106
19.H	0.000	0.007	-0.002	0.016	-0.208	0.288	0.004	-0.077	0.347
20.H	0.000	-0.003	0.040	-0.002	-0.155	0.260	0.001	-0.046	0.152
21.H	0.000	0.006	0.040	-0.016	-0.060	0.393	-0.008	0.029	0.173

	643.203			655.028			677.153		
1.C	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000
2.C	-0.074	0.000	0.000	-0.032	0.000	0.000	-0.004	0.000	0.000
3.C	0.065	-0.062	0.000	-0.035	-0.507	0.000	0.006	0.022	0.000
4.C	-0.044	0.401	0.146	0.060	0.274	-0.074	-0.002	0.009	-0.323
5.N	-0.090	-0.328	-0.142	-0.055	0.166	0.092	0.001	-0.035	0.348
6.C	0.064	-0.043	0.131	-0.063	-0.382	-0.067	0.007	0.012	-0.366
7.Re	-0.045	-0.065	0.071	-0.509	0.192	-0.038	0.015	-0.001	-0.084
8.O	0.375	-0.007	0.068	-0.120	0.017	-0.028	-0.063	-0.003	-0.143
9.C	0.094	-0.197	0.062	-0.034	0.064	-0.023	-0.003	0.022	-0.042
10.C	0.017	0.120	-0.055	0.000	-0.046	0.010	-0.005	-0.021	-0.006
11.O	-0.136	-0.122	-0.040	-0.016	0.020	0.018	-0.041	-0.021	0.021
12.O	-0.002	-0.032	0.009	0.008	0.011	-0.011	0.004	-0.039	-0.148
13.H	0.001	-0.182	-0.133	-0.001	0.055	0.049	0.000	0.007	0.023
14.H	-0.003	-0.191	-0.079	-0.008	0.040	0.091	-0.002	-0.010	0.408
15.H	0.006	0.259	-0.032	0.000	0.000	-0.021	0.000	0.023	-0.111
16.H	0.000	-0.117	0.136	0.002	0.258	-0.075	0.000	-0.024	-0.453
17.H	-0.006	-0.258	0.029	-0.001	0.006	0.003	0.000	-0.021	0.126
18.H	0.003	0.129	-0.105	-0.004	-0.192	0.060	0.000	0.019	0.418
19.H	-0.004	0.060	-0.246	0.000	-0.014	0.093	-0.002	0.008	0.043
20.H	-0.001	0.033	-0.105	0.000	0.006	0.045	0.000	0.003	0.010
21.H	0.006	-0.026	-0.121	-0.002	0.006	0.040	-0.001	-0.002	0.008

	682.513			746.363			820.861		
1.C	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000
2.C	-0.006	0.000	0.000	0.001	0.000	0.000	-0.001	0.000	0.000
3.C	0.003	-0.025	0.000	-0.001	-0.003	0.000	-0.002	0.002	0.000
4.C	0.002	0.039	-0.200	-0.004	0.000	-0.229	-0.002	-0.003	-0.001
5.N	-0.004	-0.020	0.212	0.000	-0.004	0.314	-0.003	0.003	0.005
6.C	0.010	-0.021	-0.222	-0.003	0.003	-0.378	0.007	0.001	-0.004
7.Re	-0.060	-0.004	-0.056	-0.005	0.005	-0.039	0.000	0.000	-0.001
8.O	0.537	-0.049	-0.067	0.019	-0.017	-0.176	-0.069	-0.080	0.017
9.C	0.081	-0.180	-0.001	-0.006	-0.007	-0.040	0.543	-0.144	-0.012
10.C	0.059	0.137	0.031	-0.003	0.006	-0.003	-0.033	-0.035	0.001
11.O	0.299	0.172	-0.159	-0.006	-0.003	-0.004	-0.337	0.049	0.002
12.O	-0.053	0.004	-0.090	0.000	-0.035	-0.187	-0.005	0.000	-0.006
13.H	0.003	-0.024	-0.156	0.000	-0.015	-0.016	-0.018	0.355	0.075
14.H	-0.001	-0.014	0.255	0.001	-0.003	-0.032	-0.002	0.007	0.037
15.H	0.000	0.023	-0.077	0.001	-0.005	0.492	0.000	-0.002	-0.009
16.H	0.001	-0.001	-0.279	0.000	0.002	0.303	0.000	0.000	0.018
17.H	0.000	-0.020	0.085	0.000	0.003	-0.517	0.000	0.003	-0.048
18.H	0.000	0.000	0.262	0.001	0.004	-0.179	-0.001	-0.001	-0.034
19.H	0.014	-0.070	-0.291	0.000	0.007	-0.025	-0.009	-0.232	0.298
20.H	0.000	-0.035	-0.040	0.000	0.000	-0.010	0.013	0.001	0.362
21.H	0.006	0.017	-0.008	0.000	0.000	-0.010	0.010	0.153	0.347

	836.947			845.675			918.343		
1.C	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000
2.C	-0.006	0.000	0.000	0.004	0.000	0.000	0.002	0.000	0.000
3.C	-0.004	-0.010	0.000	-0.003	-0.006	0.000	-0.004	0.007	0.000
4.C	-0.003	0.001	0.002	0.001	0.003	0.018	0.010	-0.004	0.053
5.N	-0.015	0.000	0.002	-0.015	0.002	-0.047	0.002	0.004	-0.176
6.C	-0.019	0.002	-0.004	-0.006	0.003	0.033	0.009	-0.006	0.247
7.Re	0.013	0.001	0.004	0.005	-0.003	0.032	-0.006	-0.002	0.099
8.O	-0.173	-0.064	0.013	-0.005	-0.003	0.058	0.016	0.008	0.081
9.C	0.558	0.021	-0.036	0.018	-0.004	-0.003	-0.061	0.004	-0.001
10.C	0.148	-0.097	0.057	0.002	0.001	0.003	0.071	0.014	0.008
11.O	0.675	-0.114	0.029	0.004	-0.004	0.000	0.010	-0.034	0.002
12.O	0.031	-0.007	-0.005	-0.007	-0.002	0.058	-0.006	0.006	0.084
13.H	-0.012	-0.004	-0.162	-0.001	0.013	0.005	0.002	0.008	0.045
14.H	-0.003	0.003	0.017	0.002	-0.014	-0.476	-0.007	0.019	0.378
15.H	-0.001	-0.001	-0.011	0.000	-0.003	0.510	0.001	0.003	0.061
16.H	-0.001	0.007	0.009	0.000	0.001	0.091	0.000	-0.003	0.495
17.H	-0.001	0.003	-0.031	0.000	-0.001	0.433	0.001	0.000	-0.373
18.H	-0.001	0.002	-0.018	-0.003	-0.005	0.552	-0.003	-0.005	0.577
19.H	-0.007	0.213	0.081	0.000	-0.009	0.013	0.002	-0.007	0.033
20.H	-0.015	-0.104	0.012	0.000	-0.003	0.015	0.001	-0.007	0.042
21.H	-0.009	-0.217	0.095	0.000	0.003	0.012	0.000	0.009	0.036

	925.766			934.282			949.432		
1.C	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000
2.C	-0.001	0.000	0.000	0.007	0.000	0.000	-0.003	0.000	0.000
3.C	-0.003	-0.004	0.000	0.005	0.005	0.000	0.002	0.017	0.000
4.C	0.001	0.002	0.014	0.004	-0.001	0.001	0.005	-0.017	-0.144
5.N	-0.007	-0.001	-0.052	0.014	0.003	-0.005	0.027	0.010	0.224
6.C	-0.005	0.002	0.069	0.022	-0.005	0.008	0.015	-0.024	-0.072
7.Re	0.006	-0.002	0.028	-0.018	0.004	0.000	-0.027	0.011	-0.112
8.O	-0.118	-0.021	0.028	-0.084	-0.006	0.001	-0.001	0.000	-0.033
9.C	0.396	-0.022	0.063	0.166	0.127	-0.054	0.006	-0.001	0.004
10.C	-0.575	-0.095	-0.045	0.428	-0.287	-0.082	-0.012	-0.001	0.000
11.O	-0.022	0.253	-0.028	-0.465	0.178	0.031	0.005	0.003	-0.002
12.O	0.001	0.000	0.029	0.006	0.003	0.006	0.011	0.003	-0.034
13.H	-0.010	-0.058	-0.259	0.008	-0.214	-0.334	0.000	0.000	-0.003
14.H	-0.002	0.000	0.074	0.001	-0.002	-0.002	-0.009	0.022	0.533
15.H	0.000	0.001	-0.003	0.001	-0.004	0.012	0.003	0.001	0.522
16.H	0.000	0.003	0.130	0.001	-0.004	0.009	0.000	-0.008	0.074
17.H	0.000	0.001	-0.099	0.001	-0.001	0.003	0.001	-0.004	0.534
18.H	-0.001	-0.003	0.173	0.001	-0.003	0.020	0.002	-0.006	-0.240
19.H	-0.010	0.030	-0.201	-0.003	0.434	-0.121	0.000	0.000	-0.001
20.H	-0.012	0.073	-0.350	0.009	0.100	-0.183	0.000	0.001	-0.008
21.H	0.001	-0.088	-0.312	0.010	-0.115	-0.076	0.000	-0.005	-0.006

	973.498			1002.021			1010.940		
1.C	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000
2.C	0.010	0.000	0.000	-0.329	0.000	0.000	0.135	0.000	0.000
3.C	0.010	0.007	0.000	-0.349	0.011	0.000	0.116	-0.003	0.000
4.C	0.012	-0.005	0.346	-0.321	-0.029	0.022	0.087	0.007	-0.005
5.N	0.017	0.009	-0.186	-0.444	0.009	-0.006	0.115	0.018	0.013
6.C	0.015	-0.014	0.056	-0.419	0.038	0.007	0.144	-0.016	-0.007
7.Re	-0.024	0.005	0.058	0.429	-0.014	-0.004	-0.117	0.006	-0.026
8.O	0.001	-0.002	-0.008	-0.002	0.005	-0.008	-0.016	-0.013	-0.017
9.C	0.002	-0.001	-0.004	-0.015	0.015	-0.003	0.037	0.011	0.002
10.C	-0.006	0.000	0.000	0.028	-0.014	-0.008	-0.021	-0.015	0.029
11.O	0.002	0.002	-0.001	-0.048	0.014	0.017	0.038	-0.009	0.014
12.O	0.008	-0.003	-0.009	-0.255	-0.002	0.001	-0.943	0.015	0.009
13.H	0.000	0.000	-0.001	0.002	-0.037	-0.001	0.001	-0.023	0.037
14.H	-0.006	0.008	0.198	-0.032	0.038	0.097	0.012	-0.046	0.017
15.H	0.004	0.001	0.457	-0.034	0.033	0.070	0.014	-0.006	0.008
16.H	0.002	-0.003	-0.713	-0.033	-0.010	-0.063	0.012	-0.017	-0.011
17.H	0.001	0.005	-0.280	-0.037	0.040	-0.002	0.011	0.008	0.014
18.H	0.001	-0.006	-0.056	-0.035	-0.046	-0.050	0.010	-0.016	-0.052
19.H	0.000	-0.001	-0.001	0.000	0.052	-0.001	-0.002	0.074	0.042
20.H	0.000	0.000	-0.004	0.002	-0.016	-0.011	-0.001	0.008	-0.016
21.H	0.000	-0.002	-0.004	0.001	0.015	0.003	-0.002	-0.020	-0.010

	1044.797			1055.595			1076.164		
1.C	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000
2.C	-0.002	0.000	0.000	0.357	0.000	0.000	0.098	0.000	0.000
3.C	-0.007	-0.344	0.000	0.376	-0.129	0.000	-0.068	-0.014	0.000
4.C	0.015	0.366	-0.006	0.019	-0.085	-0.006	-0.100	0.036	0.001
5.N	-0.011	-0.407	0.010	-0.288	0.069	0.012	-0.095	0.041	0.005
6.C	-0.010	0.428	0.013	-0.301	0.153	-0.002	0.058	0.020	-0.003
7.Re	0.332	-0.210	0.009	0.243	-0.076	-0.005	0.024	0.055	-0.002
8.O	-0.003	0.003	-0.014	-0.004	0.003	-0.005	0.045	0.006	-0.012
9.C	-0.009	0.005	0.002	-0.009	0.009	0.008	0.037	-0.071	-0.117
10.C	0.001	0.003	-0.013	-0.003	0.006	-0.027	0.136	-0.084	0.245
11.O	-0.008	0.004	0.017	-0.018	0.011	0.032	0.014	-0.089	-0.318
12.O	-0.007	-0.004	-0.015	0.018	-0.003	-0.006	0.007	-0.012	0.004
13.H	0.000	-0.014	-0.010	0.000	-0.030	-0.026	-0.001	0.311	0.215
14.H	0.015	0.124	0.087	-0.011	-0.191	0.079	0.004	-0.071	0.018
15.H	-0.005	-0.237	0.065	0.018	0.423	0.032	0.007	-0.039	0.005
16.H	0.007	0.174	-0.032	0.028	0.068	0.007	0.001	-0.112	-0.005
17.H	-0.007	-0.237	0.039	0.018	0.426	0.020	-0.006	0.082	0.002
18.H	0.010	0.260	0.002	-0.009	0.132	-0.012	-0.006	-0.100	-0.009
19.H	0.000	0.014	-0.016	0.000	0.033	-0.027	0.001	-0.315	0.271
20.H	0.001	-0.024	0.007	0.001	-0.047	0.018	0.002	0.386	-0.226
21.H	0.000	0.022	0.014	0.000	0.043	0.028	0.001	-0.333	-0.273

	1079.366			1165.833			1171.702		
1.C	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000
2.C	-0.233	0.000	0.000	0.174	0.000	0.000	0.006	0.000	0.000
3.C	0.247	-0.011	0.000	-0.171	-0.001	0.000	-0.005	-0.002	0.000
4.C	0.273	-0.087	-0.005	0.072	0.022	0.003	0.007	0.000	0.000
5.N	0.188	-0.139	0.000	0.048	-0.026	-0.003	-0.003	-0.003	0.000
6.C	-0.211	0.017	-0.012	-0.055	0.003	0.000	-0.002	0.002	0.000
7.Re	0.028	-0.187	0.007	0.004	-0.029	0.003	0.005	-0.004	0.000
8.O	0.033	-0.057	-0.019	0.002	-0.016	-0.002	-0.010	0.012	0.008
9.C	0.027	-0.042	-0.052	0.006	-0.003	0.001	-0.072	0.029	0.067
10.C	0.083	-0.052	0.146	0.003	-0.003	0.005	-0.084	0.040	-0.070
11.O	-0.004	-0.050	-0.187	-0.003	0.000	-0.002	0.019	0.016	0.020
12.O	-0.033	0.033	-0.026	-0.001	0.010	-0.005	-0.003	0.000	-0.001
13.H	0.000	0.165	0.140	0.001	-0.010	0.022	-0.013	0.130	-0.340
14.H	-0.016	0.216	-0.054	-0.002	0.110	-0.017	-0.001	0.005	0.002

15.H	-0.018	0.168	-0.009	0.004	0.501	-0.003	0.000	0.029	0.000
16.H	0.000	0.356	0.002	0.001	-0.617	0.002	0.000	-0.018	0.000
17.H	0.018	-0.171	0.000	-0.002	-0.509	-0.004	0.000	-0.022	-0.001
18.H	0.013	0.349	-0.012	-0.001	0.144	-0.011	0.000	0.010	0.001
19.H	0.000	-0.173	0.168	0.000	0.006	0.020	0.002	-0.022	-0.273
20.H	0.001	0.208	-0.140	-0.001	-0.032	-0.014	0.015	0.543	0.207
21.H	0.001	-0.186	-0.163	0.001	0.029	-0.012	-0.018	-0.608	0.237

	1202.496			1209.198			1283.604		
1.C	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000
2.C	0.012	0.000	0.000	-0.052	0.000	0.000	-0.278	0.000	0.000
3.C	0.002	-0.008	0.000	-0.030	0.052	0.000	0.263	0.002	0.000
4.C	-0.026	0.010	-0.001	0.236	-0.076	0.004	-0.356	0.041	0.001
5.N	0.011	-0.002	0.002	-0.180	0.028	0.000	0.558	-0.074	-0.007
6.C	0.031	-0.002	-0.004	-0.209	0.044	0.002	-0.551	-0.002	0.010
7.Re	0.002	0.006	0.001	0.009	-0.024	0.001	0.014	-0.122	0.005
8.O	0.073	-0.013	-0.008	0.014	-0.004	-0.004	0.003	-0.084	0.003
9.C	0.047	-0.073	0.015	0.012	-0.015	0.004	0.005	-0.004	0.028
10.C	-0.245	0.062	-0.022	-0.050	0.011	-0.003	-0.014	0.003	0.004
11.O	-0.032	0.074	0.011	-0.011	0.015	-0.002	0.000	0.001	-0.006
12.O	0.021	-0.003	-0.001	0.009	0.001	-0.003	0.000	0.057	-0.019
13.H	0.008	-0.392	0.357	0.001	-0.057	0.054	-0.001	0.012	-0.006
14.H	0.000	0.066	-0.011	-0.004	-0.481	0.051	0.009	-0.059	0.006
15.H	0.000	0.041	-0.002	0.002	-0.444	0.010	-0.003	0.076	0.004
16.H	0.000	0.005	-0.001	0.005	-0.022	0.002	-0.001	-0.251	0.001
17.H	0.000	0.059	0.000	0.003	-0.437	-0.001	0.001	-0.043	-0.008
18.H	0.000	-0.045	-0.003	-0.010	0.441	-0.003	-0.006	-0.007	0.021
19.H	-0.022	0.555	0.445	-0.005	0.113	0.098	-0.001	0.006	0.013
20.H	-0.008	0.038	0.110	-0.001	0.014	0.019	0.000	-0.015	-0.015
21.H	-0.013	-0.236	0.209	-0.003	-0.049	0.039	-0.001	-0.034	0.015

	1297.301			1306.073			1344.539		
1.C	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000
2.C	-0.001	0.000	0.000	0.013	0.000	0.000	0.070	0.000	0.000
3.C	-0.003	0.000	0.000	-0.013	0.000	0.000	-0.078	0.004	0.000
4.C	0.001	0.001	0.000	0.015	0.000	0.000	0.061	0.004	0.000
5.N	0.004	-0.002	0.000	-0.014	0.001	0.000	-0.024	-0.009	0.005
6.C	0.004	-0.002	0.000	0.019	-0.002	0.000	0.025	-0.003	-0.006
7.Re	0.002	-0.003	0.001	-0.004	0.002	-0.001	0.001	-0.057	0.001
8.O	0.053	0.006	0.004	0.023	0.007	0.002	-0.002	-0.020	-0.007
9.C	0.112	-0.040	0.046	0.010	-0.034	0.016	-0.004	0.001	0.001
10.C	-0.101	-0.003	-0.025	-0.263	0.049	0.039	0.014	-0.002	0.002
11.O	-0.053	0.026	-0.025	0.068	0.037	-0.048	-0.002	-0.003	0.000
12.O	0.001	0.000	-0.001	-0.004	-0.001	0.002	0.003	0.012	-0.011
13.H	-0.004	0.525	-0.401	-0.006	0.328	-0.169	0.000	-0.041	0.027
14.H	0.000	-0.023	0.000	0.000	-0.017	0.000	-0.006	-0.559	0.023
15.H	0.000	0.020	-0.001	0.000	0.004	-0.003	0.002	0.332	0.007
16.H	0.000	0.013	0.000	0.000	0.018	0.000	-0.001	0.398	0.001
17.H	0.000	-0.005	0.000	0.000	-0.002	0.000	-0.001	-0.310	-0.001
18.H	0.000	-0.021	0.001	0.001	-0.024	0.001	0.010	-0.546	-0.006
19.H	-0.006	0.507	0.319	-0.006	0.050	0.096	0.000	-0.022	-0.003
20.H	-0.002	0.203	0.078	-0.006	-0.585	-0.397	0.001	0.014	0.010
21.H	0.002	0.280	-0.209	-0.008	-0.457	0.241	0.000	0.003	0.003

	1445.676			1448.514			1457.805		
1.C	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000
2.C	0.112	0.000	0.000	-0.022	0.000	0.000	-0.007	0.000	0.000
3.C	-0.101	-0.002	0.000	0.013	0.002	0.000	-0.003	0.002	0.000
4.C	0.393	-0.038	0.001	-0.061	0.007	0.000	-0.014	0.003	0.000
5.N	0.094	-0.136	-0.002	-0.011	0.021	0.000	0.003	0.003	0.000
6.C	-0.104	0.001	-0.005	0.022	-0.002	0.001	0.010	-0.003	0.000
7.Re	0.007	-0.134	0.008	-0.003	0.022	-0.001	-0.003	0.006	0.000
8.O	0.005	-0.036	-0.010	0.019	0.011	0.002	0.007	0.003	0.001
9.C	0.008	0.005	0.004	0.035	0.028	-0.028	0.029	0.016	-0.012
10.C	0.018	-0.014	0.002	0.037	-0.074	-0.004	0.142	-0.012	0.020
11.O	-0.004	0.006	-0.002	-0.012	0.057	0.001	0.044	-0.053	-0.004
12.O	-0.002	0.023	-0.021	-0.004	-0.004	0.004	-0.004	-0.001	0.001
13.H	-0.006	-0.069	-0.099	-0.029	-0.327	-0.540	-0.016	-0.151	-0.275
14.H	-0.025	-0.345	0.006	0.004	0.051	-0.001	0.000	-0.001	0.003
15.H	-0.022	-0.448	-0.006	0.003	0.075	0.000	0.000	0.022	-0.001
16.H	0.001	-0.415	0.004	-0.001	0.060	-0.001	-0.001	0.013	0.000
17.H	0.021	0.432	0.005	-0.004	-0.057	-0.001	-0.001	-0.004	0.000
18.H	0.032	-0.223	-0.010	-0.005	0.047	0.002	-0.001	0.023	0.000
19.H	-0.006	-0.057	0.105	-0.031	-0.268	0.545	-0.009	-0.182	0.270
20.H	0.002	0.024	-0.026	0.016	0.134	-0.286	-0.033	-0.284	0.558
21.H	0.002	0.017	0.026	0.019	0.142	0.272	-0.025	-0.265	-0.551

	1465.123			1550.799			1595.218		
1.C	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000
2.C	0.221	0.000	0.000	0.466	0.000	0.000	-0.255	0.000	0.000
3.C	0.221	-0.094	0.000	-0.486	0.010	0.000	-0.215	0.211	0.000
4.C	0.002	-0.043	0.000	-0.001	0.192	-0.002	0.459	-0.104	0.002
5.N	-0.207	0.046	0.002	0.243	-0.144	-0.001	-0.209	-0.099	-0.003
6.C	-0.210	0.097	-0.004	-0.258	0.009	0.006	-0.182	0.190	0.003

7.Re	0.102	-0.046	-0.001	0.009	-0.064	0.007	0.088	-0.090	0.006
8.O	0.002	0.001	-0.004	0.001	-0.032	-0.001	-0.001	0.003	-0.007
9.C	0.002	0.001	-0.001	0.002	0.000	0.010	0.000	0.001	-0.001
10.C	0.005	-0.002	0.000	0.001	-0.001	0.000	0.001	0.000	-0.001
11.O	-0.002	0.000	0.000	-0.002	0.000	-0.001	-0.001	0.000	0.000
12.O	0.001	-0.001	-0.004	-0.002	0.021	-0.010	0.000	-0.002	-0.007
13.H	-0.001	-0.003	-0.022	0.000	0.002	-0.003	0.000	0.001	-0.003
14.H	-0.004	0.466	-0.008	0.000	0.159	-0.006	0.019	0.354	0.001
15.H	0.012	-0.374	-0.007	0.021	-0.015	-0.004	0.010	0.368	0.006
16.H	0.026	0.060	0.000	-0.001	0.500	-0.005	-0.021	-0.127	0.001
17.H	0.011	-0.395	-0.003	-0.021	0.051	0.003	0.013	0.373	0.005
18.H	-0.003	-0.511	-0.006	0.000	0.280	0.005	0.022	-0.258	-0.005
19.H	0.000	-0.006	0.017	0.000	0.000	-0.001	0.000	0.001	0.001
20.H	0.000	-0.001	0.009	0.000	0.005	-0.001	0.000	0.000	0.002
21.H	0.000	-0.002	-0.011	0.000	0.001	0.000	0.000	-0.001	-0.002

	2981.990			2991.950			3051.670		
1.C	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000
2.C	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000
3.C	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.N	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000
6.C	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000
7.Re	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000
8.O	-0.001	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000
9.C	-0.029	-0.008	0.020	0.004	0.003	-0.001	-0.006	-0.023	-0.017
10.C	-0.048	0.035	-0.019	-0.039	-0.013	-0.016	-0.018	-0.002	0.049
11.O	-0.003	-0.004	0.018	-0.029	0.037	0.012	-0.005	-0.015	-0.060
12.O	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000
13.H	0.837	-0.007	0.019	-0.055	-0.010	-0.002	-0.471	0.047	0.005
14.H	-0.003	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.001	0.000	0.000
15.H	-0.001	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000
16.H	-0.001	0.000	0.000	-0.001	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000
17.H	-0.001	0.000	0.000	-0.001	0.000	0.000	-0.001	0.000	0.000
18.H	-0.001	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	-0.002	0.000	0.000
19.H	0.526	0.016	-0.018	-0.123	0.020	0.009	0.765	-0.033	0.005
20.H	0.128	-0.003	-0.002	0.794	-0.010	-0.023	-0.200	0.016	-0.009
21.H	0.017	0.001	0.005	0.588	0.001	0.019	0.377	-0.018	-0.001

	3067.656			3128.525			3136.032		
1.C	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000
2.C	0.000	0.000	0.000	0.018	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000
3.C	0.000	0.000	0.000	0.014	-0.062	0.000	0.039	-0.015	0.000
4.C	0.000	0.000	0.000	-0.009	0.049	-0.001	-0.014	-0.036	0.001
5.N	0.000	0.000	0.000	0.009	-0.024	0.001	-0.026	0.052	0.000
6.C	0.000	0.000	0.000	0.001	0.007	0.000	0.003	-0.018	0.000
7.Re	0.000	0.000	0.000	0.000	-0.007	0.001	0.000	0.020	-0.001
8.O	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.002
9.C	-0.001	0.011	0.009	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000
10.C	-0.002	-0.020	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000
11.O	-0.002	0.012	-0.022	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000
12.O	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	-0.001	0.000	0.000	0.002
13.H	0.276	0.011	-0.049	0.000	0.000	0.000	-0.001	0.000	0.000
14.H	-0.004	0.000	0.000	-0.030	0.000	0.000	-0.090	0.002	-0.001
15.H	0.001	0.000	0.000	0.367	-0.033	-0.001	0.330	-0.020	0.000
16.H	0.000	0.000	0.000	-0.773	0.032	-0.001	-0.342	-0.005	0.001
17.H	0.000	0.000	0.000	0.446	-0.034	0.000	-0.488	0.001	0.000
18.H	0.002	0.000	0.000	-0.237	0.018	0.001	0.721	-0.030	0.000
19.H	-0.324	0.007	-0.036	0.000	0.000	0.000	0.002	0.000	0.000
20.H	-0.560	0.037	-0.012	0.000	0.000	0.000	0.001	0.000	0.000
21.H	0.705	-0.038	-0.007	0.000	0.000	0.000	-0.001	0.000	0.000

	3143.476			3151.856			3167.551		
1.C	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000
2.C	0.053	0.000	0.000	-0.026	0.000	0.000	-0.013	0.000	0.000
3.C	0.005	-0.006	0.000	-0.047	-0.005	0.000	-0.008	-0.004	0.000
4.C	-0.028	0.013	0.000	-0.055	0.015	0.000	-0.009	-0.001	0.000
5.N	-0.014	0.015	0.000	-0.017	0.009	0.000	-0.005	0.005	0.000
6.C	-0.006	-0.014	0.000	0.008	-0.009	0.001	-0.033	-0.031	-0.001
7.Re	0.000	0.011	0.000	0.001	0.016	0.000	0.000	0.003	0.000
8.O	0.000	0.000	0.001	0.000	0.000	0.001	0.000	0.000	0.000
9.C	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000
10.C	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000
11.O	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000
12.O	0.000	0.000	0.001	0.000	0.000	0.001	0.000	0.000	0.000
13.H	0.000	0.000	0.000	-0.001	0.000	0.000	0.004	0.000	0.000
14.H	0.156	-0.001	0.001	-0.230	0.007	-0.001	0.954	-0.031	0.004
15.H	-0.803	0.012	0.001	0.228	0.006	-0.001	0.230	-0.007	0.001
16.H	-0.367	0.020	0.000	0.364	0.011	0.000	0.092	-0.001	0.000
17.H	0.232	-0.020	0.000	0.701	-0.011	0.000	0.100	0.000	0.000
18.H	0.370	-0.002	0.001	0.514	0.011	0.001	0.125	-0.001	0.000
19.H	0.000	0.000	0.000	0.002	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000
20.H	0.000	0.000	0.000	0.002	0.000	0.000	-0.001	0.000	0.000
21.H	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.002	0.000	0.000

List of All Frequencies:

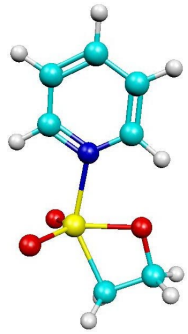
Intensities
==========

Frequency cm-1	Dipole Strength 1e-40 esu2 cm2	Absorption Intensity (degeneracy not counted) km/mole
33.046831	228.096592	1.889412
58.123065	274.768145	4.003068
101.532462	49.246222	1.253303
142.520768	89.749950	3.206199
157.462076	243.652237	9.616664
207.950157	30.388217	1.583954
223.769090	12.032636	0.674899
243.460768	5.591660	0.341230
290.726697	46.306847	3.374490
303.477158	175.134709	13.322211
378.917204	1.256858	0.119374
391.576108	3.183461	0.312459
427.929739	25.003158	2.681917
582.623695	6.659979	0.972611
642.233803	351.697113	56.616111
643.203263	125.113573	20.171154
655.027700	3.806276	0.624940
677.153188	433.905536	73.647870
682.512568	282.721456	48.366815
746.363403	256.097796	47.910891
820.860749	17.356327	3.571128
836.946835	453.506821	95.139259
845.675123	21.289549	4.512821
918.342913	0.847522	0.195090
925.765544	6.987394	1.621416
934.281532	55.031479	12.887451
949.432339	7.137334	1.698549
973.497776	1.047615	0.255632
1002.021452	39.840609	10.006474
1010.939830	342.916324	86.894350
1044.797124	1.740781	0.455884
1055.594568	19.830570	5.246992
1076.164187	11.083870	2.989841
1079.365910	13.974722	3.780854
1165.833390	5.286815	1.544930
1171.701723	33.555641	9.855092
1202.496317	34.695567	10.457691
1209.198087	1.476887	0.447634
1283.603827	0.449828	0.144729
1297.300671	27.440982	8.923153
1306.073147	28.537245	9.342382
1344.539456	11.509598	3.878929
1445.675525	114.595090	41.525504
1448.513999	45.244376	16.427269
1457.805281	7.810487	2.854011
1465.122667	54.272037	19.930958
1550.798895	4.885860	1.899217
1595.217895	9.825634	3.928789
2981.990299	1.090764	0.815295
2991.950217	6.327659	4.745429
3051.670153	0.157191	0.120238
3067.655519	1.258311	0.967548
3128.524656	1.105093	0.866595
3136.032462	4.906248	3.856632
3143.476128	22.431727	17.674655
3151.855923	29.155390	23.033678
3167.550995	6.665927	5.292516

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

1179.9825	3980.1293	4683.5684
0.6527	-0.7517	-0.0945
-0.7575	-0.6494	-0.0670
0.0110	-0.1153	0.9933

IIa



CCSD=-629.7130811

ATOMS cartesian

Re	-0.000123	-0.000438	0.000000
N	0.000405	2.165853	0.000000
O	1.908882	0.408096	0.000000
C	2.524597	-0.907578	0.000000
C	1.263474	-1.751052	0.000000
O	-0.856038	-0.394993	1.422293
O	-0.856038	-0.394993	-1.422293
H	1.069896	-2.340542	0.905221
H	1.069896	-2.340542	-0.905221
H	3.144165	-1.015537	0.899837
H	3.144165	-1.015537	-0.899837
C	-1.245690	2.704497	0.000000
C	-1.431149	4.075189	0.000000
C	-0.314959	4.910341	0.000000
C	0.956883	4.344161	0.000000
C	1.089315	2.964578	0.000000
H	-2.088154	2.014219	0.000000
H	-2.444971	4.474959	0.000000
H	-0.437990	5.994373	0.000000
H	1.853882	4.963309	0.000000
H	2.051324	2.456401	0.000000

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)

	-45.033			1.897			75.889		
1.Re	0.000	0.000	-0.021	0.000	0.000	-0.005	0.000	0.000	-0.025
2.N	0.000	0.000	0.056	0.000	0.000	0.037	0.000	0.000	-0.200
3.O	0.000	0.000	0.018	0.000	0.000	-0.174	0.000	0.000	-0.080
4.C	0.000	0.000	0.089	0.000	0.000	-0.143	0.000	0.000	0.202
5.C	0.000	0.000	0.176	0.000	0.000	0.233	0.000	0.000	0.083
6.O	-0.128	0.025	-0.089	-0.049	0.075	-0.011	0.082	0.150	0.064
7.O	0.128	-0.025	-0.089	0.049	-0.075	-0.011	-0.082	-0.150	0.064
8.H	0.000	0.113	0.250	0.134	0.251	0.425	-0.088	-0.049	0.031
9.H	0.000	-0.113	0.250	-0.134	-0.251	0.425	0.088	0.049	0.031
10.H	0.024	0.057	0.079	0.204	0.105	-0.271	-0.179	0.119	0.340
11.H	-0.024	-0.057	0.079	-0.204	-0.105	-0.271	0.179	-0.119	0.340
12.C	0.000	0.000	0.250	0.000	0.000	-0.034	0.000	0.000	-0.125
13.C	0.000	0.000	0.230	0.000	0.000	-0.047	0.000	0.000	0.112
14.C	0.000	0.000	0.011	0.000	0.000	0.029	0.000	0.000	0.249
15.C	0.000	0.000	-0.189	0.000	0.000	0.114	0.000	0.000	0.084
16.C	0.000	0.000	-0.160	0.000	0.000	0.107	0.000	0.000	-0.135
17.H	0.000	0.000	0.423	0.000	0.000	-0.082	0.000	0.000	-0.225
18.H	0.000	0.000	0.395	0.000	0.000	-0.114	0.000	0.000	0.196
19.H	0.000	0.000	-0.007	0.000	0.000	0.023	0.000	0.000	0.469
20.H	0.000	0.000	-0.367	0.000	0.000	0.177	0.000	0.000	0.148
21.H	0.000	0.000	-0.300	0.000	0.000	0.142	0.000	0.000	-0.215

	120.991			132.003			183.817		
1.Re	0.000	0.000	0.025	-0.041	-0.023	0.000	0.000	0.000	0.045
2.N	0.000	0.000	-0.171	-0.076	0.024	0.000	0.000	0.000	-0.156
3.O	0.000	0.000	0.229	-0.073	0.150	0.000	0.000	0.000	-0.256
4.C	0.000	0.000	-0.206	0.086	0.242	0.000	0.000	0.000	0.067
5.C	0.000	0.000	-0.036	0.186	0.097	0.000	0.000	0.000	0.171
6.O	-0.086	0.020	-0.023	0.038	-0.222	-0.010	-0.011	-0.412	-0.065
7.O	0.086	-0.020	-0.023	0.038	-0.222	0.010	0.011	0.412	-0.065
8.H	0.101	0.119	0.065	0.246	0.083	0.002	0.010	0.084	0.224
9.H	-0.101	-0.119	0.065	0.246	0.083	-0.002	-0.010	-0.084	0.224
10.H	0.277	-0.182	-0.419	0.100	0.313	0.000	-0.072	0.179	0.139
11.H	-0.277	0.182	-0.419	0.100	0.313	0.000	0.072	-0.179	0.139

12.C	0.000	0.000	-0.130	-0.026	0.142	0.000	0.000	0.000	-0.177
13.C	0.000	0.000	0.036	0.105	0.165	0.000	0.000	0.000	-0.008
14.C	0.000	0.000	0.127	0.174	0.074	0.000	0.000	0.000	0.118
15.C	0.000	0.000	-0.010	0.119	-0.041	0.000	0.000	0.000	-0.048
16.C	0.000	0.000	-0.149	-0.015	-0.050	0.000	0.000	0.000	-0.169
17.H	0.000	0.000	-0.198	-0.091	0.221	0.000	0.000	0.000	-0.278
18.H	0.000	0.000	0.100	0.141	0.257	0.000	0.000	0.000	0.027
19.H	0.000	0.000	0.291	0.266	0.085	0.000	0.000	0.000	0.308
20.H	0.000	0.000	0.018	0.182	-0.132	0.000	0.000	0.000	-0.037
21.H	0.000	0.000	-0.196	-0.055	-0.119	0.000	0.000	0.000	-0.219

	184.546			199.336			249.088		
1.Re	-0.004	-0.053	0.000	-0.053	0.096	0.000	0.000	0.000	-0.054
2.N	-0.024	-0.106	0.000	0.185	-0.168	0.000	0.000	0.000	0.015
3.O	-0.025	0.173	0.000	0.000	0.066	0.000	0.000	0.000	0.260
4.C	0.108	0.247	0.000	0.004	0.103	0.000	0.000	0.000	0.027
5.C	0.173	0.144	0.000	0.018	0.094	0.000	0.000	0.000	0.225
6.O	-0.159	0.338	0.018	0.065	-0.127	0.014	0.231	-0.098	0.044
7.O	-0.159	0.338	-0.018	0.065	-0.127	-0.014	-0.231	0.098	0.044
8.H	0.237	0.109	-0.004	-0.002	0.113	0.005	0.010	0.325	0.437
9.H	0.237	0.109	0.004	-0.002	0.113	-0.005	-0.010	-0.325	0.437
10.H	0.117	0.302	0.000	0.008	0.093	-0.002	0.220	-0.072	-0.132
11.H	0.117	0.302	0.000	0.008	0.093	0.002	-0.220	0.072	-0.132
12.C	-0.011	-0.083	0.000	0.144	-0.292	0.000	0.000	0.000	0.029
13.C	0.051	-0.078	0.000	0.041	-0.325	0.000	0.000	0.000	0.015
14.C	0.082	-0.118	0.000	-0.002	-0.269	0.000	0.000	0.000	-0.026
15.C	0.060	-0.156	0.000	0.050	-0.158	0.000	0.000	0.000	0.002
16.C	0.004	-0.154	0.000	0.163	-0.135	0.000	0.000	0.000	0.032
17.H	-0.030	-0.056	0.000	0.206	-0.370	0.000	0.000	0.000	0.030
18.H	0.068	-0.037	0.000	0.018	-0.386	0.000	0.000	0.000	0.018
19.H	0.117	-0.114	0.000	-0.079	-0.278	0.000	0.000	0.000	-0.071
20.H	0.086	-0.194	0.000	-0.009	-0.073	0.000	0.000	0.000	-0.005
21.H	-0.018	-0.187	0.000	0.178	-0.100	0.000	0.000	0.000	0.057

	256.352			316.090			379.233		
1.Re	-0.030	-0.054	0.000	0.059	0.047	0.000	0.000	0.000	0.000
2.N	0.272	0.091	0.000	-0.020	-0.019	0.000	0.000	0.000	-0.010
3.O	-0.056	0.053	0.000	0.177	-0.022	0.000	0.000	0.000	-0.009
4.C	0.009	0.097	0.000	0.111	-0.055	0.000	0.000	0.000	-0.002
5.C	0.048	0.027	0.000	0.061	0.022	0.000	0.000	0.000	-0.001
6.O	-0.078	-0.014	-0.015	-0.483	-0.181	-0.416	-0.003	0.007	-0.001
7.O	-0.078	-0.014	0.015	-0.483	-0.181	0.416	0.003	-0.007	-0.001
8.H	0.079	0.017	0.000	0.051	0.003	-0.011	0.002	-0.002	-0.002
9.H	0.079	0.017	0.000	0.051	0.003	0.011	-0.002	0.002	-0.002
10.H	0.013	0.121	0.000	0.110	-0.103	-0.004	0.000	0.001	-0.001
11.H	0.013	0.121	0.000	0.110	-0.103	0.004	0.000	-0.001	-0.001
12.C	0.240	-0.029	0.000	-0.029	-0.013	0.000	0.000	0.000	-0.176
13.C	0.032	-0.057	0.000	-0.013	-0.017	0.000	0.000	0.000	0.212
14.C	-0.096	0.101	0.000	0.002	-0.033	0.000	0.000	0.000	-0.027
15.C	-0.020	0.253	0.000	0.001	-0.036	0.000	0.000	0.000	-0.182
16.C	0.184	0.251	0.000	-0.008	-0.031	0.000	0.000	0.000	0.206
17.H	0.311	-0.116	0.000	-0.026	-0.014	0.000	0.000	0.000	-0.512
18.H	-0.033	-0.223	0.000	-0.005	0.002	0.000	0.000	0.000	0.405
19.H	-0.242	0.085	0.000	0.012	-0.031	0.000	0.000	0.000	-0.075
20.H	-0.105	0.377	0.000	0.001	-0.035	0.000	0.000	0.000	-0.380
21.H	0.256	0.388	0.000	-0.018	-0.055	0.000	0.000	0.000	0.522

	411.567			422.324			530.983		
1.Re	0.000	0.000	0.006	0.063	-0.027	0.000	0.030	0.026	0.000
2.N	0.000	0.000	-0.324	-0.005	-0.007	0.000	-0.002	0.026	0.000
3.O	0.000	0.000	-0.014	-0.144	0.245	0.000	-0.350	-0.051	0.000
4.C	0.000	0.000	0.002	-0.339	0.134	0.000	-0.135	0.094	0.000
5.C	0.000	0.000	0.005	-0.382	0.184	0.000	0.124	-0.368	0.000
6.O	-0.014	-0.017	-0.003	-0.003	-0.047	-0.044	-0.019	0.013	-0.036
7.O	0.014	0.017	-0.003	-0.003	-0.047	0.044	-0.019	0.013	0.036
8.H	-0.003	0.005	0.007	-0.364	0.159	-0.013	0.291	-0.393	0.018
9.H	0.003	-0.005	0.007	-0.364	0.159	0.013	0.291	-0.393	-0.018
10.H	0.002	0.007	0.001	-0.357	0.086	0.000	-0.095	0.305	-0.004
11.H	-0.002	-0.007	0.001	-0.357	0.086	0.000	-0.095	0.305	0.004
12.C	0.000	0.000	0.097	-0.002	-0.023	0.000	-0.009	-0.018	0.000
13.C	0.000	0.000	0.159	0.017	-0.022	0.000	-0.006	-0.026	0.000
14.C	0.000	0.000	-0.245	0.025	-0.031	0.000	0.009	-0.046	0.000
15.C	0.000	0.000	0.194	0.024	-0.024	0.000	0.027	-0.008	0.000
16.C	0.000	0.000	0.049	-0.003	-0.017	0.000	0.010	0.000	0.000
17.H	0.000	0.000	0.239	-0.002	-0.024	0.000	0.011	-0.044	0.000
18.H	0.000	0.000	0.361	0.025	-0.004	0.000	0.004	-0.001	0.000
19.H	0.000	0.000	-0.607	0.024	-0.031	0.000	0.000	-0.047	0.000
20.H	0.000	0.000	0.431	0.030	-0.034	0.000	0.012	0.012	0.000
21.H	0.000	0.000	0.129	-0.004	-0.005	0.000	-0.001	-0.017	0.000

	642.808			651.160			673.093		
1.Re	-0.004	-0.001	0.000	0.002	0.012	0.000	0.000	0.000	0.000
2.N	-0.135	0.035	0.000	0.017	-0.356	0.000	0.000	0.000	0.148
3.O	0.017	-0.002	0.000	0.005	0.023	0.000	0.000	0.000	0.004

4.C	0.018	-0.018	0.000	-0.042	0.018	0.000	0.000	0.000	0.000
5.C	0.002	0.005	0.000	0.006	-0.065	0.000	0.000	0.000	0.006
6.O	-0.002	-0.002	0.005	-0.002	0.002	-0.004	0.002	0.002	-0.001
7.O	-0.002	-0.002	-0.005	-0.002	0.002	0.004	-0.002	-0.002	-0.001
8.H	-0.006	0.007	0.000	0.019	-0.060	0.007	0.007	-0.032	-0.014
9.H	-0.006	0.007	0.000	0.019	-0.060	-0.007	-0.007	0.032	-0.014
10.H	0.015	-0.026	0.001	-0.035	0.016	-0.005	0.007	0.005	-0.005
11.H	0.015	-0.026	-0.001	-0.035	0.016	0.005	-0.007	-0.005	-0.005
12.C	-0.214	-0.247	0.000	0.180	-0.067	0.000	0.000	0.000	-0.108
13.C	0.231	-0.228	0.000	0.288	-0.014	0.000	0.000	0.000	0.143
14.C	0.152	-0.027	0.000	-0.021	0.371	0.000	0.000	0.000	-0.074
15.C	0.239	0.287	0.000	-0.224	-0.005	0.000	0.000	0.000	0.148
16.C	-0.213	0.214	0.000	-0.241	-0.056	0.000	0.000	0.000	-0.122
17.H	-0.258	-0.199	0.000	-0.030	0.195	0.000	0.000	0.000	-0.531
18.H	0.320	-0.012	0.000	0.168	-0.321	0.000	0.000	0.000	-0.145
19.H	-0.278	-0.076	0.000	-0.076	0.368	0.000	0.000	0.000	-0.554
20.H	0.322	0.173	0.000	-0.002	-0.328	0.000	0.000	0.000	-0.127
21.H	-0.283	0.079	0.000	-0.095	0.239	0.000	0.000	0.000	-0.525

	706.722			724.860			743.517		
1.Re	0.000	0.000	0.003	0.025	0.005	0.000	0.000	0.000	-0.001
2.N	0.000	0.000	0.006	0.001	-0.022	0.000	0.000	0.000	0.108
3.O	0.000	0.000	-0.008	-0.371	-0.403	0.000	0.000	0.000	0.001
4.C	0.000	0.000	-0.006	0.197	0.004	0.000	0.000	0.000	-0.001
5.C	0.000	0.000	-0.123	-0.047	0.409	0.000	0.000	0.000	0.000
6.O	-0.009	0.003	0.007	-0.017	-0.010	0.005	0.001	0.000	0.001
7.O	0.009	-0.003	0.007	-0.017	-0.010	-0.005	-0.001	0.000	0.001
8.H	-0.057	0.582	0.249	-0.144	0.393	-0.036	0.004	-0.001	0.001
9.H	0.057	-0.582	0.249	-0.144	0.393	0.036	-0.004	0.001	0.001
10.H	-0.240	-0.083	0.153	0.198	0.154	0.021	-0.004	-0.002	0.002
11.H	0.240	0.083	0.153	0.198	0.154	-0.021	0.004	0.002	0.002
12.C	0.000	0.000	-0.002	0.020	-0.010	0.000	0.000	0.000	-0.114
13.C	0.000	0.000	0.004	0.029	-0.008	0.000	0.000	0.000	0.005
14.C	0.000	0.000	-0.002	-0.006	0.037	0.000	0.000	0.000	-0.105
15.C	0.000	0.000	0.004	-0.024	-0.002	0.000	0.000	0.000	0.009
16.C	0.000	0.000	-0.004	-0.033	-0.010	0.000	0.000	0.000	-0.083
17.H	0.000	0.000	-0.018	0.007	0.005	0.000	0.000	0.000	0.288
18.H	0.000	0.000	-0.008	0.015	-0.043	0.000	0.000	0.000	0.633
19.H	0.000	0.000	-0.017	-0.015	0.037	0.000	0.000	0.000	0.377
20.H	0.000	0.000	-0.004	-0.003	-0.032	0.000	0.000	0.000	0.555
21.H	0.000	0.000	-0.009	-0.033	-0.017	0.000	0.000	0.000	0.154

	845.078			870.301			928.255		
1.Re	0.000	0.000	0.001	0.000	0.000	-0.001	0.000	0.000	0.002
2.N	0.000	0.000	0.008	0.000	0.000	0.004	0.000	0.000	-0.013
3.O	0.000	0.000	-0.001	0.000	0.000	-0.028	0.000	0.000	0.000
4.C	0.000	0.000	-0.001	0.000	0.000	0.078	0.000	0.000	0.001
5.C	0.000	0.000	0.001	0.000	0.000	-0.036	0.000	0.000	-0.001
6.O	0.002	0.002	-0.004	-0.013	-0.003	0.018	0.005	0.003	-0.010
7.O	-0.002	-0.002	-0.004	0.013	0.003	0.018	-0.005	-0.003	-0.010
8.H	0.009	-0.005	0.000	-0.532	0.140	-0.060	-0.007	0.004	0.000
9.H	-0.009	0.005	0.000	0.532	-0.140	-0.060	0.007	-0.004	0.000
10.H	-0.005	-0.002	0.002	0.390	0.058	-0.184	0.004	0.003	-0.002
11.H	0.005	0.002	0.002	-0.390	-0.058	-0.184	-0.004	-0.003	-0.002
12.C	0.000	0.000	0.090	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.113
13.C	0.000	0.000	0.057	0.000	0.000	0.001	0.000	0.000	-0.086
14.C	0.000	0.000	-0.021	0.000	0.000	-0.001	0.000	0.000	-0.057
15.C	0.000	0.000	-0.069	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.018
16.C	0.000	0.000	-0.076	0.000	0.000	-0.003	0.000	0.000	0.049
17.H	0.000	0.000	-0.524	0.000	0.000	-0.007	0.000	0.000	-0.677
18.H	0.000	0.000	-0.421	0.000	0.000	-0.007	0.000	0.000	0.504
19.H	0.000	0.000	0.103	0.000	0.000	0.002	0.000	0.000	0.335
20.H	0.000	0.000	0.591	0.000	0.000	0.008	0.000	0.000	-0.068
21.H	0.000	0.000	0.407	0.000	0.000	0.009	0.000	0.000	-0.380

	962.497			962.924			970.546		
1.Re	0.000	0.000	0.002	0.005	0.004	0.000	0.000	0.000	0.082
2.N	0.000	0.000	0.014	-0.015	0.092	0.000	0.000	0.000	-0.010
3.O	0.000	0.000	-0.003	-0.210	0.314	0.000	0.000	0.000	-0.035
4.C	0.000	0.000	0.001	0.373	-0.315	0.000	0.000	0.000	0.045
5.C	0.000	0.000	0.000	-0.099	-0.094	0.000	0.000	0.000	-0.035
6.O	0.006	0.003	-0.011	-0.032	-0.019	0.047	0.262	0.124	-0.460
7.O	-0.006	-0.003	-0.011	-0.032	-0.019	-0.047	-0.262	-0.124	-0.460
8.H	0.001	-0.001	0.000	-0.388	-0.047	-0.024	-0.143	0.114	0.008
9.H	-0.001	0.001	0.000	-0.388	-0.047	0.024	0.143	-0.114	0.008
10.H	0.004	-0.007	-0.003	0.328	-0.009	0.056	0.146	-0.024	-0.058
11.H	-0.004	0.007	-0.003	0.328	-0.009	-0.056	-0.146	0.024	-0.058
12.C	0.000	0.000	0.042	0.073	0.016	0.000	0.000	0.000	-0.033
13.C	0.000	0.000	-0.078	0.065	-0.036	0.000	0.000	0.000	0.054
14.C	0.000	0.000	0.053	-0.001	-0.030	0.000	0.000	0.000	-0.060
15.C	0.000	0.000	0.081	-0.051	-0.054	0.000	0.000	0.000	0.033
16.C	0.000	0.000	-0.131	-0.049	0.003	0.000	0.000	0.000	0.003
17.H	0.000	0.000	-0.174	0.088	0.006	0.000	0.000	0.000	0.236
18.H	0.000	0.000	0.382	0.045	-0.106	0.000	0.000	0.000	-0.277
19.H	0.000	0.000	-0.306	0.003	-0.034	0.000	0.000	0.000	0.327
20.H	0.000	0.000	-0.395	-0.034	-0.090	0.000	0.000	0.000	-0.180

21.H	0.000	0.000	0.734	-0.069	-0.025	0.000	0.000	0.000	0.008

	976.053			993.773			997.679		
1.Re	0.000	0.000	0.005	-0.011	-0.005	0.000	0.032	0.016	0.000
2.N	0.000	0.000	0.008	-0.023	0.113	0.000	0.017	-0.068	0.000
3.O	0.000	0.000	-0.002	-0.059	0.053	0.000	-0.034	0.057	0.000
4.C	0.000	0.000	0.002	-0.121	-0.190	0.000	-0.154	-0.176	0.000
5.C	0.000	0.000	-0.002	0.123	0.154	0.000	0.152	0.121	0.000
6.O	0.015	0.007	-0.026	0.066	0.030	-0.104	-0.185	-0.084	0.288
7.O	-0.015	-0.007	-0.026	0.066	0.030	0.104	-0.185	-0.084	-0.288
8.H	-0.011	0.007	0.000	0.532	-0.022	-0.033	0.452	0.016	-0.009
9.H	0.011	-0.007	0.000	0.532	-0.022	0.033	0.452	0.016	0.009
10.H	0.009	0.000	-0.004	-0.166	-0.288	0.008	-0.194	-0.250	0.007
11.H	-0.009	0.000	-0.004	-0.166	-0.288	-0.008	-0.194	-0.250	-0.007
12.C	0.000	0.000	-0.003	0.067	0.026	0.000	-0.051	-0.025	0.000
13.C	0.000	0.000	-0.063	0.088	-0.045	0.000	-0.053	0.030	0.000
14.C	0.000	0.000	0.130	-0.005	-0.039	0.000	0.005	0.035	0.000
15.C	0.000	0.000	-0.098	-0.064	-0.049	0.000	0.034	0.022	0.000
16.C	0.000	0.000	0.032	-0.047	0.005	0.000	0.041	-0.004	0.000
17.H	0.000	0.000	-0.046	0.066	0.037	0.000	-0.043	-0.044	0.000
18.H	0.000	0.000	0.352	0.072	-0.107	0.000	-0.044	0.070	0.000
19.H	0.000	0.000	-0.717	-0.035	-0.048	0.000	0.041	0.044	0.000
20.H	0.000	0.000	0.524	-0.064	-0.062	0.000	0.038	0.024	0.000
21.H	0.000	0.000	-0.224	-0.078	-0.051	0.000	0.079	0.065	0.000

	1012.751			1032.801			1056.201		
1.Re	0.012	0.002	0.000	0.002	-0.002	0.000	0.001	0.000	0.000
2.N	-0.042	0.299	0.000	-0.039	0.284	0.000	-0.015	0.074	0.000
3.O	0.115	-0.115	0.000	0.024	-0.017	0.000	0.016	-0.010	0.000
4.C	-0.050	0.179	0.000	-0.007	0.039	0.000	-0.012	0.016	0.000
5.C	-0.020	-0.057	0.000	-0.008	-0.018	0.000	0.004	-0.004	0.000
6.O	-0.081	-0.039	0.128	-0.012	-0.008	0.019	-0.007	-0.003	0.011
7.O	-0.081	-0.039	-0.128	-0.012	-0.008	-0.019	-0.007	-0.003	-0.011
8.H	-0.168	0.037	0.030	-0.050	0.006	0.007	-0.010	0.008	0.005
9.H	-0.168	0.037	-0.030	-0.050	0.006	-0.007	-0.010	0.008	-0.005
10.H	-0.018	0.138	-0.019	-0.001	0.042	-0.002	-0.011	0.010	-0.001
11.H	-0.018	0.138	0.019	-0.001	0.042	0.002	-0.011	0.010	0.001
12.C	0.187	0.126	0.000	-0.186	-0.179	0.000	0.129	0.010	0.000
13.C	0.261	-0.090	0.000	0.138	-0.093	0.000	-0.127	-0.035	0.000
14.C	0.021	-0.238	0.000	-0.046	0.317	0.000	-0.011	0.075	0.000
15.C	-0.231	-0.155	0.000	-0.102	-0.106	0.000	0.135	-0.001	0.000
16.C	-0.208	0.088	0.000	0.244	-0.152	0.000	-0.118	-0.026	0.000
17.H	0.175	0.174	0.000	-0.055	-0.358	0.000	0.272	-0.152	0.000
18.H	0.298	-0.072	0.000	0.080	-0.237	0.000	-0.325	-0.516	0.000
19.H	0.032	-0.263	0.000	-0.082	0.329	0.000	-0.023	0.085	0.000
20.H	-0.273	-0.143	0.000	-0.060	-0.164	0.000	0.409	-0.384	0.000
21.H	-0.193	0.157	0.000	0.082	-0.508	0.000	-0.246	-0.261	0.000

	1085.973			1103.232			1135.032		
1.Re	0.002	0.001	0.000	0.001	-0.001	0.000	0.000	0.000	-0.002
2.N	-0.087	-0.035	0.000	-0.009	-0.004	0.000	0.000	0.000	0.001
3.O	0.005	-0.001	0.000	-0.026	0.014	0.000	0.000	0.000	-0.050
4.C	0.005	0.006	0.000	-0.077	-0.027	0.000	0.000	0.000	0.155
5.C	-0.021	0.000	0.000	0.200	-0.029	0.000	0.000	0.000	-0.070
6.O	-0.007	-0.003	0.012	0.004	0.005	-0.013	-0.003	-0.001	0.007
7.O	-0.007	-0.003	-0.012	0.004	0.005	0.013	0.003	0.001	0.007
8.H	0.041	-0.036	-0.008	-0.545	0.380	0.089	0.446	0.051	0.060
9.H	0.041	-0.036	0.008	-0.545	0.380	-0.089	-0.446	-0.051	0.060
10.H	0.008	0.027	0.000	-0.099	-0.112	-0.001	0.343	-0.384	-0.118
11.H	0.008	0.027	0.000	-0.099	-0.112	0.001	-0.343	0.384	-0.118
12.C	0.051	0.111	0.000	0.004	0.010	0.000	0.000	0.000	0.000
13.C	0.074	-0.036	0.000	0.007	-0.001	0.000	0.000	0.000	0.000
14.C	-0.096	-0.025	0.000	-0.009	-0.003	0.000	0.000	0.000	0.000
15.C	0.066	0.070	0.000	0.006	0.007	0.000	0.000	0.000	0.000
16.C	0.073	-0.087	0.000	0.007	-0.008	0.000	0.000	0.000	0.001
17.H	-0.178	0.402	0.000	-0.008	0.026	0.000	0.000	0.000	-0.001
18.H	-0.006	-0.265	0.000	0.005	-0.008	0.000	0.000	0.000	-0.001
19.H	-0.595	-0.082	0.000	-0.058	-0.009	0.000	0.000	0.000	0.000
20.H	-0.103	0.333	0.000	-0.014	0.037	0.000	0.000	0.000	0.003
21.H	-0.088	-0.418	0.000	-0.004	-0.031	0.000	0.000	0.000	-0.011

	1169.349			1183.830			1207.613		
1.Re	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000
2.N	-0.021	-0.007	0.000	0.000	0.000	0.000	-0.014	0.000	0.000
3.O	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.027	-0.003	-0.002	0.000
4.C	-0.001	0.000	0.000	0.000	0.000	0.036	0.003	0.000	0.000
5.C	0.001	-0.001	0.000	0.000	0.000	-0.076	0.001	0.001	0.000
6.O	0.000	0.000	0.001	0.000	-0.001	0.000	0.002	0.001	-0.002
7.O	0.000	0.000	-0.001	0.000	0.001	0.000	0.002	0.001	0.002
8.H	-0.004	0.003	0.001	0.266	0.083	0.034	-0.007	0.001	-0.001
9.H	-0.004	0.003	-0.001	-0.266	-0.083	0.034	-0.007	0.001	0.001
10.H	-0.002	0.002	0.000	0.170	0.623	-0.013	0.004	-0.014	-0.002
11.H	-0.002	0.002	0.000	-0.170	-0.623	-0.013	0.004	-0.014	0.002

12.C	-0.002	0.004	0.000	0.000	0.000	0.000	-0.066	0.052	0.000
13.C	-0.011	-0.032	0.000	0.000	0.000	0.000	0.010	-0.048	0.000
14.C	0.060	0.003	0.000	0.000	0.000	0.000	-0.001	-0.006	0.000
15.C	-0.022	0.034	0.000	0.000	0.000	0.000	0.011	-0.049	0.000
16.C	-0.003	-0.003	0.000	0.000	0.000	-0.001	0.059	0.058	0.000
17.H	-0.078	0.096	0.000	0.000	0.000	0.000	-0.328	0.367	0.000
18.H	-0.181	-0.461	0.000	0.000	0.000	0.000	-0.157	-0.474	0.000
19.H	0.649	0.069	0.000	0.000	0.000	0.000	-0.004	-0.008	0.000
20.H	-0.303	0.439	0.000	0.000	0.000	0.000	0.218	-0.350	0.000
21.H	-0.068	-0.130	0.000	0.000	0.000	0.007	0.281	0.490	0.000

	1300.445			1321.124			1341.488		
1.Re	0.001	0.001	0.000	-0.001	-0.001	0.000	0.000	0.000	0.000
2.N	-0.425	-0.051	0.000	0.006	-0.001	0.000	0.031	-0.005	0.000
3.O	0.008	-0.011	0.000	0.042	-0.006	0.000	-0.004	0.001	0.000
4.C	-0.003	-0.002	0.000	-0.070	-0.133	0.000	0.003	0.009	0.000
5.C	-0.002	0.003	0.000	0.012	0.019	0.000	0.000	-0.003	0.000
6.O	0.000	0.002	0.000	0.002	0.001	-0.004	-0.001	0.000	0.001
7.O	0.000	0.002	0.000	0.002	0.001	0.004	-0.001	0.000	-0.001
8.H	-0.002	-0.005	-0.004	0.006	0.082	0.033	-0.003	0.001	0.002
9.H	-0.002	-0.005	0.004	0.006	0.082	-0.033	-0.003	0.001	-0.002
10.H	0.009	0.027	-0.004	0.093	0.684	-0.020	-0.012	-0.043	0.004
11.H	0.009	0.027	0.004	0.093	0.684	0.020	-0.012	-0.043	-0.004
12.C	0.232	-0.223	0.000	-0.001	-0.002	0.000	0.035	-0.055	0.000
13.C	0.070	0.195	0.000	-0.001	-0.003	0.000	-0.007	-0.016	0.000
14.C	-0.185	-0.007	0.000	-0.003	-0.002	0.000	-0.085	-0.017	0.000
15.C	0.134	-0.164	0.000	-0.004	0.002	0.000	-0.019	0.016	0.000
16.C	0.169	0.227	0.000	0.002	0.007	0.000	0.035	0.086	0.000
17.H	0.299	-0.319	0.000	-0.030	0.033	0.000	-0.369	0.428	0.000
18.H	-0.018	-0.031	0.000	0.006	0.015	0.000	0.102	0.255	0.000
19.H	0.310	0.051	0.000	0.025	0.001	0.000	0.372	0.034	0.000
20.H	-0.098	0.182	0.000	0.020	-0.033	0.000	0.207	-0.311	0.000
21.H	0.214	0.360	0.000	-0.010	-0.019	0.000	-0.258	-0.483	0.000

	1410.936			1443.720			1468.831		
1.Re	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000
2.N	0.000	0.000	0.000	0.122	-0.007	0.000	0.027	0.080	0.000
3.O	0.007	-0.003	0.000	-0.001	0.001	0.000	0.003	-0.001	0.000
4.C	-0.007	-0.005	0.000	0.001	-0.001	0.000	-0.002	0.001	0.000
5.C	0.065	0.074	0.000	0.003	0.002	0.000	0.001	0.000	0.000
6.O	0.001	0.000	0.001	0.000	0.000	-0.001	0.000	0.000	0.000
7.O	0.001	0.000	-0.001	0.000	0.000	0.001	0.000	0.000	0.000
8.H	-0.273	-0.479	-0.412	-0.007	-0.011	-0.010	-0.001	0.001	0.000
9.H	-0.273	-0.479	0.412	-0.007	-0.011	0.010	-0.001	0.001	0.000
10.H	-0.109	0.064	0.072	-0.018	0.006	0.012	0.014	-0.001	-0.010
11.H	-0.109	0.064	-0.072	-0.018	0.006	-0.012	0.014	-0.001	0.010
12.C	0.001	0.001	0.000	-0.060	-0.105	0.000	0.087	-0.093	0.000
13.C	-0.001	-0.003	0.000	0.023	0.197	0.000	-0.084	-0.063	0.000
14.C	-0.001	0.000	0.000	0.061	-0.016	0.000	-0.005	0.088	0.000
15.C	-0.001	0.003	0.000	0.016	-0.155	0.000	0.108	-0.099	0.000
16.C	0.000	-0.002	0.000	-0.044	0.142	0.000	-0.092	-0.068	0.000
17.H	0.001	0.002	0.000	-0.231	0.064	0.000	-0.398	0.493	0.000
18.H	0.004	0.009	0.000	-0.245	-0.442	0.000	0.067	0.353	0.000
19.H	0.009	0.001	0.000	-0.522	-0.086	0.000	-0.087	0.098	0.000
20.H	0.004	-0.004	0.000	-0.239	0.181	0.000	-0.238	0.411	0.000
21.H	0.003	0.002	0.000	-0.303	-0.326	0.000	0.120	0.367	0.000

	1477.168			1557.150			1592.646		
1.Re	0.000	0.000	0.000	-0.001	0.000	0.000	0.000	-0.001	0.000
2.N	-0.002	0.000	0.000	0.177	0.030	0.000	0.019	-0.106	0.000
3.O	0.009	-0.008	0.000	0.000	0.003	0.000	-0.001	0.001	0.000
4.C	0.085	-0.007	0.000	0.001	-0.002	0.000	-0.001	-0.001	0.000
5.C	-0.010	-0.016	0.000	0.000	0.001	0.000	0.000	0.001	0.000
6.O	0.000	0.000	-0.001	0.001	0.000	-0.002	0.001	0.001	0.001
7.O	0.000	0.000	0.001	0.001	0.000	0.002	0.001	0.001	-0.001
8.H	0.050	0.082	0.073	0.003	-0.001	-0.001	0.000	-0.001	-0.001
9.H	0.050	0.082	-0.073	0.003	-0.001	0.001	0.000	-0.001	0.001
10.H	-0.541	0.114	0.419	-0.002	0.006	0.003	0.000	0.001	-0.001
11.H	-0.541	0.114	-0.419	-0.002	0.006	-0.003	0.000	0.001	0.001
12.C	0.001	0.000	0.000	-0.152	0.044	0.000	-0.097	0.261	0.000
13.C	-0.001	-0.003	0.000	0.209	0.121	0.000	-0.023	-0.278	0.000
14.C	0.000	0.001	0.000	-0.409	-0.056	0.000	-0.044	0.140	0.000
15.C	0.001	0.000	0.000	0.216	-0.030	0.000	0.116	-0.271	0.000
16.C	0.000	-0.002	0.000	-0.142	-0.115	0.000	0.021	0.263	0.000
17.H	-0.002	0.005	0.000	0.089	-0.255	0.000	0.371	-0.269	0.000
18.H	0.003	0.007	0.000	0.101	-0.218	0.000	0.216	0.286	0.000
19.H	0.002	0.002	0.000	0.616	0.058	0.000	0.023	0.174	0.000
20.H	-0.001	0.004	0.000	0.094	0.192	0.000	-0.263	0.260	0.000
21.H	0.010	0.017	0.000	0.050	0.266	0.000	-0.278	-0.266	0.000

	2992.110			3014.642			3058.276		
1.Re	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000
2.N	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000
3.O	-0.001	0.001	0.000	0.001	0.000	0.000	0.000	0.000	-0.001

4.C	-0.065	0.009	0.000	0.006	0.001	0.000	0.000	0.000	0.096
5.C	0.000	-0.003	0.000	-0.023	-0.062	0.000	0.000	0.000	-0.021
6.O	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000
7.O	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000
8.H	0.006	0.021	-0.034	0.124	0.362	-0.592	-0.025	-0.079	0.125
9.H	0.006	0.021	0.034	0.124	0.362	0.592	0.025	0.079	0.125
10.H	0.381	-0.064	0.589	-0.020	0.002	-0.033	-0.388	0.061	-0.564
11.H	0.381	-0.064	-0.589	-0.020	0.002	0.033	0.388	-0.061	-0.564
12.C	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000
13.C	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000
14.C	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000
15.C	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000
16.C	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000
17.H	0.002	0.001	0.000	-0.002	-0.002	0.000	0.000	0.000	0.000
18.H	0.001	0.000	0.000	-0.002	0.001	0.000	0.000	0.000	0.000
19.H	0.000	-0.001	0.000	0.000	0.002	0.000	0.000	0.000	0.000
20.H	-0.001	-0.001	0.000	0.001	0.001	0.000	0.000	0.000	0.000
21.H	-0.006	0.002	0.000	0.003	-0.002	0.000	0.000	0.000	0.000

	3097.657			3126.886			3133.032		
1.Re	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000
2.N	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	-0.001	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	0.021	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000
5.C	0.000	0.000	0.095	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000
6.O	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000
7.O	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000
8.H	0.122	0.371	-0.566	0.000	0.000	0.001	0.000	0.000	0.000
9.H	-0.122	-0.371	-0.566	0.000	0.000	-0.001	0.000	0.000	0.000
10.H	-0.086	0.012	-0.123	0.000	0.000	0.001	0.000	0.000	0.000
11.H	0.086	-0.012	-0.123	0.000	0.000	-0.001	0.000	0.000	0.000
12.C	0.000	0.000	0.000	0.018	0.015	0.000	0.053	0.045	0.000
13.C	0.000	0.000	0.000	-0.032	0.014	0.000	-0.033	0.009	0.000
14.C	0.000	0.000	0.000	0.008	-0.068	0.000	-0.002	0.030	0.000
15.C	0.000	0.000	0.000	0.024	0.019	0.000	-0.019	-0.014	0.000
16.C	0.000	0.000	0.000	-0.006	0.002	0.000	0.010	-0.006	0.000
17.H	0.000	0.000	0.000	-0.206	-0.170	0.000	-0.612	-0.507	0.000
18.H	0.000	0.000	0.000	0.379	-0.152	0.000	0.365	-0.141	0.000
19.H	0.000	0.000	0.000	-0.088	0.782	0.000	0.036	-0.330	0.000
20.H	0.000	0.000	0.000	-0.296	-0.207	0.000	0.226	0.158	0.000
21.H	0.000	0.000	0.000	0.063	-0.031	0.000	-0.131	0.067	0.000

	3140.308			3148.984			3156.900		
1.Re	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000
2.N	-0.001	0.000	0.000	-0.001	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	0.001	0.000	0.000
5.C	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000
6.O	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000
7.O	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000
8.H	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.001	0.001	0.002	-0.003
9.H	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	-0.001	0.001	0.002	0.003
10.H	0.001	0.000	0.001	0.000	0.000	0.000	-0.003	0.000	-0.004
11.H	0.001	0.000	-0.001	0.000	0.000	0.000	-0.003	0.000	0.004
12.C	0.017	0.014	0.000	0.027	0.027	0.000	-0.017	-0.015	0.000
13.C	0.010	-0.007	0.000	0.061	-0.026	0.000	-0.029	0.011	0.000
14.C	-0.007	0.035	0.000	-0.001	-0.020	0.000	-0.003	0.023	0.000
15.C	0.056	0.035	0.000	0.008	0.010	0.000	0.034	0.026	0.000
16.C	-0.036	0.017	0.000	0.036	-0.020	0.000	0.057	-0.032	0.000
17.H	-0.187	-0.157	0.000	-0.315	-0.264	0.000	0.187	0.158	0.000
18.H	-0.127	0.053	0.000	-0.679	0.270	0.000	0.322	-0.128	0.000
19.H	0.047	-0.388	0.000	-0.022	0.217	0.000	0.028	-0.243	0.000
20.H	-0.610	-0.419	0.000	-0.111	-0.080	0.000	-0.384	-0.268	0.000
21.H	0.412	-0.209	0.000	-0.420	0.216	0.000	-0.649	0.335	0.000

List of All Frequencies:

Intensities
==========

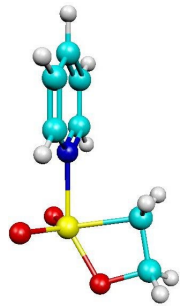
Frequency cm-1	Dipole Strength 1e-40 esu2 cm2	Absorption Intensity (degeneracy not counted) km/mole
-45.033140	84.578587	-0.954708
1.896596	0.000000	0.000000
75.889147	115.150273	2.190396
120.991202	64.209159	1.947282
132.003000	56.133696	1.857315
183.816505	35.238342	1.623596
184.545932	123.053592	5.692157
199.335905	211.934042	10.589229
249.087659	0.106901	0.006674
256.351997	50.556452	3.248564
316.089850	18.272806	1.447751

379.232866	0.005114	0.000486
411.566790	24.505643	2.528043
422.323879	11.158344	1.181200
530.983065	129.230861	17.199863
642.807848	2.945034	0.474515
651.159794	56.346574	9.196724
673.093391	277.183345	46.764956
706.722042	0.430761	0.076307
724.859751	268.394828	48.764772
743.517484	312.098268	58.164850
845.077584	5.773105	1.222881
870.301328	20.401668	4.450547
928.254661	0.264381	0.061514
962.496613	5.323268	1.284268
962.923839	421.700811	101.782812
970.546449	318.803763	77.556434
976.052946	9.501731	2.324632
993.772755	128.376137	31.977865
997.679491	157.340734	39.346879
1012.750638	18.909736	4.800274
1032.801254	14.980166	3.878033
1056.200537	89.824044	23.780285
1085.972574	20.933539	5.698225
1103.232210	37.402982	10.343112
1135.031636	3.955657	1.125394
1169.349465	5.505897	1.613803
1183.830473	0.025390	0.007534
1207.612914	75.663308	22.902935
1300.445018	8.420574	2.744807
1321.123764	13.272960	4.395308
1341.487840	23.415010	7.873343
1410.935762	42.518031	15.036905
1443.719608	129.677706	46.927373
1468.831343	29.494179	10.858912
1477.167935	0.778928	0.288407
1557.149781	2.482588	0.968976
1592.646307	62.015102	24.756821
2992.109610	19.910219	14.932468
3014.642104	11.464466	8.662987
3058.275907	1.655846	1.269330
3097.656691	7.708925	5.985565
3126.885664	0.085106	0.066704
3133.031653	5.547636	4.356632
3140.307517	40.088792	31.555366
3148.983862	62.571403	49.388336
3156.900349	6.089175	4.818340

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

1180.4561	3787.3006	4482.1163
-0.1619	0.9868	0.0000
0.9868	0.1619	0.0000
0.0000	0.0000	1.0000

IIb



060
CCSD=-629.6934379

ATOMS cartesian

Re	0.000529	-0.001680	0.000000
N	-0.006003	2.161839	0.000000
C	2.129462	0.373668	0.000000
C	2.391369	-1.114906	0.000000
O	0.968862	-1.595646	0.000000
O	-0.899146	0.043852	1.458831
O	-0.899146	0.043852	-1.458831
H	2.449952	0.915696	0.901472
H	2.449952	0.915696	-0.901472
H	2.861205	-1.518185	0.904388
H	2.861205	-1.518185	-0.904388
C	-0.005200	2.840412	1.173090
C	0.001818	4.226086	1.199082
C	0.008988	4.933783	0.000000
C	0.001818	4.226086	-1.199082
C	-0.005200	2.840412	-1.173090
H	-0.034017	2.246578	2.083932
H	-0.013771	4.735512	2.162701
H	0.010904	6.024534	0.000000
H	-0.013771	4.735512	-2.162701
H	-0.034017	2.246578	-2.083932

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)

	57.618			63.622			86.171		
1.Re	-0.022	-0.018	0.000	0.000	0.000	-0.005	0.000	0.000	-0.020
2.N	-0.159	-0.009	0.000	0.000	0.000	-0.003	0.000	0.000	0.006
3.C	-0.062	0.191	0.000	0.000	0.000	-0.236	0.000	0.000	0.071
4.C	0.086	0.219	0.000	0.000	0.000	0.032	0.000	0.000	0.284
5.O	0.133	0.076	0.000	0.000	0.000	0.071	0.000	0.000	-0.201
6.O	-0.028	-0.094	-0.001	0.078	0.066	0.043	0.141	-0.066	0.068
7.O	-0.028	-0.094	0.001	-0.078	-0.066	0.043	-0.141	0.066	0.068
8.H	-0.119	0.225	0.000	0.122	0.220	-0.414	-0.035	0.155	-0.013
9.H	-0.119	0.225	0.000	-0.122	-0.220	-0.414	0.035	-0.155	-0.013
10.H	0.125	0.267	0.001	-0.033	0.165	0.123	-0.336	0.094	0.501
11.H	0.125	0.267	-0.001	0.033	-0.165	0.123	0.336	-0.094	0.501
12.C	-0.090	-0.007	-0.001	-0.147	-0.017	0.008	0.030	0.008	0.003
13.C	0.136	-0.010	0.004	-0.141	-0.018	0.032	0.017	0.009	-0.012
14.C	0.278	-0.014	0.000	0.000	0.000	0.043	0.000	0.000	-0.018
15.C	0.136	-0.010	-0.004	0.141	0.018	0.032	-0.017	-0.009	-0.012
16.C	-0.090	-0.007	0.001	0.147	0.017	0.008	-0.030	-0.008	0.003
17.H	-0.214	-0.007	-0.004	-0.252	-0.033	-0.007	0.079	0.013	0.008
18.H	0.196	-0.007	0.003	-0.257	-0.032	0.038	0.034	0.018	-0.017
19.H	0.480	-0.014	0.000	0.000	0.000	0.057	0.000	0.000	-0.026
20.H	0.196	-0.007	-0.003	0.257	0.032	0.038	-0.034	-0.018	-0.017
21.H	-0.214	-0.007	0.004	0.252	0.033	-0.007	-0.079	-0.013	0.008

	106.518			182.328			184.126		
1.Re	0.000	0.000	-0.024	0.000	0.000	-0.012	0.056	-0.040	0.000
2.N	0.000	0.000	-0.031	0.000	0.000	-0.150	-0.240	0.104	0.000
3.C	0.000	0.000	-0.110	0.000	0.000	0.182	0.019	-0.102	0.000
4.C	0.000	0.000	0.188	0.000	0.000	-0.016	-0.086	-0.127	0.000
5.O	0.000	0.000	0.200	0.000	0.000	0.030	-0.126	-0.125	0.000
6.O	-0.054	0.100	-0.058	0.123	0.152	0.057	0.039	0.117	-0.021
7.O	0.054	-0.100	-0.058	-0.123	-0.152	0.057	0.039	0.117	0.021
8.H	0.060	0.202	-0.256	-0.220	-0.210	0.392	0.048	-0.124	0.002
9.H	-0.060	-0.202	-0.256	0.220	0.210	0.392	0.048	-0.124	-0.002
10.H	-0.059	0.183	0.300	0.087	-0.131	-0.120	-0.121	-0.148	0.007
11.H	0.059	-0.183	0.300	-0.087	0.131	-0.120	-0.121	-0.148	-0.007

12.C	0.131	-0.046	-0.004	-0.021	-0.090	-0.101	-0.252	0.115	-0.007
13.C	0.160	-0.049	0.059	-0.008	-0.100	0.030	-0.039	0.118	0.001
14.C	0.000	0.000	0.088	0.000	0.000	0.091	0.161	0.118	0.000
15.C	-0.160	0.049	0.059	0.008	0.100	0.030	-0.039	0.118	-0.001
16.C	-0.131	0.046	-0.004	0.021	0.090	-0.101	-0.252	0.115	0.007
17.H	0.179	-0.082	-0.026	-0.064	-0.162	-0.152	-0.353	0.125	-0.004
18.H	0.289	-0.094	0.085	-0.022	-0.189	0.077	-0.007	0.125	-0.002
19.H	0.000	0.000	0.133	0.000	0.000	0.177	0.411	0.119	0.000
20.H	-0.289	0.094	0.085	0.022	0.189	0.077	-0.007	0.125	0.002
21.H	-0.179	0.082	-0.026	0.064	0.162	-0.152	-0.353	0.125	0.004

	228.379			237.007			242.740		
1.Re	0.021	0.111	0.000	0.007	0.007	0.000	0.000	0.000	-0.062
2.N	-0.128	-0.120	0.000	0.031	0.144	0.000	0.000	0.000	0.245
3.C	0.147	-0.139	0.000	0.063	-0.085	0.000	0.000	0.000	0.087
4.C	-0.032	-0.182	0.000	-0.024	-0.105	0.000	0.000	0.000	0.003
5.O	-0.058	0.059	0.000	-0.036	-0.014	0.000	0.000	0.000	0.147
6.O	0.007	-0.147	0.002	-0.093	-0.422	-0.055	0.112	0.136	0.000
7.O	0.007	-0.147	-0.002	-0.093	-0.422	0.055	-0.112	-0.136	0.000
8.H	0.229	-0.184	-0.001	0.125	-0.113	-0.004	-0.213	-0.141	0.252
9.H	0.229	-0.184	0.001	0.125	-0.113	0.004	0.213	0.141	0.252
10.H	-0.071	-0.243	-0.005	-0.047	-0.138	-0.002	0.117	-0.053	-0.081
11.H	-0.071	-0.243	0.005	-0.047	-0.138	0.002	-0.117	0.053	-0.081
12.C	-0.156	-0.150	0.018	0.051	0.191	-0.009	0.020	0.117	0.192
13.C	-0.023	-0.165	0.015	0.010	0.205	-0.012	-0.021	0.133	0.015
14.C	0.119	-0.184	0.000	-0.036	0.223	0.000	0.000	0.000	-0.066
15.C	-0.023	-0.165	-0.015	0.010	0.205	0.012	0.021	-0.133	0.015
16.C	-0.156	-0.150	-0.018	0.051	0.191	0.009	-0.020	-0.117	0.192
17.H	-0.234	-0.171	0.001	0.125	0.216	0.011	0.096	0.203	0.254
18.H	-0.010	-0.146	0.004	0.023	0.196	-0.006	-0.031	0.254	-0.048
19.H	0.297	-0.185	0.000	-0.090	0.224	0.000	0.000	0.000	-0.184
20.H	-0.010	-0.146	-0.004	0.023	0.196	0.006	0.031	-0.254	-0.048
21.H	-0.234	-0.171	-0.001	0.125	0.216	-0.011	-0.096	-0.203	0.254

	287.833			294.216			360.191		
1.Re	0.000	0.000	-0.041	-0.073	0.003	0.000	0.000	0.000	-0.003
2.N	0.000	0.000	-0.071	-0.019	0.024	0.000	0.000	0.000	0.018
3.C	0.000	0.000	0.044	-0.103	-0.056	0.000	0.000	0.000	0.011
4.C	0.000	0.000	0.027	-0.050	-0.051	0.000	0.000	0.000	0.000
5.O	0.000	0.000	0.517	-0.021	0.034	0.000	0.000	0.000	-0.002
6.O	0.172	-0.405	0.056	0.519	-0.114	0.400	0.012	-0.012	0.005
7.O	-0.172	0.405	0.056	0.519	-0.114	-0.400	-0.012	0.012	0.005
8.H	-0.096	-0.068	0.120	-0.153	-0.038	0.004	-0.030	-0.005	0.024
9.H	0.096	0.068	0.120	-0.153	-0.038	-0.004	0.030	0.005	0.024
10.H	0.311	0.004	-0.132	-0.030	-0.029	0.001	0.006	-0.013	-0.010
11.H	-0.311	-0.004	-0.132	-0.030	-0.029	-0.001	-0.006	0.013	-0.010
12.C	0.009	-0.033	-0.062	-0.015	0.051	-0.001	-0.188	0.016	0.010
13.C	-0.018	-0.036	-0.022	-0.005	0.055	-0.006	0.193	0.015	0.002
14.C	0.000	0.000	0.000	0.017	0.066	0.000	0.000	0.000	-0.013
15.C	0.018	0.036	-0.022	-0.005	0.055	0.006	-0.193	-0.015	0.002
16.C	-0.009	0.033	-0.062	-0.015	0.051	0.001	0.188	-0.016	0.010
17.H	0.032	-0.054	-0.074	0.008	0.057	0.004	-0.530	0.025	0.005
18.H	-0.036	-0.065	-0.008	0.004	0.049	-0.002	0.375	0.033	-0.005
19.H	0.000	0.000	0.035	0.048	0.066	0.000	0.000	0.000	-0.039
20.H	0.036	0.065	-0.008	0.004	0.049	0.002	-0.375	-0.033	-0.005
21.H	-0.032	0.054	-0.074	0.008	0.057	-0.004	0.530	-0.025	0.005

	366.893			438.049			576.881		
1.Re	-0.062	-0.015	0.000	0.003	0.001	0.000	0.012	0.031	0.000
2.N	0.002	0.010	0.000	-0.338	0.000	0.000	-0.026	-0.004	0.000
3.C	0.308	-0.190	0.000	0.059	-0.009	0.000	-0.415	-0.206	0.000
4.C	0.323	-0.187	0.000	0.006	-0.025	0.000	0.108	-0.134	0.000
5.O	0.293	0.131	0.000	-0.005	0.010	0.000	0.202	-0.118	0.000
6.O	-0.034	0.083	0.020	0.010	0.015	0.002	-0.022	0.000	-0.016
7.O	-0.034	0.083	-0.020	0.010	0.015	-0.002	-0.022	0.000	0.016
8.H	0.302	-0.191	0.002	0.084	-0.031	0.003	-0.521	-0.078	-0.034
9.H	0.302	-0.191	-0.002	0.084	-0.031	-0.003	-0.521	-0.078	0.034
10.H	0.308	-0.233	-0.008	-0.009	-0.042	0.001	0.251	0.019	-0.002
11.H	0.308	-0.233	0.008	-0.009	-0.042	-0.001	0.251	0.019	0.002
12.C	-0.038	0.041	-0.007	0.047	-0.004	-0.002	-0.016	0.005	0.004
13.C	-0.024	0.051	-0.013	0.179	-0.005	0.000	0.024	0.005	0.000
14.C	0.043	0.070	0.000	-0.243	-0.004	0.000	-0.024	0.008	0.000
15.C	-0.024	0.051	0.013	0.179	-0.005	0.000	0.024	0.005	0.000
16.C	-0.038	0.041	0.007	0.047	-0.004	0.002	-0.016	0.005	-0.004
17.H	-0.011	0.060	0.005	0.134	-0.002	0.002	-0.036	0.008	0.005
18.H	-0.026	0.039	-0.006	0.420	-0.007	0.005	0.049	0.003	0.002
19.H	0.118	0.071	0.000	-0.586	-0.003	0.000	-0.062	0.008	0.000
20.H	-0.026	0.039	0.006	0.420	-0.007	-0.005	0.049	0.003	-0.002
21.H	-0.011	0.060	-0.005	0.134	-0.002	-0.002	-0.036	0.008	-0.005

	639.586			643.217			643.610		
1.Re	0.000	0.000	0.002	0.004	0.005	0.000	0.000	0.000	0.004
2.N	0.000	0.000	0.130	-0.102	-0.160	0.000	0.000	0.000	-0.006
3.C	0.000	0.000	-0.030	-0.016	0.007	0.000	0.000	0.000	-0.147

4.C	0.000	0.000	-0.001	-0.019	0.003	0.000	0.000	0.000	-0.001
5.O	0.000	0.000	0.000	0.000	-0.005	0.000	0.000	0.000	-0.004
6.O	-0.009	0.003	0.009	-0.002	0.006	-0.003	-0.024	-0.011	0.014
7.O	0.009	-0.003	0.009	-0.002	0.006	0.003	0.024	0.011	0.014
8.H	-0.096	-0.070	0.048	0.002	-0.001	-0.001	-0.521	-0.305	0.233
9.H	0.096	0.070	0.048	0.002	-0.001	0.001	0.521	0.305	0.233
10.H	-0.021	0.044	0.030	-0.003	0.011	-0.004	-0.100	0.197	0.141
11.H	0.021	-0.044	0.030	-0.003	0.011	0.004	0.100	-0.197	0.141
12.C	-0.011	-0.225	0.209	0.050	-0.032	-0.097	0.002	0.009	-0.011
13.C	0.006	-0.252	-0.236	-0.098	-0.008	-0.125	-0.002	0.010	0.009
14.C	0.000	0.000	-0.145	0.046	0.169	0.000	0.000	0.000	0.007
15.C	-0.006	0.252	-0.236	-0.098	-0.008	0.125	0.002	-0.010	0.009
16.C	0.011	0.225	0.209	0.050	-0.032	0.097	-0.002	-0.009	-0.011
17.H	-0.011	-0.139	0.270	0.485	0.090	-0.006	-0.006	0.005	-0.013
18.H	0.018	-0.095	-0.322	0.199	-0.158	-0.042	-0.007	0.002	0.013
19.H	0.000	0.000	0.289	0.457	0.169	0.000	0.000	0.000	-0.009
20.H	-0.018	0.095	-0.322	0.199	-0.158	0.042	0.007	-0.002	0.013
21.H	0.011	0.139	0.270	0.485	0.090	0.006	0.006	-0.005	-0.013

	665.913			723.554			743.802		
1.Re	-0.002	-0.001	0.000	-0.035	0.043	0.000	0.000	0.002	0.000
2.N	-0.121	0.154	0.000	0.028	-0.016	0.000	-0.143	-0.012	0.000
3.C	-0.007	-0.003	0.000	0.219	0.084	0.000	0.001	-0.002	0.000
4.C	0.020	-0.002	0.000	0.231	0.145	0.000	0.004	-0.005	0.000
5.O	0.009	-0.024	0.000	-0.036	-0.665	0.000	0.005	-0.015	0.000
6.O	0.002	-0.001	-0.003	0.021	-0.014	0.010	0.000	0.001	0.001
7.O	0.002	-0.001	0.003	0.021	-0.014	-0.010	0.000	0.001	-0.001
8.H	0.014	-0.011	-0.003	0.205	0.078	0.013	0.002	-0.004	0.001
9.H	0.014	-0.011	0.003	0.205	0.078	-0.013	0.002	-0.004	-0.001
10.H	0.025	0.003	0.000	0.291	0.272	0.018	0.007	0.001	0.001
11.H	0.025	0.003	0.000	0.291	0.272	-0.018	0.007	0.001	-0.001
12.C	0.085	0.024	0.095	-0.026	-0.005	-0.009	0.121	-0.002	-0.007
13.C	-0.118	0.005	0.102	0.017	-0.006	-0.014	-0.025	-0.001	-0.003
14.C	0.053	-0.171	0.000	-0.015	0.015	0.000	0.120	0.015	0.000
15.C	-0.118	0.005	-0.102	0.017	-0.006	0.014	-0.025	-0.001	0.003
16.C	0.085	0.024	-0.095	-0.026	-0.005	0.009	0.121	-0.002	0.007
17.H	0.477	-0.095	0.031	-0.012	0.013	0.003	-0.164	0.008	-0.008
18.H	0.181	0.150	0.029	0.030	-0.022	-0.005	-0.614	-0.013	-0.005
19.H	0.476	-0.174	0.000	-0.024	0.015	0.000	-0.355	0.016	0.000
20.H	0.181	0.150	-0.029	0.030	-0.022	0.005	-0.614	-0.013	0.005
21.H	0.477	-0.095	-0.031	-0.012	0.013	-0.003	-0.164	0.008	0.008

	829.301			839.021			847.809		
1.Re	0.011	-0.007	0.000	0.000	0.000	0.002	0.000	0.000	0.002
2.N	-0.013	-0.003	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000
3.C	-0.102	-0.129	0.000	0.000	0.000	0.014	0.000	0.000	0.031
4.C	0.622	0.116	0.000	0.000	0.000	-0.040	0.000	0.000	-0.076
5.O	-0.479	0.151	0.000	0.000	0.000	0.014	0.000	0.000	0.022
6.O	-0.014	-0.011	0.021	0.011	0.002	-0.016	0.023	0.002	-0.026
7.O	-0.014	-0.011	-0.021	-0.011	-0.002	-0.016	-0.023	-0.002	-0.026
8.H	-0.302	0.034	-0.027	0.177	-0.155	0.045	0.343	-0.284	0.080
9.H	-0.302	0.034	0.027	-0.177	0.155	0.045	-0.343	0.284	0.080
10.H	0.198	-0.125	0.093	-0.119	0.172	0.099	-0.225	0.323	0.184
11.H	0.198	-0.125	-0.093	0.119	-0.172	0.099	0.225	-0.323	0.184
12.C	0.011	-0.004	-0.019	-0.078	0.000	-0.006	0.032	0.002	0.003
13.C	-0.007	-0.008	-0.010	-0.051	0.001	-0.003	0.030	-0.001	0.002
14.C	0.001	0.004	0.000	0.000	0.000	0.009	0.000	0.000	-0.004
15.C	-0.007	-0.008	0.010	0.051	-0.001	-0.003	-0.030	0.001	0.002
16.C	0.011	-0.004	0.019	0.078	0.000	-0.006	-0.032	-0.002	0.003
17.H	-0.016	-0.009	-0.022	0.411	0.007	0.013	-0.198	0.003	-0.004
18.H	0.015	-0.020	-0.004	0.457	-0.012	0.012	-0.246	0.004	-0.005
19.H	0.025	0.003	0.000	0.000	0.000	0.030	0.000	0.000	-0.012
20.H	0.015	-0.020	0.004	-0.457	0.012	0.012	0.246	-0.004	-0.005
21.H	-0.016	-0.009	0.022	-0.411	-0.007	0.013	0.198	-0.003	-0.004

	932.026			960.846			963.833		
1.Re	0.001	0.000	0.000	0.000	0.000	0.081	0.000	0.000	0.001
2.N	-0.022	-0.021	0.000	0.000	0.000	0.005	0.000	0.000	-0.006
3.C	0.016	0.001	0.000	0.000	0.000	-0.076	0.000	0.000	0.002
4.C	-0.004	-0.008	0.000	0.000	0.000	0.058	0.000	0.000	-0.005
5.O	0.004	-0.006	0.000	0.000	0.000	-0.028	0.000	0.000	-0.001
6.O	-0.006	0.000	0.009	0.262	-0.008	-0.451	0.006	-0.001	-0.007
7.O	-0.006	0.000	-0.009	-0.262	0.008	-0.451	-0.006	0.001	-0.007
8.H	-0.044	0.023	0.008	-0.375	0.103	-0.006	0.009	-0.006	0.001
9.H	-0.044	0.023	-0.008	0.375	-0.103	-0.006	-0.009	0.006	0.001
10.H	-0.008	-0.006	0.002	0.111	-0.190	-0.082	-0.011	0.014	0.006
11.H	-0.008	-0.006	-0.002	-0.111	0.190	-0.082	0.011	-0.014	0.006
12.C	0.096	-0.008	0.003	-0.008	0.003	-0.001	0.096	-0.002	0.009
13.C	-0.037	0.007	0.023	0.012	-0.012	-0.006	-0.100	0.000	0.006
14.C	-0.079	0.032	0.000	0.000	0.000	0.005	0.000	0.000	-0.013
15.C	-0.037	0.007	-0.023	-0.012	0.012	-0.006	0.100	0.000	0.006
16.C	0.096	-0.008	-0.003	0.008	-0.003	-0.001	-0.096	0.002	0.009
17.H	-0.559	-0.010	-0.016	0.035	0.066	0.041	-0.492	-0.021	-0.020
18.H	0.195	-0.013	0.040	-0.059	-0.021	-0.004	0.485	0.025	0.001
19.H	0.507	0.034	0.000	0.000	0.000	0.050	0.000	0.000	-0.053
20.H	0.195	-0.013	-0.040	0.059	0.021	-0.004	-0.485	-0.025	0.001

21.H	-0.559	-0.010	0.016	-0.035	-0.066	0.041	0.492	0.021	-0.020

	977.887			979.944			998.395		
1.Re	0.003	0.000	0.000	0.051	-0.001	0.000	-0.003	0.001	0.000
2.N	0.010	-0.014	0.000	-0.007	-0.062	0.000	0.003	0.010	0.000
3.C	0.009	0.007	0.000	0.040	0.056	0.000	0.032	0.224	0.000
4.C	-0.002	-0.006	0.000	-0.022	-0.036	0.000	0.052	-0.224	0.000
5.O	0.001	-0.004	0.000	0.015	-0.043	0.000	-0.006	-0.017	0.000
6.O	-0.018	0.001	0.027	-0.304	0.016	0.455	0.013	-0.002	-0.022
7.O	-0.018	0.001	-0.027	-0.304	0.016	-0.455	0.013	-0.002	0.022
8.H	-0.032	0.023	0.005	-0.106	0.116	0.020	-0.362	0.434	0.022
9.H	-0.032	0.023	-0.005	-0.106	0.116	-0.020	-0.362	0.434	-0.022
10.H	-0.006	-0.011	0.000	-0.033	-0.058	-0.002	-0.032	-0.351	-0.003
11.H	-0.006	-0.011	0.000	-0.033	-0.058	0.002	-0.032	-0.351	0.003
12.C	0.015	-0.006	0.010	-0.029	-0.004	0.042	-0.003	0.009	-0.016
13.C	-0.083	0.006	0.012	0.049	0.031	0.036	0.004	-0.006	-0.010
14.C	0.129	0.017	0.000	-0.049	0.009	0.000	-0.001	-0.019	0.000
15.C	-0.083	0.006	-0.012	0.049	0.031	-0.036	0.004	-0.006	0.010
16.C	0.015	-0.006	-0.010	-0.029	-0.004	-0.042	-0.003	0.009	0.016
17.H	-0.141	-0.014	0.002	0.218	-0.006	0.052	0.037	0.015	-0.012
18.H	0.457	0.001	0.025	-0.257	0.071	0.014	-0.023	-0.009	-0.010
19.H	-0.709	0.021	0.000	0.257	0.009	0.000	0.007	-0.020	0.000
20.H	0.457	0.001	-0.025	-0.257	0.071	-0.014	-0.023	-0.009	0.010
21.H	-0.141	-0.014	-0.002	0.218	-0.006	-0.052	0.037	0.015	0.012

	1013.300			1033.559			1062.534		
1.Re	-0.004	0.001	0.000	0.001	-0.003	0.000	0.000	-0.001	0.000
2.N	0.001	-0.238	0.000	0.001	0.338	0.000	0.003	0.109	0.000
3.C	0.002	0.026	0.000	-0.049	0.051	0.000	-0.051	0.040	0.000
4.C	0.011	-0.012	0.000	0.022	-0.032	0.000	0.017	-0.025	0.000
5.O	-0.019	0.004	0.000	0.002	-0.003	0.000	0.005	-0.004	0.000
6.O	0.030	0.004	-0.049	-0.009	-0.003	0.017	-0.006	-0.001	0.012
7.O	0.030	0.004	0.049	-0.009	-0.003	-0.017	-0.006	-0.001	-0.012
8.H	-0.052	0.059	-0.001	0.186	-0.030	-0.029	0.213	-0.052	-0.032
9.H	-0.052	0.059	0.001	0.186	-0.030	0.029	0.213	-0.052	0.032
10.H	0.003	-0.036	-0.005	0.003	-0.063	-0.001	0.004	-0.039	0.003
11.H	0.003	-0.036	0.005	0.003	-0.063	0.001	0.004	-0.039	-0.003
12.C	-0.032	-0.136	0.218	0.004	-0.147	0.229	-0.005	-0.011	-0.109
13.C	0.024	0.113	0.230	0.003	-0.129	-0.211	0.000	-0.032	0.104
14.C	0.000	0.277	0.000	-0.003	0.265	0.000	0.003	0.076	0.000
15.C	0.024	0.113	-0.230	0.003	-0.129	0.211	0.000	-0.032	-0.104
16.C	-0.032	-0.136	-0.218	0.004	-0.147	-0.229	-0.005	-0.011	0.109
17.H	0.212	-0.267	0.169	-0.082	-0.323	0.124	0.043	-0.192	-0.236
18.H	-0.120	0.077	0.277	0.002	-0.136	-0.215	-0.010	-0.453	0.333
19.H	0.004	0.304	0.000	0.022	0.272	0.000	-0.005	0.087	0.000
20.H	-0.120	0.077	-0.277	0.002	-0.136	0.215	-0.010	-0.453	-0.333
21.H	0.212	-0.267	-0.169	-0.082	-0.323	-0.124	0.043	-0.192	0.236

	1071.530			1085.425			1115.275		
1.Re	0.000	-0.001	0.000	0.000	0.000	0.002	0.000	0.000	0.000
2.N	0.004	-0.066	0.000	0.000	0.000	-0.100	0.000	0.000	-0.001
3.C	-0.153	0.129	0.000	0.000	0.000	0.001	0.000	0.000	-0.053
4.C	0.057	-0.066	0.000	0.000	0.000	-0.004	0.000	0.000	0.130
5.O	-0.006	-0.005	0.000	0.000	0.000	0.001	0.000	0.000	-0.049
6.O	0.000	0.003	0.005	0.003	-0.001	-0.006	0.000	0.000	0.000
7.O	0.000	0.003	-0.005	-0.003	0.001	-0.006	0.000	0.000	0.000
8.H	0.618	-0.137	-0.096	-0.013	0.011	0.000	0.228	-0.321	0.061
9.H	0.618	-0.137	0.096	0.013	-0.011	0.000	-0.228	0.321	0.061
10.H	0.019	-0.122	0.000	-0.011	0.005	0.004	0.552	0.134	-0.088
11.H	0.019	-0.122	0.000	0.011	-0.005	0.004	-0.552	-0.134	-0.088
12.C	0.006	0.011	0.013	-0.012	-0.101	0.068	0.000	-0.002	0.001
13.C	-0.003	0.023	-0.010	0.005	0.053	0.072	0.000	0.002	0.001
14.C	-0.002	-0.040	0.000	0.000	0.000	-0.099	0.000	0.000	-0.002
15.C	-0.003	0.023	0.010	-0.005	-0.053	0.072	0.000	-0.002	0.001
16.C	0.006	0.011	-0.013	0.012	0.101	0.068	0.000	0.002	0.001
17.H	-0.062	0.083	0.059	0.070	-0.410	-0.122	-0.005	-0.010	-0.004
18.H	0.024	0.156	-0.081	-0.019	0.319	-0.058	0.002	0.006	0.000
19.H	0.004	-0.043	0.000	0.000	0.000	-0.589	0.000	0.000	-0.011
20.H	0.024	0.156	0.081	0.019	-0.319	-0.058	-0.002	-0.006	0.000
21.H	-0.062	0.083	-0.059	-0.070	0.410	-0.122	0.005	0.010	-0.004

	1168.070			1184.715			1213.845		
1.Re	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.001	0.000	0.001	0.000
2.N	0.000	0.000	-0.024	0.000	0.000	0.001	0.000	0.015	0.000
3.C	0.000	0.000	0.001	0.000	0.000	0.086	0.001	-0.001	0.000
4.C	0.000	0.000	-0.001	0.000	0.000	-0.061	-0.002	0.000	0.000
5.O	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	-0.021	0.003	-0.002	0.000
6.O	0.000	0.000	0.000	0.001	0.000	-0.002	0.000	-0.001	0.001
7.O	0.000	0.000	0.000	-0.001	0.000	-0.002	0.000	-0.001	-0.001
8.H	-0.001	0.003	-0.001	-0.189	0.320	-0.040	-0.007	0.000	0.003
9.H	0.001	-0.003	-0.001	0.189	-0.320	-0.040	-0.007	0.000	-0.003
10.H	0.002	0.005	0.000	0.267	0.530	0.038	-0.002	-0.001	0.000
11.H	-0.002	-0.005	0.000	-0.267	-0.530	0.038	-0.002	-0.001	0.000
12.C	0.002	-0.001	-0.003	0.000	0.001	-0.001	0.000	-0.056	-0.066

13.C	0.000	0.031	-0.016	0.000	-0.001	-0.001	0.001	0.042	-0.003
14.C	0.000	0.000	0.059	0.000	0.000	0.001	0.000	0.010	0.000
15.C	0.000	-0.031	-0.016	0.000	0.001	-0.001	0.001	0.042	0.003
16.C	-0.002	0.001	-0.003	0.000	-0.001	-0.001	0.000	-0.056	0.066
17.H	-0.010	-0.099	-0.067	0.006	0.006	0.003	0.003	-0.436	-0.319
18.H	0.002	0.455	-0.241	-0.001	-0.007	0.002	0.000	0.401	-0.192
19.H	0.000	0.000	0.659	0.000	0.000	-0.002	-0.002	0.011	0.000
20.H	-0.002	-0.455	-0.241	0.001	0.007	0.002	0.000	0.401	0.192
21.H	0.010	0.099	-0.067	-0.006	-0.006	0.003	0.003	-0.436	0.319

	1290.432			1302.909			1343.834		
1.Re	0.000	0.000	0.000	-0.001	0.002	0.000	0.000	0.000	-0.001
2.N	0.000	0.000	-0.448	-0.001	-0.001	0.000	0.000	0.000	-0.048
3.C	0.000	0.000	-0.003	-0.016	-0.019	0.000	0.000	0.000	0.000
4.C	0.000	0.000	0.002	0.042	0.124	0.000	0.000	0.000	0.001
5.O	0.000	0.000	0.000	0.053	-0.030	0.000	0.000	0.000	0.000
6.O	-0.004	-0.004	0.004	0.002	0.000	-0.001	-0.002	0.000	0.003
7.O	0.004	0.004	0.004	0.002	0.000	0.001	0.002	0.000	0.003
8.H	-0.006	-0.001	0.001	-0.035	-0.061	0.026	0.002	-0.002	0.000
9.H	0.006	0.001	0.001	-0.035	-0.061	-0.026	-0.002	0.002	0.000
10.H	0.010	0.002	-0.001	-0.484	-0.500	-0.008	0.001	-0.001	0.000
11.H	-0.010	-0.002	-0.001	-0.484	-0.500	0.008	-0.001	0.001	0.000
12.C	-0.008	0.271	0.231	0.000	0.000	-0.001	0.001	-0.053	-0.026
13.C	0.001	-0.187	0.096	0.000	0.000	0.000	-0.001	-0.031	0.018
14.C	0.000	0.000	-0.212	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.074
15.C	-0.001	0.187	0.096	0.000	0.000	0.000	0.001	0.031	0.018
16.C	0.008	-0.271	0.231	0.000	0.000	0.001	-0.001	0.053	-0.026
17.H	0.055	0.247	0.206	0.002	0.006	0.004	-0.004	0.471	0.319
18.H	-0.002	-0.018	0.011	-0.001	0.000	0.000	0.002	0.284	-0.149
19.H	0.000	0.000	0.444	0.001	0.000	0.000	0.000	0.000	-0.359
20.H	0.002	0.018	0.011	-0.001	0.000	0.000	-0.002	-0.284	-0.149
21.H	-0.055	-0.247	0.206	0.002	0.006	-0.004	0.004	-0.471	0.319

	1390.398			1446.236			1461.251		
1.Re	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000
2.N	0.001	0.002	0.000	0.000	0.000	-0.123	0.001	0.005	0.000
3.C	0.010	0.096	0.000	0.000	0.000	0.001	0.003	0.022	0.000
4.C	0.003	-0.005	0.000	0.000	0.000	0.000	0.057	-0.070	0.000
5.O	-0.006	0.002	0.000	0.000	0.000	0.000	0.015	0.000	0.000
6.O	-0.001	0.000	-0.001	0.000	-0.001	0.002	0.000	0.000	-0.001
7.O	-0.001	0.000	0.001	0.000	0.001	0.002	0.000	0.000	0.001
8.H	-0.176	-0.519	0.415	0.000	0.000	-0.001	-0.026	-0.092	0.075
9.H	-0.176	-0.519	-0.415	0.000	0.000	-0.001	-0.026	-0.092	-0.075
10.H	0.119	-0.053	-0.075	0.001	0.000	-0.001	-0.424	0.354	0.416
11.H	0.119	-0.053	0.075	-0.001	0.000	-0.001	-0.424	0.354	-0.416
12.C	0.000	-0.003	-0.002	0.002	-0.126	0.047	-0.001	-0.007	-0.005
13.C	0.000	-0.001	0.003	0.001	0.176	-0.021	0.000	-0.006	0.007
14.C	0.000	0.002	0.000	0.000	0.000	-0.054	0.000	0.007	0.000
15.C	0.000	-0.001	-0.003	-0.001	-0.176	-0.021	0.000	-0.006	-0.007
16.C	0.000	-0.003	0.002	-0.002	0.126	0.047	-0.001	-0.007	0.005
17.H	-0.001	0.013	0.008	-0.033	0.230	0.307	0.008	0.034	0.022
18.H	0.000	0.008	-0.002	-0.004	-0.305	0.251	0.000	0.031	-0.012
19.H	0.000	0.002	0.000	0.000	0.000	0.523	-0.001	0.008	0.000
20.H	0.000	0.008	0.002	0.004	0.305	0.251	0.000	0.031	0.012
21.H	-0.001	0.013	-0.008	0.033	-0.230	0.307	0.008	0.034	-0.022

	1467.677			1559.267			1596.352		
1.Re	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.001	0.000	-0.001	0.000
2.N	0.001	0.081	0.000	0.000	0.000	-0.172	0.000	-0.114	0.000
3.C	0.000	-0.008	0.000	0.000	0.000	-0.001	-0.001	0.003	0.000
4.C	-0.008	0.007	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000
5.O	0.000	0.001	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000
6.O	-0.001	-0.001	0.003	0.000	-0.002	-0.001	0.000	0.001	-0.002
7.O	-0.001	-0.001	-0.003	0.000	0.002	-0.001	0.000	0.001	0.002
8.H	0.003	0.034	-0.026	0.000	0.002	0.000	0.007	-0.009	0.004
9.H	0.003	0.034	0.026	0.000	-0.002	0.000	0.007	-0.009	-0.004
10.H	0.053	-0.037	-0.048	0.001	0.000	0.000	-0.002	-0.001	0.000
11.H	0.053	-0.037	0.048	-0.001	0.000	0.000	-0.002	-0.001	0.000
12.C	-0.001	-0.084	-0.088	0.001	0.074	0.146	-0.001	0.268	0.061
13.C	-0.001	-0.081	0.094	0.003	0.081	-0.219	-0.001	-0.284	0.076
14.C	0.001	0.088	0.000	0.000	0.000	0.420	-0.001	0.153	0.000
15.C	-0.001	-0.081	-0.094	-0.003	-0.081	-0.219	-0.001	-0.284	-0.076
16.C	-0.001	-0.084	0.088	-0.001	-0.074	0.146	-0.001	0.268	-0.061
17.H	0.016	0.453	0.258	-0.019	-0.259	-0.066	0.035	-0.261	-0.310
18.H	0.001	0.393	-0.146	-0.002	-0.200	-0.100	0.005	0.285	-0.237
19.H	-0.004	0.107	0.000	0.000	0.000	-0.622	0.004	0.181	0.000
20.H	0.001	0.393	0.146	0.002	0.200	-0.100	0.005	0.285	0.237
21.H	0.016	0.453	-0.258	0.019	0.259	-0.066	0.035	-0.261	0.310

	2996.477			3014.165			3067.072		
1.Re	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000
2.N	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000
3.C	-0.032	-0.059	0.000	-0.002	-0.007	0.000	0.000	0.000	-0.091
4.C	0.004	-0.002	0.000	-0.048	0.045	0.000	0.000	0.000	0.032

5.O	0.000	0.001	0.000	-0.001	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000
6.O	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000
7.O	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000
8.H	0.193	0.334	0.587	0.017	0.031	0.053	0.200	0.332	0.543
9.H	0.193	0.334	-0.587	0.017	0.031	-0.053	-0.200	-0.332	0.543
10.H	-0.029	0.023	-0.055	0.288	-0.248	0.591	-0.094	0.081	-0.185
11.H	-0.029	0.023	0.055	0.288	-0.248	-0.591	0.094	-0.081	-0.185
12.C	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000
13.C	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.001
14.C	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000
15.C	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.001
16.C	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000
17.H	0.000	-0.001	0.002	-0.001	0.001	-0.001	0.000	0.003	-0.003
18.H	0.000	0.000	0.000	0.000	-0.001	-0.001	0.000	-0.005	-0.008
19.H	0.000	0.000	0.000	0.000	0.001	0.000	0.000	0.000	0.001
20.H	0.000	0.000	0.000	0.000	-0.001	0.001	0.000	0.005	-0.008
21.H	0.000	-0.001	-0.002	-0.001	0.001	0.001	0.000	-0.003	-0.003

	3097.611			3132.748			3140.468		
1.Re	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000
2.N	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	-0.001
3.C	0.000	0.000	0.030	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.001
4.C	0.000	0.000	0.093	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000
5.O	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000
6.O	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000
7.O	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000
8.H	-0.067	-0.114	-0.181	0.000	0.000	0.000	-0.002	-0.004	-0.006
9.H	0.067	0.114	-0.181	0.000	0.000	0.000	0.002	0.004	-0.006
10.H	-0.281	0.249	-0.551	0.001	-0.001	0.001	0.000	0.000	0.000
11.H	0.281	-0.249	-0.551	0.001	-0.001	-0.001	0.000	0.000	0.000
12.C	0.000	0.000	0.000	0.000	-0.004	0.009	0.000	0.009	-0.015
13.C	0.000	0.000	0.000	0.001	-0.021	-0.037	-0.001	0.027	0.052
14.C	0.000	0.000	0.000	0.000	0.060	0.000	0.000	0.000	-0.004
15.C	0.000	0.000	0.000	0.001	-0.021	0.037	0.001	-0.027	0.052
16.C	0.000	0.000	0.000	0.000	-0.004	-0.009	0.000	-0.009	-0.015
17.H	0.001	-0.003	0.004	0.003	0.061	-0.095	-0.005	-0.117	0.180
18.H	0.000	0.002	0.004	-0.007	0.231	0.433	0.009	-0.314	-0.593
19.H	0.000	0.000	0.000	-0.001	-0.696	0.000	0.000	0.000	0.004
20.H	0.000	-0.002	0.004	-0.007	0.231	-0.433	-0.009	0.314	-0.593
21.H	-0.001	0.003	0.004	0.003	0.061	0.095	0.005	0.117	0.180

	3148.025			3161.247			3165.614		
1.Re	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000
2.N	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.002	0.000	-0.001	0.000
3.C	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	-0.001	0.000	0.000	0.000
4.C	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	-0.001	0.000	0.000	0.000
5.O	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000
6.O	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000
7.O	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000
8.H	0.000	0.000	-0.001	0.003	0.004	0.007	0.000	0.002	0.001
9.H	0.000	0.000	0.001	-0.003	-0.004	0.007	0.000	0.002	-0.001
10.H	0.001	0.000	0.000	0.001	-0.001	0.003	-0.001	0.001	-0.001
11.H	0.001	0.000	0.000	-0.001	0.001	0.003	-0.001	0.001	0.001
12.C	0.001	0.011	-0.020	0.001	0.035	-0.049	-0.001	-0.033	0.048
13.C	-0.001	0.015	0.036	0.000	-0.012	-0.016	0.000	0.013	0.021
14.C	0.000	0.063	0.000	0.000	0.000	0.002	0.000	0.015	0.000
15.C	-0.001	0.015	-0.036	0.000	0.012	-0.016	0.000	0.013	-0.021
16.C	0.001	0.011	0.020	-0.001	-0.035	-0.049	-0.001	-0.033	-0.048
17.H	-0.007	-0.143	0.219	-0.017	-0.370	0.560	0.015	0.356	-0.537
18.H	0.006	-0.200	-0.383	-0.003	0.102	0.187	0.004	-0.124	-0.229
19.H	-0.001	-0.694	0.000	0.000	0.000	-0.002	0.000	-0.158	0.000
20.H	0.006	-0.200	0.383	0.003	-0.102	0.187	0.004	-0.124	0.229
21.H	-0.007	-0.143	-0.219	0.017	0.370	0.560	0.015	0.356	0.537

List of All Frequencies:

Intensities
==========

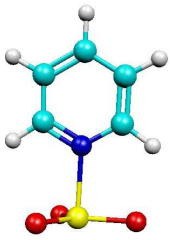
Frequency cm-1	Dipole Strength 1e-40 esu2 cm2	Absorption Intensity (degeneracy not counted) km/mole
57.618333	117.462732	1.696441
63.621533	27.794267	0.443238
86.170580	60.725584	1.311622
106.517961	3.952104	0.105519
182.328267	6.218482	0.284195
184.126062	229.442669	10.589307
228.379428	95.679691	5.477152
237.006958	142.998906	8.495166
242.739992	5.197237	0.316222
287.832699	8.423546	0.607733
294.216310	34.689074	2.558218
360.190667	0.051083	0.004612

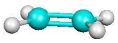
366.893101	4.211282	0.387286
438.049021	40.349001	4.430304
576.881016	222.610857	32.189235
639.586450	3.758178	0.602497
643.217434	185.788039	29.953917
643.610385	0.045027	0.007264
665.912623	159.895032	26.688876
723.554444	302.583157	54.877464
743.801667	259.796222	48.435975
829.301438	754.511081	156.839739
839.021329	27.131150	5.705836
847.809286	36.929291	7.847787
932.026066	1.282736	0.299670
960.846407	326.892454	78.729399
963.833498	0.044816	0.010827
977.887296	6.134659	1.503687
979.943776	185.052512	45.454220
998.394787	23.853989	5.969547
1013.300134	50.826159	12.909323
1033.559218	5.425806	1.405652
1062.534312	111.729748	29.757048
1071.530386	23.631511	6.347081
1085.424677	18.535046	5.042796
1115.274671	4.494640	1.256478
1168.070304	4.446643	1.301905
1184.715339	2.154275	0.639725
1213.845056	40.745537	12.397136
1290.431680	1.961769	0.634543
1302.908572	20.328487	6.638914
1343.834105	11.623666	3.915316
1390.397985	39.095814	13.625343
1446.236215	133.590364	48.427543
1461.250779	1.723772	0.631368
1467.677042	18.748524	6.897245
1559.267065	1.788796	0.699132
1596.352486	57.150021	22.867741
2996.476815	8.685379	6.523457
3014.165286	3.324809	2.511955
3067.072144	1.779077	1.367719
3097.611295	2.650787	2.058163
3132.748019	1.359902	1.067852
3140.468171	11.562919	9.102065
3148.024932	47.976429	37.856822
3161.246542	30.321757	24.026516
3165.614355	3.528002	2.799399

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

1184.0874	4027.2806	4089.4618
0.1133	0.9936	0.0000
-0.9936	0.1133	0.0000
0.0000	0.0000	1.0000

IIIa





CCSD=-629.69415

ATOMS cartesian

Re	0.010889	0.000415	0.000000
O	0.002816	1.736932	0.000000
N	2.147092	0.014032	0.000000
O	-0.076292	-0.871077	-1.490733
O	-0.076292	-0.871077	1.490733
C	2.830526	1.182786	0.000000
C	4.215403	1.196055	0.000000
C	4.909501	-0.010266	0.000000
C	4.192798	-1.205805	0.000000
C	2.809963	-1.167068	0.000000
H	2.235001	2.093820	0.000000
H	4.735838	2.153621	0.000000
H	6.000243	-0.020461	0.000000
H	4.696872	-2.171896	0.000000
H	2.208085	-2.073328	0.000000
C	-2.533205	0.620838	0.000000
C	-2.590202	-0.732816	0.000000
H	-2.575298	1.189619	0.932982
H	-2.575298	1.189619	-0.932982
H	-2.640616	-1.297004	-0.934487
H	-2.640616	-1.297004	0.934487

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)

	-47.048			-23.017			65.263		
1.Re	0.000	0.000	0.005	0.000	0.000	0.002	0.000	0.000	-0.051
2.O	0.000	0.000	0.055	0.000	0.000	-0.189	0.000	0.000	-0.046
3.N	0.000	0.000	-0.013	0.000	0.000	-0.036	0.000	0.000	-0.119
4.O	-0.004	0.025	-0.009	0.012	-0.184	0.106	-0.136	0.021	-0.053
5.O	0.004	-0.025	-0.009	-0.012	0.184	0.106	0.136	-0.021	-0.053
6.C	0.000	0.000	0.032	0.000	0.000	0.195	0.000	0.000	-0.039
7.C	0.000	0.000	0.036	0.000	0.000	0.230	0.000	0.000	0.146
8.C	0.000	0.000	-0.004	0.000	0.000	0.027	0.000	0.000	0.252
9.C	0.000	0.000	-0.049	0.000	0.000	-0.218	0.000	0.000	0.137
10.C	0.000	0.000	-0.055	0.000	0.000	-0.248	0.000	0.000	-0.047
11.H	0.000	0.000	0.065	0.000	0.000	0.337	0.000	0.000	-0.107
12.H	0.000	0.000	0.071	0.000	0.000	0.411	0.000	0.000	0.217
13.H	0.000	0.000	0.001	0.000	0.000	0.050	0.000	0.000	0.421
14.H	0.000	0.000	-0.082	0.000	0.000	-0.398	0.000	0.000	0.201
15.H	0.000	0.000	-0.092	0.000	0.000	-0.456	0.000	0.000	-0.123
16.C	0.000	0.000	-0.227	0.000	0.000	0.025	0.000	0.000	0.240
17.C	0.000	0.000	0.169	0.000	0.000	-0.030	0.000	0.000	0.307
18.H	-0.075	0.280	-0.402	0.027	-0.040	0.050	0.116	0.042	0.219
19.H	0.075	-0.280	-0.402	-0.027	0.040	0.050	-0.116	-0.042	0.219
20.H	0.081	-0.279	0.333	-0.026	0.039	-0.052	-0.118	-0.042	0.338
21.H	-0.081	0.279	0.333	0.026	-0.039	-0.052	0.118	0.042	0.338

	77.029			149.174			152.518		
1.Re	-0.001	-0.061	0.000	0.000	0.000	0.044	-0.087	-0.006	0.000
2.O	0.069	-0.057	0.000	0.000	0.000	0.101	0.022	0.002	0.000
3.N	0.004	-0.021	0.000	0.000	0.000	-0.263	-0.030	0.033	0.000
4.O	-0.035	-0.067	0.007	-0.100	-0.013	0.052	0.347	-0.036	-0.014
5.O	-0.035	-0.067	-0.007	0.100	0.013	0.052	0.347	-0.036	0.014
6.C	-0.063	0.020	0.000	0.000	0.000	-0.247	-0.012	0.008	0.000
7.C	-0.065	0.109	0.000	0.000	0.000	-0.028	-0.008	-0.025	0.000
8.C	0.009	0.152	0.000	0.000	0.000	0.202	-0.040	-0.043	0.000
9.C	0.081	0.108	0.000	0.000	0.000	0.048	-0.071	-0.024	0.000
10.C	0.078	0.020	0.000	0.000	0.000	-0.209	-0.069	0.020	0.000
11.H	-0.119	-0.017	0.000	0.000	0.000	-0.353	0.010	0.024	0.000
12.H	-0.127	0.142	0.000	0.000	0.000	0.004	0.020	-0.041	0.000
13.H	0.010	0.218	0.000	0.000	0.000	0.468	-0.041	-0.071	0.000

14.H	0.143	0.140	0.000	0.000	0.000	0.148	-0.098	-0.038	0.000
15.H	0.135	-0.018	0.000	0.000	0.000	-0.315	-0.097	0.040	0.000
16.C	0.031	0.333	0.000	0.000	0.000	-0.137	0.142	0.107	0.000
17.C	-0.062	0.338	0.000	0.000	0.000	-0.214	0.427	0.086	0.000
18.H	0.102	0.339	-0.001	-0.114	-0.049	-0.113	0.072	0.104	0.000
19.H	0.102	0.339	0.001	0.114	0.049	-0.113	0.072	0.104	0.000
20.H	-0.129	0.345	0.000	0.123	0.047	-0.248	0.465	0.086	-0.002
21.H	-0.129	0.345	0.000	-0.123	-0.047	-0.248	0.465	0.086	0.002

	167.312			213.133			222.060		
1.Re	0.055	-0.014	0.000	0.053	-0.010	0.000	0.000	0.000	-0.003
2.O	-0.362	-0.025	0.000	0.047	-0.002	0.000	0.000	0.000	-0.086
3.N	-0.011	0.057	0.000	-0.118	0.146	0.000	0.000	0.000	0.126
4.O	0.074	-0.001	-0.008	0.097	-0.070	0.033	-0.455	0.020	0.016
5.O	0.074	-0.001	0.008	0.097	-0.070	-0.033	0.455	-0.020	0.016
6.C	0.026	0.037	0.000	-0.087	0.123	0.000	0.000	0.000	0.172
7.C	0.028	-0.034	0.000	-0.092	0.015	0.000	0.000	0.000	0.074
8.C	-0.027	-0.068	0.000	-0.197	-0.047	0.000	0.000	0.000	-0.133
9.C	-0.074	-0.040	0.000	-0.259	-0.009	0.000	0.000	0.000	-0.003
10.C	-0.067	0.024	0.000	-0.239	0.093	0.000	0.000	0.000	0.177
11.H	0.062	0.061	0.000	-0.060	0.142	0.000	0.000	0.000	0.241
12.H	0.078	-0.061	0.000	-0.003	-0.034	0.000	0.000	0.000	0.102
13.H	-0.028	-0.114	0.000	-0.198	-0.124	0.000	0.000	0.000	-0.335
14.H	-0.117	-0.062	0.000	-0.317	-0.039	0.000	0.000	0.000	-0.045
15.H	-0.112	0.054	0.000	-0.323	0.149	0.000	0.000	0.000	0.306
16.C	-0.424	0.127	0.000	0.166	-0.013	0.000	0.000	0.000	-0.130
17.C	0.048	0.115	0.000	-0.219	0.008	0.000	0.000	0.000	-0.158
18.H	-0.480	0.122	-0.002	0.264	-0.002	-0.002	-0.139	-0.015	-0.127
19.H	-0.480	0.122	0.002	0.264	-0.002	0.002	0.139	0.015	-0.127
20.H	0.143	0.106	0.002	-0.316	0.016	-0.001	0.118	0.012	-0.170
21.H	0.143	0.106	-0.002	-0.316	0.016	0.001	-0.118	-0.012	-0.170

	223.958			244.163			274.527		
1.Re	-0.054	0.003	0.000	0.015	0.025	0.000	-0.010	-0.021	0.000
2.O	-0.012	0.004	0.000	0.227	0.022	0.000	0.406	-0.021	0.000
3.N	0.110	0.078	0.000	-0.058	-0.209	0.000	0.006	0.170	0.000
4.O	0.171	-0.064	0.032	0.179	0.048	-0.022	-0.075	-0.039	0.014
5.O	0.171	-0.064	-0.032	0.179	0.048	0.022	-0.075	-0.039	-0.014
6.C	0.185	0.040	0.000	-0.189	-0.149	0.000	0.089	0.134	0.000
7.C	0.202	-0.022	0.000	-0.207	0.010	0.000	0.098	0.019	0.000
8.C	0.170	-0.042	0.000	-0.091	0.084	0.000	0.006	-0.038	0.000
9.C	0.102	0.001	0.000	0.040	0.001	0.000	-0.086	0.022	0.000
10.C	0.095	0.069	0.000	0.031	-0.164	0.000	-0.076	0.139	0.000
11.H	0.239	0.077	0.000	-0.280	-0.213	0.000	0.144	0.172	0.000
12.H	0.234	-0.039	0.000	-0.317	0.069	0.000	0.181	-0.025	0.000
13.H	0.169	-0.088	0.000	-0.090	0.198	0.000	0.005	-0.125	0.000
14.H	0.042	-0.031	0.000	0.160	0.063	0.000	-0.172	-0.022	0.000
15.H	0.077	0.082	0.000	0.109	-0.215	0.000	-0.136	0.180	0.000
16.C	-0.078	-0.011	0.000	-0.271	-0.031	0.000	-0.304	-0.001	0.000
17.C	-0.388	-0.001	0.000	-0.159	-0.035	0.000	0.110	-0.020	0.000
18.H	-0.005	-0.003	0.000	-0.304	-0.035	0.002	-0.407	-0.013	0.004
19.H	-0.005	-0.003	0.000	-0.304	-0.035	-0.002	-0.407	-0.013	-0.004
20.H	-0.475	0.008	-0.003	-0.124	-0.039	0.000	0.225	-0.033	0.002
21.H	-0.475	0.008	0.003	-0.124	-0.039	0.000	0.225	-0.033	-0.002

	290.284			301.268			373.714		
1.Re	0.000	0.000	0.093	-0.009	-0.091	0.000	0.000	0.000	-0.001
2.O	0.000	0.000	-0.743	0.039	-0.137	0.000	0.000	0.000	0.022
3.N	0.000	0.000	-0.013	0.006	0.091	0.000	0.000	0.000	0.008
4.O	0.047	0.380	-0.083	0.055	0.498	-0.372	0.009	-0.010	0.004
5.O	-0.047	-0.380	-0.083	0.055	0.498	0.372	-0.009	0.010	0.004
6.C	0.000	0.000	-0.092	0.045	0.071	0.000	0.000	0.000	-0.203
7.C	0.000	0.000	0.001	0.051	0.008	0.000	0.000	0.000	0.186
8.C	0.000	0.000	0.076	0.001	-0.025	0.000	0.000	0.000	0.021
9.C	0.000	0.000	-0.069	-0.046	0.009	0.000	0.000	0.000	-0.210
10.C	0.000	0.000	-0.066	-0.041	0.079	0.000	0.000	0.000	0.174
11.H	0.000	0.000	-0.172	0.080	0.096	0.000	0.000	0.000	-0.519
12.H	0.000	0.000	0.021	0.099	-0.018	0.000	0.000	0.000	0.390
13.H	0.000	0.000	0.203	0.001	-0.071	0.000	0.000	0.000	0.064
14.H	0.000	0.000	-0.116	-0.095	-0.016	0.000	0.000	0.000	-0.409
15.H	0.000	0.000	-0.065	-0.066	0.096	0.000	0.000	0.000	0.506
16.C	0.000	0.000	-0.041	0.055	0.004	0.000	0.000	0.000	0.000
17.C	0.000	0.000	-0.005	-0.117	0.009	0.000	0.000	0.000	0.000
18.H	-0.056	0.022	-0.055	0.114	0.004	0.002	0.004	0.001	0.000
19.H	0.056	-0.022	-0.055	0.114	0.004	-0.002	-0.004	-0.001	0.000
20.H	0.038	-0.025	0.007	-0.183	0.021	-0.006	-0.006	0.000	0.001
21.H	-0.038	0.025	0.007	-0.183	0.021	0.006	0.006	0.000	0.001

	428.103			469.551			643.221		
1.Re	0.000	0.000	-0.009	0.000	0.000	0.004	0.000	0.001	0.000
2.O	0.000	0.000	0.017	0.000	0.000	0.005	0.006	0.008	0.000
3.N	0.000	0.000	0.332	0.000	0.000	-0.013	0.000	0.136	0.000
4.O	-0.038	-0.013	-0.002	-0.008	0.007	0.004	0.000	0.002	0.004
5.O	0.038	0.013	-0.002	0.008	-0.007	0.004	0.000	0.002	-0.004

6.C	0.000	0.000	-0.036	0.000	0.000	0.000	-0.228	0.218	0.000
7.C	0.000	0.000	-0.190	0.000	0.000	0.007	-0.259	-0.239	0.000
8.C	0.000	0.000	0.242	0.000	0.000	-0.009	-0.003	-0.151	0.000
9.C	0.000	0.000	-0.160	0.000	0.000	0.007	0.252	-0.241	0.000
10.C	0.000	0.000	-0.068	0.000	0.000	0.000	0.231	0.214	0.000
11.H	0.000	0.000	-0.116	0.000	0.000	0.001	-0.142	0.279	0.000
12.H	0.000	0.000	-0.432	0.000	0.000	0.015	-0.091	-0.335	0.000
13.H	0.000	0.000	0.582	0.000	0.000	-0.022	0.001	0.282	0.000
14.H	0.000	0.000	-0.389	0.000	0.000	0.017	0.080	-0.335	0.000
15.H	0.000	0.000	-0.225	0.000	0.000	0.004	0.144	0.276	0.000
16.C	0.000	0.000	-0.007	0.000	0.000	-0.054	0.000	0.000	0.000
17.C	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	-0.019	0.000	0.000	0.000
18.H	0.057	0.003	-0.006	0.477	0.007	-0.037	-0.002	0.000	0.000
19.H	-0.057	-0.003	-0.006	-0.477	-0.007	-0.037	-0.002	0.000	0.000
20.H	-0.076	-0.001	0.005	-0.518	0.006	0.004	0.001	-0.001	0.000
21.H	0.076	0.001	0.005	0.518	-0.006	0.004	0.001	-0.001	0.000

	656.257			674.887			746.380		
1.Re	0.011	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.001
2.O	0.005	0.004	0.000	0.000	0.000	0.001	0.000	0.000	0.000
3.N	-0.347	0.004	0.000	0.000	0.000	0.141	0.000	0.000	-0.121
4.O	0.006	-0.003	-0.005	-0.005	-0.001	-0.003	0.002	0.001	-0.001
5.O	0.006	-0.003	0.005	0.005	0.001	-0.003	-0.002	-0.001	-0.001
6.C	-0.068	-0.216	0.000	0.000	0.000	-0.109	0.000	0.000	0.096
7.C	-0.023	-0.262	0.000	0.000	0.000	0.141	0.000	0.000	-0.010
8.C	0.373	-0.004	0.000	0.000	0.000	-0.068	0.000	0.000	0.110
9.C	-0.023	0.262	0.000	0.000	0.000	0.138	0.000	0.000	-0.011
10.C	-0.064	0.218	0.000	0.000	0.000	-0.095	0.000	0.000	0.112
11.H	0.203	-0.043	0.000	0.000	0.000	-0.521	0.000	0.000	-0.179
12.H	-0.355	-0.083	0.000	0.000	0.000	-0.148	0.000	0.000	-0.588
13.H	0.375	-0.005	0.000	0.000	0.000	-0.542	0.000	0.000	-0.391
14.H	-0.360	0.088	0.000	0.000	0.000	-0.165	0.000	0.000	-0.611
15.H	0.205	0.044	0.000	0.000	0.000	-0.549	0.000	0.000	-0.215
16.C	0.003	-0.003	0.000	0.000	0.000	0.001	0.000	0.000	-0.001
17.C	0.003	0.003	0.000	0.000	0.000	0.001	0.000	0.000	0.000
18.H	0.013	-0.001	-0.001	-0.007	0.001	0.000	0.004	-0.001	0.000
19.H	0.013	-0.001	0.001	0.007	-0.001	0.000	-0.004	0.001	0.000
20.H	0.005	0.002	0.001	0.003	0.000	0.001	0.001	0.000	0.000
21.H	0.005	0.002	-0.001	-0.003	0.000	0.001	-0.001	0.000	0.000

	814.618			845.457			923.058		
1.Re	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.001	-0.001	-0.104	0.000
2.O	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	-0.001	-0.006	0.889	0.000
3.N	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	-0.002	-0.008	-0.002	0.000
4.O	0.000	0.000	0.001	0.000	-0.003	-0.006	0.013	0.169	0.213
5.O	0.000	0.000	0.001	0.000	0.003	-0.006	0.013	0.169	-0.213
6.C	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	-0.078	-0.007	0.012	0.000
7.C	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	-0.066	0.023	0.012	0.000
8.C	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	-0.010	0.016	-0.005	0.000
9.C	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.057	-0.010	0.002	0.000
10.C	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.095	-0.003	-0.010	0.000
11.H	0.000	0.000	0.001	0.000	0.000	0.447	-0.114	-0.048	0.000
12.H	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.541	0.034	0.008	0.000
13.H	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.056	0.016	-0.050	0.000
14.H	0.000	0.000	0.001	0.000	0.000	-0.456	-0.020	-0.004	0.000
15.H	0.000	0.000	-0.001	0.000	0.000	-0.523	0.035	-0.036	0.000
16.C	0.000	0.000	-0.041	0.000	0.000	0.000	-0.022	0.001	0.000
17.C	0.000	0.000	-0.038	0.000	0.000	0.000	0.024	-0.012	0.000
18.H	-0.004	-0.443	0.234	0.001	0.000	0.000	0.008	0.019	-0.011
19.H	0.004	0.443	0.234	-0.001	0.000	0.000	0.008	0.019	0.011
20.H	0.005	-0.440	0.231	-0.001	0.000	0.000	-0.110	-0.005	0.002
21.H	-0.005	0.440	0.231	0.001	0.000	0.000	-0.110	-0.005	-0.002

	926.531			934.905			952.772		
1.Re	0.000	0.000	0.013	0.000	0.000	-0.057	0.000	0.000	0.002
2.O	0.000	0.000	-0.005	0.000	0.000	0.025	0.000	0.000	0.000
3.N	0.000	0.000	-0.019	0.000	0.000	-0.015	0.000	0.000	-0.005
4.O	-0.004	-0.037	-0.070	0.019	0.174	0.325	-0.001	-0.006	-0.012
5.O	0.004	0.037	-0.070	-0.019	-0.174	0.325	0.001	0.006	-0.012
6.C	0.000	0.000	0.079	0.000	0.000	0.077	0.000	0.000	0.114
7.C	0.000	0.000	-0.009	0.000	0.000	-0.028	0.000	0.000	-0.101
8.C	0.000	0.000	-0.061	0.000	0.000	-0.053	0.000	0.000	-0.016
9.C	0.000	0.000	-0.070	0.000	0.000	-0.038	0.000	0.000	0.089
10.C	0.000	0.000	0.108	0.000	0.000	0.084	0.000	0.000	-0.071
11.H	0.000	0.000	-0.518	0.000	0.000	-0.496	0.000	0.000	-0.614
12.H	0.000	0.000	0.062	0.000	0.000	0.161	0.000	0.000	0.515
13.H	0.000	0.000	0.368	0.000	0.000	0.309	0.000	0.000	0.091
14.H	0.000	0.000	0.405	0.000	0.000	0.220	0.000	0.000	-0.450
15.H	0.000	0.000	-0.624	0.000	0.000	-0.536	0.000	0.000	0.331
16.C	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	-0.002	0.000	0.000	0.000
17.C	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.002	0.000	0.000	0.000
18.H	0.008	0.002	-0.001	-0.015	-0.009	0.003	0.001	0.000	0.000
19.H	-0.008	-0.002	-0.001	0.015	0.009	0.003	-0.001	0.000	0.000
20.H	0.001	-0.003	0.002	0.018	0.017	-0.011	-0.001	-0.002	0.001
21.H	-0.001	0.003	0.002	-0.018	-0.017	-0.011	0.001	0.002	0.001

	958.875			976.538			992.723		
1.Re	0.007	0.019	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	-0.003	0.000
2.O	-0.005	0.391	0.000	0.000	0.000	0.000	-0.004	0.000	0.000
3.N	-0.059	0.003	0.000	0.000	0.000	0.012	0.010	-0.001	0.000
4.O	-0.031	-0.307	-0.517	0.000	0.000	0.000	0.002	0.007	0.010
5.O	-0.031	-0.307	0.517	0.000	0.000	0.000	0.002	0.007	-0.010
6.C	0.002	0.032	0.000	0.000	0.000	0.008	0.001	-0.006	0.000
7.C	0.023	0.034	0.000	0.000	0.000	-0.082	-0.003	-0.006	0.000
8.C	0.010	0.004	0.000	0.000	0.000	0.136	-0.005	-0.001	0.000
9.C	0.032	-0.042	0.000	0.000	0.000	-0.077	-0.006	0.008	0.000
10.C	0.000	-0.037	0.000	0.000	0.000	0.005	0.003	0.009	0.000
11.H	0.023	0.050	0.000	0.000	0.000	-0.093	-0.006	-0.011	0.000
12.H	0.046	0.026	0.000	0.000	0.000	0.449	-0.003	-0.006	0.000
13.H	0.013	0.022	0.000	0.000	0.000	-0.758	-0.006	-0.007	0.000
14.H	0.065	-0.030	0.000	0.000	0.000	0.423	-0.012	0.005	0.000
15.H	-0.003	-0.039	0.000	0.000	0.000	-0.076	0.005	0.008	0.000
16.C	0.028	0.009	0.000	0.000	0.000	0.000	0.135	0.015	0.000
17.C	-0.009	-0.003	0.000	0.000	0.000	0.000	-0.101	0.018	0.000
18.H	-0.213	-0.013	0.005	-0.001	0.000	0.000	-0.592	-0.037	0.001
19.H	-0.213	-0.013	-0.005	0.001	0.000	0.000	-0.592	-0.037	-0.001
20.H	-0.056	0.004	-0.003	0.000	0.000	0.000	0.363	-0.036	0.007
21.H	-0.056	0.004	0.003	0.000	0.000	0.000	0.363	-0.036	-0.007

	1010.376			1014.762			1040.155		
1.Re	0.000	0.000	0.000	-0.002	0.000	0.000	-0.003	0.001	0.000
2.O	0.000	0.000	0.001	-0.005	0.032	0.000	-0.001	0.011	0.000
3.N	0.000	0.000	-0.003	0.251	-0.005	0.000	0.321	-0.004	0.000
4.O	0.001	-0.001	0.000	-0.007	-0.015	-0.024	-0.004	-0.009	-0.016
5.O	-0.001	0.001	0.000	-0.007	-0.015	0.024	-0.004	-0.009	0.016
6.C	0.000	0.000	0.001	0.142	-0.226	0.000	-0.134	0.239	0.000
7.C	0.000	0.000	0.000	-0.113	-0.238	0.000	-0.123	-0.225	0.000
8.C	0.000	0.000	0.000	-0.311	-0.001	0.000	0.234	-0.003	0.000
9.C	0.000	0.000	0.000	-0.105	0.246	0.000	-0.119	0.228	0.000
10.C	0.000	0.000	0.001	0.141	0.225	0.000	-0.139	-0.234	0.000
11.H	0.000	0.000	-0.003	0.276	-0.170	0.000	-0.283	0.157	0.000
12.H	0.000	0.000	-0.001	-0.046	-0.308	0.000	-0.034	-0.282	0.000
13.H	0.000	0.000	0.002	-0.342	-0.007	0.000	0.239	-0.004	0.000
14.H	0.000	0.000	0.002	-0.032	0.317	0.000	-0.030	0.284	0.000
15.H	0.000	0.000	-0.004	0.259	0.177	0.000	-0.273	-0.159	0.000
16.C	0.000	0.000	0.012	-0.011	0.003	0.000	-0.022	0.006	0.000
17.C	0.000	0.000	-0.010	0.024	-0.008	0.000	-0.036	-0.004	0.000
18.H	-0.518	0.018	-0.020	0.004	0.003	0.001	0.153	0.025	-0.004
19.H	0.518	-0.018	-0.020	0.004	0.003	-0.001	0.153	0.025	0.004
20.H	-0.480	-0.018	0.025	-0.130	0.009	-0.003	0.205	-0.033	0.005
21.H	0.480	0.018	0.025	-0.130	0.009	0.003	0.205	-0.033	-0.005

	1042.238			1063.015			1085.932		
1.Re	0.000	-0.001	0.000	0.001	0.000	0.000	0.000	-0.002	0.000
2.O	0.000	0.014	0.000	0.002	-0.007	0.000	0.001	0.005	0.000
3.N	-0.022	0.001	0.000	-0.142	-0.008	0.000	-0.010	0.097	0.000
4.O	0.001	-0.003	-0.007	0.003	0.004	0.007	-0.001	0.003	0.005
5.O	0.001	-0.003	0.007	0.003	0.004	-0.007	-0.001	0.003	-0.005
6.C	0.016	-0.019	0.000	0.009	0.105	0.000	0.098	-0.059	0.000
7.C	0.008	0.006	0.000	0.050	-0.081	0.000	-0.049	-0.081	0.000
8.C	-0.030	0.000	0.000	-0.093	-0.010	0.000	-0.005	0.100	0.000
9.C	0.008	-0.007	0.000	0.041	0.095	0.000	0.054	-0.065	0.000
10.C	0.016	0.018	0.000	0.025	-0.091	0.000	-0.098	-0.073	0.000
11.H	0.041	-0.004	0.000	0.185	0.229	0.000	0.433	0.151	0.000
12.H	0.017	0.001	0.000	0.516	-0.339	0.000	-0.267	0.026	0.000
13.H	-0.032	0.002	0.000	-0.103	-0.055	0.000	-0.002	0.596	0.000
14.H	0.020	-0.001	0.000	0.462	0.322	0.000	0.363	0.085	0.000
15.H	0.040	0.004	0.000	0.255	-0.253	0.000	-0.384	0.106	0.000
16.C	-0.053	0.009	0.000	0.007	-0.003	0.000	0.003	0.000	0.000
17.C	-0.105	-0.003	0.000	0.005	0.004	0.000	0.000	0.001	0.000
18.H	0.386	0.060	-0.012	-0.032	-0.008	0.001	-0.013	-0.001	0.000
19.H	0.386	0.060	0.012	-0.032	-0.008	-0.001	-0.013	-0.001	0.000
20.H	0.573	-0.086	0.014	-0.026	0.008	-0.001	0.001	0.001	0.000
21.H	0.573	-0.086	-0.014	-0.026	0.008	0.001	0.001	0.001	0.000

	1168.599			1199.056			1213.856		
1.Re	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.001	0.000	0.000
2.O	0.000	-0.001	0.000	0.000	0.000	0.000	-0.001	-0.001	0.000
3.N	0.000	-0.024	0.000	0.000	0.000	0.000	0.011	0.006	0.000
4.O	0.000	0.000	0.000	0.000	0.001	0.002	-0.001	-0.001	-0.002
5.O	0.000	0.000	0.000	0.000	-0.001	0.002	-0.001	-0.001	0.002
6.C	-0.002	-0.004	0.000	0.000	0.000	0.000	-0.057	-0.066	0.000
7.C	0.031	-0.016	0.000	0.000	0.000	0.000	0.044	-0.002	0.000
8.C	-0.001	0.060	0.000	0.000	0.000	0.000	0.012	0.000	0.000
9.C	-0.031	-0.014	0.000	0.000	0.000	0.000	0.043	-0.002	0.000
10.C	0.002	-0.002	0.000	0.000	0.000	0.000	-0.054	0.064	0.000
11.H	-0.107	-0.073	0.000	0.000	0.000	0.000	-0.456	-0.330	0.000
12.H	0.459	-0.251	0.000	0.000	0.000	0.000	0.385	-0.185	0.000
13.H	0.005	0.652	0.000	0.000	0.000	0.000	0.013	-0.006	0.000
14.H	-0.456	-0.237	0.000	0.000	0.000	0.000	0.412	0.188	0.000

15.H	0.097	-0.065	0.000	0.000	0.000	-0.001	-0.422	0.313	0.000
16.C	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.150	-0.002	0.002	0.000
17.C	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	-0.151	-0.001	-0.002	0.000
18.H	0.001	0.000	0.000	0.069	0.462	-0.132	0.005	0.004	0.000
19.H	0.001	0.000	0.000	-0.069	-0.462	-0.132	0.005	0.004	0.000
20.H	0.000	0.000	0.000	0.015	-0.472	0.135	0.002	-0.005	0.001
21.H	0.000	0.000	0.000	-0.015	0.472	0.135	0.002	-0.005	-0.001

	1296.422			1336.332			1344.016		
1.Re	0.000	0.000	0.000	-0.001	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000
2.O	0.003	-0.007	0.000	0.001	0.005	0.000	0.000	-0.004	0.000
3.N	0.006	0.436	0.000	0.003	0.002	0.000	-0.003	0.042	0.000
4.O	-0.002	-0.001	-0.002	0.001	-0.001	-0.001	0.000	-0.001	-0.001
5.O	-0.002	-0.001	0.002	0.001	-0.001	0.001	0.000	-0.001	0.001
6.C	-0.250	-0.211	0.000	0.004	0.000	0.000	0.064	0.034	0.000
7.C	0.183	-0.105	0.000	0.001	-0.002	0.000	0.027	-0.020	0.000
8.C	-0.003	0.205	0.000	-0.001	-0.002	0.000	-0.004	-0.080	0.000
9.C	-0.191	-0.094	0.000	0.000	0.001	0.000	-0.026	-0.013	0.000
10.C	0.260	-0.224	0.000	0.000	0.002	0.000	-0.052	0.026	0.000
11.H	-0.274	-0.211	0.000	-0.028	-0.021	0.000	-0.473	-0.317	0.000
12.H	-0.052	0.018	0.000	-0.013	0.005	0.000	-0.304	0.161	0.000
13.H	-0.010	-0.407	0.000	-0.001	0.012	0.000	0.000	0.374	0.000
14.H	0.003	0.005	0.000	0.007	0.004	0.000	0.263	0.140	0.000
15.H	0.318	-0.252	0.000	0.006	-0.002	0.000	0.457	-0.317	0.000
16.C	0.000	0.001	0.000	-0.014	-0.125	0.000	0.000	0.004	0.000
17.C	0.000	-0.001	0.000	-0.007	0.131	0.000	0.000	-0.004	0.000
18.H	-0.002	0.003	-0.001	0.050	-0.469	0.189	-0.002	0.014	-0.005
19.H	-0.002	0.003	0.001	0.050	-0.469	-0.189	-0.002	0.014	0.005
20.H	-0.002	0.001	-0.001	0.089	0.435	-0.164	-0.003	-0.014	0.006
21.H	-0.002	0.001	0.001	0.089	0.435	0.164	-0.003	-0.014	-0.006

	1427.328			1448.735			1469.283		
1.Re	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000
2.O	-0.001	0.000	0.000	0.000	0.002	0.000	0.000	0.003	0.000
3.N	0.000	-0.001	0.000	0.010	-0.124	0.000	0.080	0.014	0.000
4.O	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	-0.001	-0.001	0.000
5.O	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	-0.001	-0.001	0.000
6.C	-0.001	0.000	0.000	-0.140	0.038	0.000	-0.069	-0.094	0.000
7.C	0.002	0.000	0.000	0.170	-0.011	0.000	-0.099	0.100	0.000
8.C	0.000	0.000	0.000	0.009	-0.057	0.000	0.090	-0.002	0.000
9.C	-0.002	0.000	0.000	-0.184	-0.031	0.000	-0.071	-0.094	0.000
10.C	0.001	0.000	0.000	0.115	0.060	0.000	-0.094	0.088	0.000
11.H	0.004	0.004	0.000	0.272	0.331	0.000	0.404	0.202	0.000
12.H	-0.002	0.002	0.000	-0.250	0.237	0.000	0.413	-0.170	0.000
13.H	0.000	0.004	0.000	0.016	0.527	0.000	0.110	-0.032	0.000
14.H	0.003	0.002	0.000	0.350	0.266	0.000	0.379	0.129	0.000
15.H	-0.001	0.002	0.000	-0.167	0.278	0.000	0.500	-0.305	0.000
16.C	-0.005	0.075	0.000	0.000	-0.002	0.000	-0.001	0.003	0.000
17.C	0.007	0.062	0.000	0.000	-0.001	0.000	-0.001	-0.003	0.000
18.H	0.034	-0.396	0.282	0.001	0.006	-0.005	0.002	-0.011	0.008
19.H	0.034	-0.396	-0.282	0.001	0.006	0.005	0.002	-0.011	-0.008
20.H	-0.046	-0.419	0.284	0.001	0.010	-0.006	0.002	0.011	-0.009
21.H	-0.046	-0.419	-0.284	0.001	0.010	0.006	0.002	0.011	0.009

	1560.355			1583.966			1598.795		
1.Re	0.000	0.001	0.000	-0.001	0.000	0.000	0.001	0.000	0.000
2.O	-0.001	-0.002	0.000	0.002	0.002	0.000	0.000	0.002	0.000
3.N	-0.007	-0.177	0.000	0.002	0.002	0.000	0.115	-0.007	0.000
4.O	0.001	0.000	0.000	0.001	0.000	-0.002	-0.002	-0.001	-0.001
5.O	0.001	0.000	0.000	0.001	0.000	0.002	-0.002	-0.001	0.001
6.C	0.094	0.152	0.000	0.009	-0.002	0.000	-0.263	-0.052	0.000
7.C	0.059	-0.214	0.000	-0.013	0.006	0.000	0.282	-0.085	0.000
8.C	0.012	0.414	0.000	0.007	-0.003	0.000	-0.145	0.024	0.000
9.C	-0.099	-0.221	0.000	-0.012	-0.003	0.000	0.280	0.056	0.000
10.C	-0.060	0.149	0.000	0.010	-0.001	0.000	-0.277	0.073	0.000
11.H	-0.270	-0.080	0.000	-0.003	-0.012	0.000	0.237	0.299	0.000
12.H	-0.185	-0.111	0.000	0.021	-0.012	0.000	-0.277	0.231	0.000
13.H	0.003	-0.614	0.000	0.009	0.004	0.000	-0.171	-0.033	0.000
14.H	0.225	-0.080	0.000	0.018	0.013	0.000	-0.261	-0.244	0.000
15.H	0.260	-0.056	0.000	-0.005	0.011	0.000	0.297	-0.339	0.000
16.C	0.000	-0.003	0.000	-0.004	-0.256	0.000	0.000	-0.020	0.000
17.C	0.000	0.002	0.000	0.015	0.259	0.000	0.001	0.020	0.000
18.H	0.001	0.004	-0.004	-0.024	0.281	-0.357	-0.002	0.020	-0.027
19.H	0.001	0.004	0.004	-0.024	0.281	0.357	-0.002	0.020	0.027
20.H	-0.001	-0.002	0.003	-0.029	-0.299	0.368	-0.003	-0.021	0.028
21.H	-0.001	-0.002	-0.003	-0.029	-0.299	-0.368	-0.003	-0.021	-0.028

	3053.992			3063.904			3133.540		
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.N	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000
4.O	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000
5.O	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000
6.C	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.007	-0.013	0.000

7.C	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.022	0.037	0.000
8.C	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	-0.065	0.000	0.000
9.C	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.017	-0.028	0.000
10.C	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.004	0.008	0.000
11.H	-0.001	0.001	0.000	0.000	0.000	0.000	-0.095	0.148	0.000
12.H	0.000	0.001	0.000	-0.001	-0.001	0.000	-0.239	-0.435	0.000
13.H	0.001	0.000	0.000	-0.002	0.000	0.000	0.746	-0.007	0.000
14.H	0.000	-0.001	0.000	-0.001	0.001	0.000	-0.181	0.342	0.000
15.H	-0.001	-0.001	0.000	0.001	0.001	0.000	-0.054	-0.082	0.000
16.C	-0.004	0.062	0.000	0.001	-0.026	0.000	0.000	0.000	0.000
17.C	0.001	0.013	0.000	0.006	0.067	0.000	0.000	0.000	0.000
18.H	0.024	-0.344	-0.580	-0.007	0.103	0.173	0.000	0.000	0.000
19.H	0.024	-0.344	0.580	-0.007	0.103	-0.173	0.000	0.000	0.000
20.H	-0.009	-0.105	-0.179	-0.028	-0.342	-0.582	0.000	0.000	0.000
21.H	-0.009	-0.105	0.179	-0.028	-0.342	0.582	0.000	0.000	0.000

	3141.531			3146.934			3152.488		
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.N	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000
4.O	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000
5.O	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000
6.C	-0.023	0.036	0.000	0.021	-0.034	0.000	0.000	0.000	0.000
7.C	-0.023	-0.047	0.000	0.003	0.014	0.000	0.000	0.000	0.000
8.C	-0.017	0.004	0.000	0.049	0.001	0.000	0.000	0.000	0.000
9.C	0.022	-0.042	0.000	0.021	-0.046	0.000	0.000	0.000	0.000
10.C	0.012	0.019	0.000	0.017	0.029	0.000	0.000	0.000	0.000
11.H	0.268	-0.412	0.000	-0.245	0.374	0.000	0.000	0.000	0.000
12.H	0.281	0.519	0.000	-0.067	-0.130	0.000	0.000	0.000	0.000
13.H	0.192	-0.005	0.000	-0.546	0.004	0.000	0.000	0.000	0.000
14.H	-0.252	0.481	0.000	-0.260	0.503	0.000	0.000	0.000	0.000
15.H	-0.148	-0.223	0.000	-0.216	-0.324	0.000	0.000	0.000	0.000
16.C	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	-0.085
17.C	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.053
18.H	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	-0.022	0.313	0.508
19.H	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.022	-0.313	0.508
20.H	0.000	0.000	-0.001	0.000	0.001	0.001	-0.016	-0.192	-0.318
21.H	0.000	0.000	0.001	0.000	0.001	-0.001	0.016	0.192	-0.318

	3154.313			3162.232			3178.456		
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.N	-0.001	-0.002	0.000	0.001	-0.001	0.000	0.000	0.000	0.000
4.O	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000
5.O	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000
6.C	-0.035	0.048	0.000	0.015	-0.022	0.000	0.000	0.000	0.000
7.C	0.027	0.044	0.000	-0.011	-0.020	0.000	0.000	0.000	0.000
8.C	0.020	-0.003	0.000	-0.022	-0.001	0.000	0.000	0.000	0.000
9.C	-0.007	0.008	0.000	-0.022	0.037	0.000	0.000	0.000	0.000
10.C	0.022	0.030	0.000	0.040	0.056	0.000	0.000	0.000	0.000
11.H	0.364	-0.553	0.000	-0.158	0.239	0.000	0.000	0.000	0.000
12.H	-0.271	-0.493	0.000	0.117	0.213	0.000	0.000	0.000	0.000
13.H	-0.212	0.004	0.000	0.232	-0.001	0.000	0.000	0.000	0.000
14.H	0.056	-0.103	0.000	0.216	-0.408	0.000	0.000	0.000	0.000
15.H	-0.236	-0.350	0.000	-0.428	-0.632	0.000	0.000	0.000	0.000
16.C	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.053
17.C	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.085
18.H	0.000	0.000	0.000	0.000	0.001	0.002	0.013	-0.197	-0.315
19.H	0.000	0.000	0.000	0.000	0.001	-0.002	-0.013	0.197	-0.315
20.H	0.000	0.000	0.000	0.000	-0.001	-0.001	-0.026	-0.311	-0.509
21.H	0.000	0.000	0.000	0.000	-0.001	0.001	0.026	0.311	-0.509

List of All Frequencies:

Intensities
==========

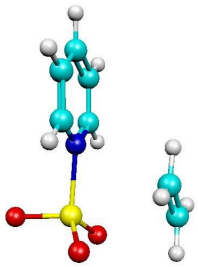
Frequency cm-1	Dipole Strength 1e-40 esu2 cm2	Absorption Intensity (degeneracy not counted) km/mole
-47.047973	0.048519	-0.000572
-23.017362	0.066553	-0.000384
65.262670	318.842450	5.215777
77.028867	350.323380	6.763955
149.174035	9.894193	0.369957
152.517841	2016.940703	77.106653
167.311723	996.108483	41.774483
213.133472	40.274602	2.151597
222.059985	3.775226	0.210132
223.958399	536.318616	30.107056
244.162887	92.902440	5.685712
274.527400	48.629913	3.346318
290.284057	0.065188	0.004743
301.268135	8.686223	0.655937

373.714266	0.256712	0.024047
428.103230	40.523437	4.348434
469.550722	26.948586	3.171733
643.221348	4.883771	0.787397
656.257300	93.559555	15.390062
674.887357	301.769608	51.048720
746.379724	278.302461	52.066088
814.617982	9.688192	1.978221
845.457043	3.982342	0.843933
923.058198	327.872739	75.859934
926.530831	52.916832	12.289431
934.904672	347.589861	81.454016
952.771850	0.256436	0.061242
958.875322	14.096915	3.388163
976.537661	0.268562	0.065737
992.722879	75.986012	18.907746
1010.376067	0.791966	0.200571
1014.762424	173.097541	44.028445
1040.154818	0.644091	0.167928
1042.237973	466.938839	121.984587
1063.014943	165.941039	44.215164
1085.931853	23.521974	6.402571
1168.598879	4.670800	1.368154
1199.056363	0.108363	0.032569
1213.856431	65.414054	19.902904
1296.422401	2.841621	0.923402
1336.331709	58.020332	19.434463
1344.015715	14.789781	4.982464
1427.328338	60.967048	21.812082
1448.734743	148.367871	53.877422
1469.282609	3.847419	1.416945
1560.354922	1.731105	0.677056
1583.966365	80.049010	31.781910
1598.794744	85.004661	34.065402
3053.991645	10.684577	8.179057
3063.904323	5.393270	4.141956
3133.540453	0.908839	0.713839
3141.531484	6.779004	5.338084
3146.933713	53.363594	42.093083
3152.488176	1.230541	0.972361
3154.313383	33.322684	26.346497
3162.232401	5.183377	4.108513
3178.456131	23.087709	18.393955

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

893.8401	4273.1489	4634.1484
-1.0000	0.0086	0.0000
-0.0086	-1.0000	0.0000
0.0000	0.0000	1.0000

IIIb



CCSD=-629.68260036

ATOMS cartesian

C	0.835312	0.433583	-0.797812
C	0.542858	1.050800	0.358042
H	-0.121698	0.593053	1.095297
H	0.883967	2.070054	0.556223
H	0.438071	-0.554515	-1.039462
H	1.439833	0.920818	-1.566010
O	3.314042	-1.139679	-0.504443
Re	3.496519	-0.077215	0.828536
O	4.963228	-0.489694	1.610920
O	3.650521	1.552154	0.321231
N	2.228471	-0.500573	2.468222
C	2.104534	0.402874	3.473486
C	1.356710	0.112034	4.600403
C	0.732728	-1.130202	4.703729
C	0.873933	-2.052066	3.668142
C	1.627654	-1.714892	2.557678
H	2.615781	1.357232	3.352455
H	1.274911	0.858179	5.390994
H	0.143285	-1.379300	5.587527
H	0.407586	-3.036416	3.714271
H	1.767547	-2.401360	1.723915

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)

	-118.528			-9.177			50.085		
1.C	-0.005	0.053	0.139	-0.093	-0.184	0.157	-0.296	0.016	0.024
2.C	0.023	0.008	0.170	0.053	0.161	0.010	-0.377	-0.042	0.027
3.H	0.058	-0.037	0.174	0.084	0.416	0.197	-0.358	-0.113	0.001
4.H	0.021	0.001	0.203	0.157	0.185	-0.296	-0.433	-0.035	0.087
5.H	0.005	0.051	0.126	-0.198	-0.217	0.462	-0.223	-0.002	-0.021
6.H	-0.032	0.079	0.136	-0.130	-0.443	-0.036	-0.303	0.080	0.060
7.O	-0.029	0.080	-0.070	0.025	-0.003	0.000	-0.013	0.048	-0.017
8.Re	0.008	-0.007	-0.007	0.007	0.005	-0.004	0.062	-0.024	0.026
9.O	0.001	-0.107	-0.046	0.003	0.017	0.009	0.144	0.021	-0.110
10.O	0.050	0.023	0.098	0.009	0.000	-0.019	-0.138	0.024	0.125
11.N	-0.015	-0.049	-0.038	0.006	-0.008	-0.002	0.009	-0.005	-0.057
12.C	-0.189	0.068	-0.169	0.002	-0.018	0.006	0.040	0.010	-0.064
13.C	-0.184	0.135	-0.153	-0.025	-0.019	-0.011	0.031	0.046	-0.065
14.C	-0.012	0.050	-0.016	-0.044	-0.011	-0.035	-0.049	0.086	-0.077
15.C	0.116	-0.055	0.089	-0.030	-0.005	-0.038	-0.108	0.082	-0.083
16.C	0.117	-0.105	0.072	-0.007	-0.003	-0.022	-0.073	0.032	-0.072
17.H	-0.284	0.106	-0.264	0.016	-0.023	0.025	0.087	-0.016	-0.066
18.H	-0.286	0.211	-0.234	-0.030	-0.025	-0.006	0.074	0.045	-0.061
19.H	0.021	0.062	0.011	-0.067	-0.010	-0.050	-0.076	0.125	-0.084
20.H	0.241	-0.110	0.201	-0.035	-0.004	-0.054	-0.194	0.122	-0.095
21.H	0.241	-0.198	0.168	0.001	0.003	-0.025	-0.111	0.030	-0.077

	64.537			91.359			105.404		
1.C	-0.052	-0.096	-0.168	-0.118	0.168	-0.162	-0.058	-0.180	-0.141
2.C	-0.028	0.091	-0.264	-0.035	0.254	-0.189	0.152	-0.199	-0.077
3.H	-0.035	0.222	-0.188	-0.092	0.368	-0.169	0.264	-0.202	0.022
4.H	0.005	0.109	-0.420	0.102	0.215	-0.232	0.153	-0.186	-0.144
5.H	-0.081	-0.123	-0.012	-0.240	0.205	-0.113	-0.072	-0.189	-0.076
6.H	-0.043	-0.237	-0.250	-0.043	0.047	-0.179	-0.175	-0.178	-0.232
7.O	0.041	0.146	-0.110	-0.174	-0.121	0.147	-0.234	0.130	-0.050
8.Re	-0.010	-0.006	0.016	0.009	-0.007	0.030	0.002	0.019	0.007
9.O	-0.063	-0.131	0.051	0.084	0.041	-0.088	0.075	-0.160	-0.227
10.O	0.031	0.054	0.219	-0.039	-0.049	-0.115	0.072	0.043	0.105
11.N	-0.092	0.005	-0.072	0.034	0.013	0.020	0.123	0.031	0.133
12.C	-0.031	0.027	-0.084	-0.060	0.018	0.006	0.046	0.004	0.150
13.C	0.117	0.018	0.007	-0.095	-0.016	-0.027	-0.090	-0.012	0.064
14.C	0.194	-0.016	0.101	0.013	-0.073	-0.023	-0.157	0.019	-0.036
15.C	0.083	-0.017	0.086	0.150	-0.094	0.013	-0.041	0.032	-0.031
16.C	-0.052	-0.009	-0.003	0.145	-0.046	0.025	0.096	0.038	0.064

17.H	-0.087	0.047	-0.165	-0.130	0.054	0.005	0.077	-0.002	0.228
18.H	0.174	0.022	0.008	-0.190	-0.013	-0.041	-0.154	-0.023	0.067
19.H	0.324	-0.041	0.181	0.002	-0.109	-0.040	-0.283	0.027	-0.118
20.H	0.089	-0.018	0.146	0.261	-0.146	0.032	-0.049	0.034	-0.104
21.H	-0.121	-0.013	-0.011	0.233	-0.049	0.042	0.172	0.044	0.071

	128.086			147.770			179.067		
1.C	0.127	0.086	-0.050	-0.265	0.065	-0.119	0.176	-0.089	0.052
2.C	0.152	0.139	-0.071	0.201	-0.080	0.077	0.232	-0.073	0.053
3.H	0.036	0.247	-0.108	0.315	-0.078	0.181	0.168	-0.011	0.034
4.H	0.297	0.088	-0.060	0.403	-0.157	0.124	0.332	-0.110	0.069
5.H	-0.013	0.146	-0.067	-0.492	0.164	-0.149	0.083	-0.051	0.045
6.H	0.241	-0.007	-0.019	-0.380	0.070	-0.206	0.240	-0.155	0.062
7.O	0.156	0.072	-0.115	0.063	-0.009	0.006	-0.222	-0.067	0.127
8.Re	-0.017	-0.029	-0.011	0.005	0.002	0.003	-0.008	0.005	0.044
9.O	0.100	0.190	-0.115	-0.020	0.045	0.074	0.115	0.064	-0.157
10.O	-0.314	0.048	0.145	0.001	-0.005	-0.021	-0.163	0.027	0.054
11.N	0.100	-0.159	0.081	-0.025	-0.028	-0.026	-0.080	-0.011	-0.157
12.C	0.097	-0.090	0.024	-0.006	-0.015	-0.038	-0.029	0.024	-0.190
13.C	-0.005	0.042	-0.007	0.017	0.008	-0.019	0.108	0.026	-0.114
14.C	-0.119	0.108	0.031	0.014	0.010	0.008	0.166	-0.003	-0.045
15.C	-0.085	0.019	0.116	-0.019	0.000	0.011	-0.025	0.024	-0.098
16.C	0.025	-0.118	0.144	-0.037	-0.021	-0.007	-0.129	0.011	-0.166
17.H	0.166	-0.129	-0.003	0.000	-0.020	-0.057	-0.050	0.026	-0.262
18.H	-0.006	0.113	-0.075	0.038	0.016	-0.025	0.175	0.018	-0.099
19.H	-0.227	0.230	-0.007	0.034	0.021	0.024	0.314	-0.041	0.044
20.H	-0.144	0.050	0.159	-0.034	0.008	0.030	-0.084	0.052	-0.068
21.H	0.037	-0.194	0.210	-0.059	-0.029	-0.005	-0.219	0.039	-0.203

	205.473			223.051			297.782		
1.C	-0.009	0.029	0.027	-0.008	-0.009	-0.015	-0.005	-0.032	0.012
2.C	0.072	0.007	0.058	-0.034	-0.004	-0.021	-0.026	-0.024	0.002
3.H	0.017	0.051	0.036	0.021	-0.039	0.007	-0.422	0.194	-0.218
4.H	0.203	-0.048	0.111	-0.126	0.036	-0.063	0.382	-0.198	0.198
5.H	-0.132	0.090	-0.020	0.074	-0.048	0.016	-0.408	0.181	-0.198
6.H	0.049	-0.010	0.049	-0.076	0.035	-0.042	0.411	-0.226	0.217
7.O	0.104	-0.009	-0.062	-0.080	-0.059	0.076	-0.005	0.026	-0.011
8.Re	-0.022	-0.053	-0.002	-0.038	0.013	0.018	0.000	0.004	0.002
9.O	-0.032	0.012	0.053	-0.147	-0.058	0.196	-0.010	-0.020	0.008
10.O	-0.168	0.009	0.156	0.017	0.035	0.085	0.014	-0.004	-0.026
11.N	0.054	0.273	0.029	0.192	-0.110	-0.044	0.006	-0.006	0.001
12.C	-0.010	0.195	0.097	0.239	-0.054	-0.107	0.010	-0.006	-0.001
13.C	-0.051	0.015	0.028	0.163	0.037	-0.151	0.003	0.001	-0.004
14.C	0.049	-0.050	-0.114	-0.029	0.136	-0.215	-0.004	0.006	-0.006
15.C	0.168	0.041	-0.176	0.055	0.029	-0.106	0.005	-0.001	0.001
16.C	0.157	0.225	-0.110	0.220	-0.112	-0.027	0.006	-0.006	0.001
17.H	-0.061	0.231	0.184	0.313	-0.096	-0.139	0.020	-0.011	0.003
18.H	-0.161	-0.073	0.100	0.162	0.069	-0.182	0.003	0.004	-0.007
19.H	0.037	-0.175	-0.158	-0.227	0.276	-0.309	-0.013	0.012	-0.011
20.H	0.272	-0.011	-0.274	-0.026	0.070	-0.080	0.005	-0.001	0.004
21.H	0.233	0.322	-0.179	0.316	-0.164	0.033	0.002	-0.004	-0.001

	312.596			338.856			350.281		
1.C	0.001	0.014	-0.008	0.061	-0.008	0.009	0.010	0.020	-0.007
2.C	-0.002	0.003	-0.004	0.045	0.004	-0.002	0.043	0.011	0.004
3.H	0.141	-0.084	0.072	0.166	-0.060	0.065	0.130	-0.032	0.055
4.H	-0.181	0.080	-0.081	-0.098	0.065	-0.074	-0.019	0.038	-0.030
5.H	0.157	-0.067	0.066	0.214	-0.089	0.093	0.078	-0.020	0.041
6.H	-0.148	0.091	-0.076	-0.057	0.039	-0.053	-0.073	0.054	-0.051
7.O	0.292	0.357	-0.218	-0.445	0.423	-0.276	0.268	-0.050	0.107
8.Re	-0.084	-0.026	0.116	0.067	-0.033	0.009	0.027	0.059	0.021
9.O	0.147	0.055	-0.274	-0.094	0.078	0.421	-0.113	-0.675	-0.088
10.O	0.207	-0.232	-0.407	-0.314	-0.116	-0.310	-0.510	0.029	-0.287
11.N	0.034	-0.001	-0.028	-0.007	0.008	0.006	0.002	-0.010	0.004
12.C	0.072	0.043	-0.084	0.002	-0.004	0.015	-0.029	0.001	-0.012
13.C	0.101	0.043	-0.088	-0.026	0.002	0.002	0.031	-0.017	0.023
14.C	0.072	0.051	-0.151	-0.007	-0.006	0.014	-0.003	-0.002	0.008
15.C	0.051	0.011	-0.120	0.016	-0.006	0.019	-0.042	0.017	-0.014
16.C	0.087	-0.015	-0.080	-0.013	0.016	0.002	0.026	-0.019	0.019
17.H	0.073	0.038	-0.139	0.021	-0.012	0.035	-0.086	0.030	-0.038
18.H	0.092	0.012	-0.062	-0.038	0.008	-0.005	0.067	-0.029	0.039
19.H	0.039	0.066	-0.169	-0.004	-0.009	0.015	-0.001	-0.004	0.008
20.H	0.010	0.033	-0.092	0.039	-0.017	0.021	-0.082	0.034	-0.033
21.H	0.144	0.001	-0.087	-0.038	0.022	-0.007	0.084	-0.048	0.054

	380.434			417.894			637.050		
1.C	-0.001	0.006	-0.001	0.012	-0.003	0.012	0.002	-0.001	-0.002
2.C	0.000	0.010	-0.003	0.021	-0.010	0.014	-0.001	0.000	-0.004
3.H	-0.021	0.016	-0.017	0.026	-0.010	0.017	0.003	-0.009	-0.006
4.H	0.022	0.000	0.008	0.029	-0.014	0.024	-0.004	-0.001	0.003
5.H	-0.026	0.015	-0.001	0.009	-0.002	0.013	0.002	-0.004	0.005
6.H	0.024	-0.017	0.006	0.000	0.002	0.007	-0.002	-0.008	-0.009
7.O	-0.015	0.000	-0.007	-0.010	0.004	0.000	0.002	-0.004	-0.005
8.Re	0.002	-0.004	-0.004	0.007	-0.002	0.001	-0.001	-0.001	0.000

9.O	0.003	0.028	0.011	0.024	0.006	-0.030	-0.001	0.004	0.001
10.O	0.009	-0.004	0.001	-0.010	0.002	0.009	-0.002	-0.006	0.002
11.N	0.010	0.002	0.024	-0.277	0.124	-0.159	-0.031	-0.113	-0.064
12.C	-0.164	0.082	-0.062	0.018	-0.016	0.011	-0.160	-0.254	0.101
13.C	0.128	-0.059	0.093	0.158	-0.083	0.088	-0.090	0.154	0.294
14.C	0.023	-0.024	0.016	-0.208	0.085	-0.088	0.023	0.136	0.065
15.C	-0.174	0.070	-0.094	0.112	-0.057	0.085	0.185	0.279	-0.113
16.C	0.148	-0.060	0.084	0.060	-0.034	0.052	0.088	-0.135	-0.263
17.H	-0.442	0.210	-0.211	0.033	-0.021	0.027	-0.080	-0.310	0.040
18.H	0.269	-0.148	0.191	0.357	-0.166	0.188	0.072	0.258	0.219
19.H	0.060	-0.059	0.031	-0.502	0.229	-0.243	-0.051	-0.267	-0.097
20.H	-0.342	0.144	-0.190	0.298	-0.140	0.175	0.100	0.330	0.040
21.H	0.415	-0.178	0.225	0.166	-0.098	0.123	0.043	-0.223	-0.204

	655.835			682.528			736.771		
1.C	-0.002	0.000	0.001	0.000	0.003	0.001	0.000	-0.001	0.004
2.C	0.000	0.000	0.002	0.002	0.003	0.001	0.000	-0.002	0.003
3.H	0.005	-0.006	0.003	0.002	-0.004	-0.001	0.006	0.012	0.015
4.H	0.013	-0.006	0.011	-0.007	0.005	0.003	0.014	-0.004	-0.007
5.H	0.007	-0.004	0.007	-0.005	0.003	0.007	0.005	0.001	-0.011
6.H	0.002	-0.003	0.002	0.003	-0.005	-0.002	-0.002	0.014	0.011
7.O	0.006	0.008	0.000	0.002	0.001	-0.001	-0.002	0.001	0.000
8.Re	-0.007	-0.002	0.009	-0.002	-0.001	0.002	0.001	0.000	0.000
9.O	0.006	0.000	-0.001	-0.002	0.000	0.001	-0.001	0.000	-0.005
10.O	0.004	-0.008	-0.004	0.003	-0.002	-0.003	0.000	0.002	0.001
11.N	0.069	0.090	-0.238	0.128	-0.025	-0.012	-0.117	0.052	-0.056
12.C	0.058	-0.147	-0.080	-0.065	-0.013	-0.063	0.099	-0.043	0.062
13.C	-0.099	-0.143	-0.144	0.083	-0.094	0.024	-0.034	0.015	-0.014
14.C	-0.108	-0.086	0.244	-0.076	-0.007	0.054	0.110	-0.038	0.044
15.C	-0.040	0.213	0.017	0.109	0.018	0.067	-0.023	0.003	-0.011
16.C	0.115	0.132	0.059	-0.036	0.073	-0.027	0.098	-0.055	0.054
17.H	0.174	-0.173	0.233	-0.498	0.196	-0.221	-0.133	0.065	-0.066
18.H	0.203	-0.035	-0.215	-0.134	0.074	-0.159	-0.507	0.220	-0.258
19.H	0.173	-0.204	0.401	-0.466	0.157	-0.158	-0.267	0.142	-0.159
20.H	0.245	0.071	-0.151	-0.131	0.122	-0.154	-0.524	0.229	-0.245
21.H	0.230	-0.137	0.303	-0.402	0.171	-0.168	-0.133	0.062	-0.080

	814.134			844.018			921.376		
1.C	0.023	0.033	-0.012	0.000	-0.004	0.001	0.003	0.001	0.001
2.C	0.020	0.030	-0.011	-0.003	-0.001	-0.001	0.005	-0.002	0.003
3.H	-0.032	-0.386	-0.309	0.012	0.034	0.033	-0.020	-0.006	-0.021
4.H	-0.221	0.019	0.436	0.025	-0.003	-0.037	-0.038	0.014	-0.004
5.H	-0.235	0.020	0.445	0.023	-0.002	-0.045	-0.025	0.010	0.008
6.H	-0.020	-0.393	-0.308	-0.004	0.038	0.024	-0.010	-0.011	-0.017
7.O	0.000	-0.001	-0.001	0.000	-0.002	-0.001	-0.001	-0.003	-0.005
8.Re	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.001	-0.001	0.001
9.O	0.000	0.000	0.000	0.001	0.000	0.000	-0.017	0.004	-0.008
10.O	0.000	-0.002	0.000	-0.001	-0.004	0.000	0.001	0.011	-0.003
11.N	-0.002	0.002	0.000	0.007	0.003	-0.002	-0.015	0.005	-0.005
12.C	-0.005	0.001	-0.002	-0.077	0.033	-0.044	0.074	-0.033	0.041
13.C	-0.003	0.001	-0.002	-0.043	0.018	-0.026	-0.034	0.015	-0.018
14.C	0.003	-0.001	0.000	-0.003	-0.003	0.004	-0.054	0.029	-0.031
15.C	0.003	-0.004	0.002	0.046	-0.025	0.029	-0.034	0.014	-0.018
16.C	0.005	-0.001	0.004	0.072	-0.026	0.042	0.082	-0.042	0.041
17.H	0.051	-0.025	0.030	0.410	-0.193	0.234	-0.440	0.206	-0.248
18.H	0.013	-0.005	0.005	0.400	-0.189	0.215	0.198	-0.086	0.101
19.H	-0.011	0.009	-0.007	-0.035	0.008	-0.014	0.352	-0.145	0.191
20.H	-0.043	0.017	-0.023	-0.389	0.169	-0.219	0.190	-0.086	0.112
21.H	-0.019	0.013	-0.011	-0.395	0.189	-0.213	-0.489	0.237	-0.285

	949.465			955.454			957.679		
1.C	0.029	-0.016	0.011	-0.073	0.037	-0.031	0.058	-0.030	0.026
2.C	-0.059	0.028	-0.036	0.099	-0.046	0.059	-0.104	0.050	-0.066
3.H	0.255	-0.114	0.156	-0.408	0.197	-0.241	0.461	-0.219	0.272
4.H	0.241	-0.110	0.148	-0.375	0.172	-0.233	0.415	-0.191	0.255
5.H	-0.062	0.031	-0.031	0.223	-0.109	0.086	-0.150	0.076	-0.062
6.H	-0.057	0.032	-0.025	0.194	-0.102	0.091	-0.127	0.069	-0.056
7.O	0.003	0.021	0.028	-0.019	-0.124	-0.157	-0.019	-0.076	-0.114
8.Re	-0.003	-0.001	-0.004	0.011	0.016	0.016	0.032	-0.023	0.034
9.O	0.033	-0.009	0.017	-0.095	0.022	-0.051	-0.386	0.108	-0.198
10.O	0.001	-0.002	0.001	-0.012	-0.088	0.024	0.019	0.234	-0.084
11.N	0.006	-0.001	-0.009	-0.002	0.000	0.002	0.006	-0.002	0.002
12.C	-0.063	0.038	-0.038	-0.046	0.021	-0.028	0.001	0.013	-0.004
13.C	0.079	-0.022	0.052	0.053	-0.021	0.022	-0.003	-0.002	-0.003
14.C	-0.009	-0.008	0.011	-0.001	-0.005	0.011	-0.005	-0.004	0.011
15.C	-0.076	0.024	-0.040	-0.044	0.019	-0.021	0.016	-0.003	0.008
16.C	0.066	-0.033	0.029	0.038	-0.017	0.014	-0.018	0.002	-0.017
17.H	0.314	-0.137	0.161	0.227	-0.106	0.126	0.046	-0.007	0.016
18.H	-0.392	0.204	-0.208	-0.245	0.127	-0.148	0.019	-0.010	0.008
19.H	-0.012	-0.017	0.008	-0.031	0.011	-0.004	-0.025	0.002	0.001
20.H	0.369	-0.177	0.185	0.212	-0.097	0.114	-0.066	0.033	-0.044
21.H	-0.333	0.153	-0.191	-0.160	0.091	-0.108	0.111	-0.055	0.049

	961.074			979.032			989.325		

1.C	-0.075	0.040	-0.032	-0.008	0.004	-0.003	-0.056	0.032	-0.024
2.C	0.107	-0.048	0.063	0.001	0.000	0.001	-0.010	0.002	-0.011
3.H	-0.449	0.200	-0.278	-0.003	0.005	0.001	0.095	-0.032	0.059
4.H	-0.402	0.184	-0.247	0.020	-0.008	0.007	0.198	-0.092	0.115
5.H	0.242	-0.126	0.122	0.049	-0.024	0.018	0.359	-0.179	0.165
6.H	0.183	-0.092	0.087	0.028	-0.014	0.014	0.252	-0.138	0.112
7.O	0.022	0.151	0.185	0.001	0.004	0.006	0.043	0.270	0.356
8.Re	-0.001	-0.038	-0.008	0.000	0.000	-0.001	0.029	0.007	-0.028
9.O	-0.040	0.019	-0.019	0.000	0.000	0.000	-0.351	0.097	-0.177
10.O	0.027	0.262	-0.080	0.000	-0.002	0.001	-0.044	-0.444	0.150
11.N	-0.003	-0.007	-0.001	-0.010	0.004	-0.005	-0.020	-0.012	0.038
12.C	-0.031	0.021	-0.019	-0.010	0.004	-0.004	-0.023	-0.067	-0.001
13.C	0.025	-0.009	0.021	0.065	-0.035	0.034	-0.002	-0.017	-0.032
14.C	0.005	-0.011	0.006	-0.109	0.052	-0.064	0.042	0.010	-0.047
15.C	-0.020	0.020	-0.019	0.070	-0.027	0.039	0.011	0.033	-0.010
16.C	0.023	-0.004	0.015	-0.007	0.004	0.000	0.000	0.053	0.049
17.H	0.174	-0.078	0.063	0.074	-0.036	0.047	-0.062	-0.054	0.000
18.H	-0.145	0.061	-0.061	-0.355	0.153	-0.187	0.063	-0.037	-0.013
19.H	-0.055	-0.013	-0.034	0.603	-0.281	0.317	-0.006	0.037	-0.078
20.H	0.141	-0.053	0.050	-0.379	0.174	-0.208	0.066	0.013	0.000
21.H	-0.126	0.039	-0.043	0.068	-0.042	0.050	-0.027	0.050	0.056

	994.634			1009.887			1015.346		
1.C	0.095	-0.048	0.051	-0.025	0.006	-0.009	-0.022	0.008	-0.013
2.C	0.029	-0.013	0.011	0.002	0.007	-0.002	-0.017	0.013	-0.007
3.H	-0.146	0.054	-0.102	0.422	-0.217	0.234	0.144	-0.063	0.092
4.H	-0.345	0.158	-0.213	-0.382	0.171	-0.178	0.057	-0.023	0.044
5.H	-0.587	0.301	-0.267	-0.272	0.143	-0.170	0.084	-0.042	0.017
6.H	-0.398	0.227	-0.165	0.513	-0.235	0.264	0.164	-0.077	0.080
7.O	0.001	0.017	0.022	0.001	0.002	0.003	-0.008	-0.040	-0.048
8.Re	0.003	0.000	-0.001	0.000	0.000	0.000	-0.001	-0.001	0.001
9.O	-0.029	0.008	-0.016	0.001	0.000	0.001	0.047	-0.011	0.020
10.O	-0.004	-0.023	0.008	-0.001	0.000	0.001	0.005	0.063	-0.018
11.N	-0.013	-0.005	0.017	0.001	0.002	-0.004	-0.118	-0.049	0.167
12.C	-0.019	-0.009	-0.007	0.006	0.006	-0.001	-0.144	-0.242	0.018
13.C	0.013	-0.019	-0.008	-0.001	0.006	0.004	0.019	-0.161	-0.146
14.C	0.004	0.004	-0.012	-0.006	-0.002	0.008	0.174	0.064	-0.255
15.C	0.006	0.019	-0.001	-0.001	-0.007	0.000	0.076	0.211	-0.003
16.C	0.004	0.011	0.011	0.000	-0.004	-0.007	-0.020	0.183	0.222
17.H	0.043	-0.039	0.029	0.008	0.005	-0.008	-0.149	-0.253	0.152
18.H	-0.066	0.010	-0.047	0.007	0.008	0.003	-0.054	-0.215	-0.138
19.H	0.030	-0.007	0.000	-0.003	-0.004	0.011	0.164	0.069	-0.295
20.H	0.014	0.017	0.013	-0.009	-0.004	-0.012	0.163	0.204	0.109
21.H	-0.003	0.015	0.009	0.013	-0.004	-0.007	-0.170	0.134	0.271

	1043.406			1063.483			1081.677		
1.C	-0.007	0.006	-0.002	0.000	0.000	-0.003	0.002	0.000	0.001
2.C	-0.006	0.003	0.000	-0.004	0.002	-0.002	-0.001	-0.001	0.000
3.H	0.027	-0.014	0.017	0.000	0.003	0.004	-0.001	-0.002	-0.001
4.H	0.045	-0.020	0.031	0.021	-0.009	0.010	-0.004	0.000	0.001
5.H	0.049	-0.025	0.031	0.015	-0.008	0.004	-0.010	0.005	-0.001
6.H	0.033	-0.028	0.006	-0.004	0.002	-0.005	-0.006	-0.003	-0.008
7.O	0.001	0.007	0.009	-0.001	-0.005	-0.003	-0.002	-0.006	-0.006
8.Re	0.002	0.001	-0.004	0.001	0.000	-0.001	0.000	0.002	0.001
9.O	0.009	-0.003	0.002	0.008	-0.001	0.002	-0.002	0.000	-0.001
10.O	0.000	-0.010	0.005	0.000	0.006	0.000	0.000	-0.010	0.002
11.N	-0.151	-0.061	0.214	-0.114	-0.050	0.152	-0.013	-0.088	-0.054
12.C	0.093	0.247	0.006	0.021	-0.047	-0.060	0.076	0.091	-0.042
13.C	-0.002	-0.219	-0.187	0.044	0.075	-0.022	-0.025	0.052	0.074
14.C	-0.072	-0.031	0.117	-0.071	-0.039	0.099	-0.014	-0.092	-0.049
15.C	0.109	0.267	0.019	0.029	-0.033	-0.072	0.041	0.081	-0.007
16.C	0.009	-0.201	-0.176	0.031	0.074	0.005	-0.040	0.033	0.106
17.H	0.152	0.229	-0.008	0.108	-0.137	-0.353	0.177	0.011	-0.350
18.H	-0.157	-0.424	-0.029	0.299	0.361	-0.260	-0.204	-0.157	0.266
19.H	-0.080	-0.018	0.113	-0.093	-0.096	0.083	-0.120	-0.544	-0.248
20.H	0.000	0.348	0.303	0.184	-0.132	-0.541	0.134	0.038	-0.239
21.H	0.017	-0.178	-0.211	0.182	0.248	-0.103	-0.263	-0.211	0.280

	1171.515			1203.925			1214.219		
1.C	0.000	0.000	0.000	-0.082	-0.121	0.043	0.001	0.002	-0.002
2.C	-0.001	0.000	0.001	0.082	0.121	-0.043	-0.003	-0.001	0.002
3.H	0.000	-0.002	0.000	0.002	-0.324	-0.380	0.003	0.005	0.010
4.H	0.002	-0.001	-0.002	-0.154	0.096	0.460	0.010	-0.004	-0.001
5.H	0.001	0.000	-0.001	0.189	-0.109	-0.429	0.005	-0.003	0.005
6.H	0.000	-0.003	-0.002	-0.044	0.323	0.349	0.004	-0.009	-0.007
7.O	0.000	0.001	0.001	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000
8.Re	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000
9.O	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.001	0.000	0.000
10.O	0.000	0.001	0.000	0.000	-0.001	0.000	0.000	0.001	0.000
11.N	0.006	0.026	0.009	-0.001	0.000	0.000	-0.005	-0.002	0.009
12.C	0.001	0.001	0.005	0.002	0.000	-0.001	0.019	-0.043	-0.074
13.C	0.019	0.020	-0.022	-0.001	0.000	0.001	-0.024	-0.011	0.038
14.C	-0.012	-0.051	-0.023	-0.001	-0.001	0.001	-0.007	-0.002	0.009
15.C	-0.014	0.006	0.033	0.000	0.000	0.001	-0.025	-0.011	0.039
16.C	0.000	-0.001	-0.002	0.001	0.000	-0.001	0.044	0.071	-0.024
17.H	-0.046	0.039	0.110	-0.001	0.000	-0.012	0.172	-0.179	-0.460

18.H	0.298	0.319	-0.274	-0.004	-0.005	0.006	-0.265	-0.268	0.257
19.H	-0.131	-0.591	-0.255	-0.001	-0.004	0.000	-0.006	-0.011	0.010
20.H	-0.201	0.116	0.461	-0.004	0.002	0.008	-0.188	0.082	0.416
21.H	0.068	0.075	-0.054	0.005	0.008	-0.006	0.304	0.374	-0.224

	1291.058			1340.244			1352.203		
1.C	0.002	-0.004	-0.008	0.030	-0.053	-0.093	0.000	0.000	0.000
2.C	-0.002	0.002	0.004	-0.020	0.048	0.096	-0.001	0.001	0.003
3.H	0.003	0.033	0.029	-0.027	0.379	0.325	-0.002	-0.005	-0.002
4.H	-0.017	0.000	0.047	-0.233	0.073	0.442	0.002	0.002	-0.006
5.H	0.013	-0.007	-0.019	0.166	-0.044	-0.451	0.008	0.000	-0.016
6.H	0.003	-0.020	-0.019	-0.032	-0.337	-0.350	-0.002	-0.014	-0.012
7.O	-0.002	-0.001	0.001	0.000	0.002	0.002	0.000	0.001	0.001
8.Re	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000
9.O	0.001	-0.001	-0.001	-0.002	0.001	-0.002	0.000	0.000	0.000
10.O	0.001	0.000	-0.001	-0.001	0.001	0.000	0.000	0.001	0.000
11.N	-0.087	-0.385	-0.167	0.001	0.006	0.001	-0.009	-0.041	-0.019
12.C	-0.090	0.139	0.302	0.000	-0.001	-0.003	0.021	-0.013	-0.045
13.C	0.110	0.126	-0.109	-0.001	-0.001	0.001	0.022	0.022	-0.024
14.C	-0.043	-0.188	-0.079	0.000	0.001	0.001	0.017	0.073	0.030
15.C	-0.075	0.039	0.180	0.001	-0.001	-0.003	-0.017	0.008	0.036
16.C	0.185	0.260	-0.131	-0.002	-0.003	0.000	-0.032	-0.036	0.028
17.H	-0.100	0.136	0.294	0.000	-0.001	-0.005	-0.192	0.174	0.492
18.H	0.038	0.034	-0.025	0.001	0.003	-0.003	-0.187	-0.206	0.167
19.H	0.097	0.414	0.184	0.000	0.000	0.000	-0.076	-0.336	-0.147
20.H	-0.040	0.021	0.045	0.000	0.000	0.001	0.130	-0.079	-0.296
21.H	0.192	0.245	-0.126	-0.009	-0.016	0.009	0.322	0.385	-0.254

	1427.444			1445.857			1473.392		
1.C	0.011	-0.029	-0.057	-0.001	0.002	0.004	0.000	-0.001	-0.002
2.C	0.021	-0.035	-0.061	-0.002	0.004	0.007	-0.001	0.000	-0.001
3.H	0.034	0.422	0.250	-0.004	-0.033	-0.019	0.002	-0.004	0.000
4.H	-0.262	-0.025	0.419	0.019	0.005	-0.034	0.004	-0.001	-0.001
5.H	-0.222	-0.046	0.446	0.018	0.004	-0.039	-0.002	-0.002	0.007
6.H	0.077	0.406	0.284	-0.007	-0.035	-0.026	0.004	0.004	0.004
7.O	0.000	0.000	-0.001	-0.001	-0.001	0.000	-0.001	-0.002	-0.001
8.Re	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000
9.O	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.001	0.000	0.000
10.O	0.000	0.000	0.000	0.001	-0.001	0.000	0.000	0.002	0.000
11.N	0.000	-0.003	-0.002	-0.023	-0.110	-0.050	-0.043	-0.019	0.061
12.C	0.004	0.002	-0.006	0.074	0.075	-0.085	0.034	-0.059	-0.097
13.C	-0.004	-0.002	0.005	-0.104	-0.070	0.136	0.064	0.106	-0.031
14.C	0.000	-0.001	-0.001	-0.006	-0.033	-0.018	-0.052	-0.024	0.071
15.C	0.004	0.002	-0.004	0.091	0.017	-0.149	0.031	-0.063	-0.111
16.C	-0.004	-0.002	0.006	-0.062	0.012	0.124	0.056	0.092	-0.024
17.H	-0.007	0.013	0.020	-0.061	0.229	0.315	-0.208	0.143	0.489
18.H	0.007	0.008	-0.002	0.230	0.303	-0.159	-0.241	-0.221	0.260
19.H	0.004	0.005	0.004	0.099	0.427	0.180	-0.053	-0.021	0.096
20.H	-0.003	0.007	0.007	-0.112	0.154	0.317	-0.183	0.054	0.383
21.H	0.016	0.025	-0.011	0.216	0.366	-0.085	-0.291	-0.318	0.261

	1555.303			1598.133			1607.355		
1.C	-0.001	0.002	0.003	-0.004	0.009	0.018	-0.061	0.133	0.252
2.C	0.000	-0.001	-0.002	0.005	-0.010	-0.017	0.068	-0.134	-0.247
3.H	-0.002	-0.003	-0.006	0.009	0.031	0.008	0.121	0.412	0.101
4.H	0.001	-0.001	-0.009	-0.021	-0.011	0.021	-0.269	-0.162	0.318
5.H	0.006	0.003	-0.012	0.017	0.013	-0.025	0.251	0.185	-0.347
6.H	-0.005	-0.011	-0.007	-0.010	-0.031	-0.010	-0.159	-0.418	-0.132
7.O	0.001	0.002	0.001	0.000	0.001	0.000	0.000	-0.001	-0.001
8.Re	0.000	-0.001	0.000	0.000	0.000	0.000	-0.001	0.000	0.000
9.O	0.000	0.000	0.000	-0.001	0.000	0.001	0.002	-0.001	0.002
10.O	-0.001	0.002	0.000	0.000	-0.001	-0.001	0.001	0.003	-0.001
11.N	0.035	0.145	0.057	0.062	0.020	-0.094	-0.002	-0.003	0.006
12.C	0.016	-0.109	-0.108	-0.127	-0.001	0.241	0.006	-0.001	-0.011
13.C	0.082	0.208	0.020	0.155	0.113	-0.193	-0.007	-0.006	0.008
14.C	-0.084	-0.365	-0.155	-0.075	-0.020	0.117	0.003	0.003	-0.003
15.C	0.011	0.177	0.133	0.134	-0.004	-0.249	-0.006	-0.001	0.009
16.C	-0.080	-0.154	0.018	-0.152	-0.109	0.189	0.008	0.007	-0.007
17.H	-0.134	0.012	0.238	0.098	-0.228	-0.373	-0.005	0.010	0.016
18.H	-0.087	0.044	0.193	-0.188	-0.271	0.114	0.006	0.010	-0.004
19.H	0.122	0.552	0.241	-0.090	-0.054	0.130	0.003	-0.001	-0.005
20.H	0.109	0.150	-0.124	-0.103	0.151	0.309	0.003	-0.007	-0.008
21.H	0.192	0.166	-0.203	0.220	0.355	-0.095	-0.007	-0.016	0.008

	3049.434			3067.915			3126.930		
1.C	-0.003	0.008	0.015	0.013	-0.029	-0.059	0.000	0.000	0.000
2.C	-0.019	0.026	0.052	-0.009	0.013	0.026	0.000	0.000	0.000
3.H	0.419	0.300	-0.464	0.151	0.108	-0.168	0.002	0.001	-0.002
4.H	-0.204	-0.584	-0.105	-0.074	-0.212	-0.039	0.000	-0.001	0.000
5.H	-0.093	-0.226	-0.051	0.241	0.595	0.135	-0.001	-0.002	-0.001
6.H	0.134	0.111	-0.166	-0.374	-0.306	0.464	0.000	0.000	0.000
7.O	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000
8.Re	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000
9.O	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000

10.O	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000
11.N	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000
12.C	0.000	-0.001	0.000	0.000	0.000	0.000	0.006	0.011	-0.001
13.C	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.004	-0.022	-0.026
14.C	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	-0.038	-0.016	0.058
15.C	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.015	0.029	-0.003
16.C	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.001	-0.007	-0.007
17.H	0.003	0.006	-0.001	0.002	0.003	-0.001	-0.067	-0.125	0.016
18.H	0.000	0.000	-0.001	0.000	0.004	0.004	-0.031	0.267	0.287
19.H	-0.001	0.000	0.002	-0.001	-0.001	0.001	0.439	0.185	-0.658
20.H	0.000	-0.001	0.000	-0.001	-0.002	0.000	-0.163	-0.342	0.019
21.H	0.000	0.000	0.000	0.001	-0.003	-0.004	-0.014	0.072	0.087

	3135.936			3140.086			3141.450		
1.C	0.000	0.001	0.000	0.000	-0.001	0.000	-0.026	-0.039	0.013
2.C	-0.002	-0.003	0.001	0.001	0.002	0.000	0.045	0.070	-0.022
3.H	0.015	0.011	-0.017	-0.006	-0.005	0.008	-0.347	-0.238	0.390
4.H	0.007	0.021	0.004	-0.005	-0.014	-0.003	-0.200	-0.601	-0.122
5.H	-0.003	-0.008	-0.002	0.002	0.004	0.001	0.125	0.317	0.078
6.H	-0.003	-0.002	0.003	0.002	0.002	-0.003	0.193	0.152	-0.245
7.O	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000
8.Re	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000
9.O	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000
10.O	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000
11.N	0.000	-0.001	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000
12.C	0.025	0.046	-0.006	0.017	0.032	-0.004	0.001	0.001	0.000
13.C	0.002	-0.035	-0.034	-0.001	-0.011	-0.008	0.000	-0.001	-0.001
14.C	0.007	0.005	-0.008	0.023	0.009	-0.036	0.000	0.000	0.000
15.C	-0.017	-0.035	0.001	0.020	0.046	0.001	-0.001	-0.001	0.000
16.C	-0.003	0.015	0.019	0.005	-0.029	-0.033	0.000	0.002	0.002
17.H	-0.286	-0.532	0.070	-0.192	-0.357	0.048	-0.005	-0.009	0.001
18.H	-0.042	0.388	0.409	-0.010	0.107	0.110	-0.002	0.015	0.016
19.H	-0.071	-0.032	0.104	-0.258	-0.108	0.388	0.002	0.001	-0.002
20.H	0.193	0.406	-0.020	-0.240	-0.509	0.022	0.007	0.016	-0.001
21.H	0.037	-0.180	-0.220	-0.066	0.316	0.387	0.004	-0.020	-0.025

	3148.717			3154.947			3170.498		
1.C	0.001	0.001	0.000	0.002	0.003	-0.001	0.047	0.069	-0.024
2.C	0.001	0.001	0.000	0.000	0.000	0.000	0.026	0.040	-0.013
3.H	-0.007	-0.004	0.007	-0.004	-0.002	0.004	-0.203	-0.138	0.229
4.H	-0.002	-0.006	-0.002	0.001	0.003	0.000	-0.110	-0.336	-0.069
5.H	-0.003	-0.007	-0.002	-0.011	-0.027	-0.007	-0.221	-0.558	-0.139
6.H	-0.004	-0.003	0.005	-0.010	-0.008	0.013	-0.336	-0.265	0.429
7.O	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000
8.Re	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000
9.O	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000
10.O	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000
11.N	0.001	0.002	0.001	-0.001	-0.001	0.001	0.000	0.000	0.000
12.C	-0.024	-0.041	0.008	-0.017	-0.031	0.005	0.001	0.002	0.000
13.C	0.005	-0.033	-0.038	0.003	-0.027	-0.028	0.000	0.001	0.001
14.C	0.006	0.005	-0.006	0.014	0.006	-0.021	-0.001	0.000	0.001
15.C	-0.014	-0.026	0.004	0.019	0.039	-0.003	-0.001	-0.001	0.000
16.C	0.008	-0.028	-0.038	-0.008	0.033	0.043	0.000	0.000	0.000
17.H	0.251	0.464	-0.065	0.183	0.338	-0.047	-0.011	-0.020	0.003
18.H	-0.044	0.381	0.407	-0.033	0.291	0.309	0.001	-0.013	-0.013
19.H	-0.054	-0.026	0.079	-0.147	-0.061	0.221	0.006	0.002	-0.008
20.H	0.140	0.293	-0.017	-0.203	-0.425	0.022	0.007	0.014	0.000
21.H	-0.071	0.330	0.408	0.081	-0.375	-0.464	-0.001	0.004	0.005

List of All Frequencies:

Intensities
==========

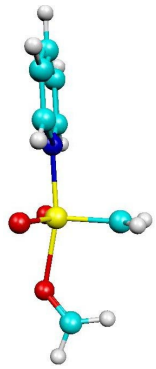
Frequency cm-1	Dipole Strength 1e-40 esu2 cm2	Absorption Intensity (degeneracy not counted) km/mole
-118.527642	2.648457	-0.078685
-9.177014	0.000000	0.000000
50.085042	662.388019	8.315695
64.536617	89.561209	1.448786
91.358900	263.589501	6.036109
105.404489	6.538856	0.172758
128.085877	20.614473	0.661838
147.769591	103.275508	3.825256
179.066851	80.712696	3.622723
205.472670	8.873144	0.456993
223.050940	40.290263	2.252590
297.781955	35.860277	2.676641
312.595629	114.273272	8.953764
338.855554	50.488678	4.288315
350.281096	14.460646	1.269646
380.434185	1.048261	0.099960
417.893534	66.694517	6.986085

637.050267	4.193302	0.669588
655.834872	76.033815	12.499118
682.527583	335.591817	57.412921
736.770833	200.673480	37.059579
814.133650	3.871362	0.790019
844.018046	1.055502	0.223300
921.375745	0.069107	0.015960
949.465428	6.120766	1.456676
955.453866	116.708624	27.950575
957.678989	687.346410	164.996107
961.073997	222.487774	53.597070
979.032326	0.456758	0.112089
989.325152	168.598602	41.809126
994.634352	373.917692	93.221812
1009.886706	10.635611	2.692236
1015.345981	69.824690	17.770561
1043.405805	2.951370	0.771889
1063.482567	126.023490	33.593863
1081.676738	15.016706	4.071461
1171.514639	5.605988	1.646182
1203.924534	0.399132	0.120447
1214.219151	20.135588	6.128292
1291.057536	2.583266	0.835974
1340.243856	45.205792	15.186440
1352.202595	5.895192	1.998102
1427.444400	51.466005	18.414407
1445.857457	137.750931	49.922703
1473.392469	9.554509	3.528620
1555.302872	3.028865	1.180791
1598.132847	99.395022	39.815812
1607.355404	67.755349	27.298172
3049.433794	1.856874	1.419318
3067.915238	2.958573	2.275117
3126.930106	0.234507	0.183803
3135.935673	2.518318	1.979501
3140.086383	40.668675	32.009559
3141.450250	0.991036	0.780365
3148.717413	56.471057	44.569491
3154.947100	5.616141	4.441280
3170.498271	2.034803	1.617067

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

1645.2402	3703.8660	4209.4021
-0.5448	0.8329	-0.0968
-0.2154	-0.2506	-0.9438
0.8104	0.4934	-0.3160

IVa



CCSD=-629.7071047

ATOMS cartesian

Re	-1.772807	0.027642	2.551047
C	-2.970306	-0.125330	1.092637
O	-1.406829	1.665061	2.974976
O	-1.369487	-1.494153	3.268843
O	-3.303459	0.156081	4.140164
H	-3.352591	0.747508	0.546187
H	-3.330085	-1.093089	0.717322
C	-4.525818	0.070975	4.050428
H	-5.028565	-0.078281	3.080403
H	-5.124860	0.148050	4.971776
N	0.011617	-0.057222	1.374135
C	0.556036	-1.254618	1.051486
C	1.707293	-1.340508	0.286728
H	0.050247	-2.136286	1.437642
H	2.115168	-2.323257	0.051475
C	2.322736	-0.173315	-0.158030
C	1.766479	1.052877	0.194078
C	0.612241	1.083145	0.959888
H	3.228440	-0.219331	-0.763941
H	2.221829	1.993661	-0.114428
H	0.146256	2.014965	1.271743

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)

	34.384			36.851			41.714		
1.Re	-0.002	0.031	-0.005	0.003	0.021	0.003	0.025	0.001	0.044
2.C	0.000	0.159	-0.019	0.023	-0.099	-0.002	0.119	0.021	-0.037
3.O	0.071	-0.008	0.069	-0.043	0.053	-0.086	0.016	-0.010	0.091
4.O	-0.077	-0.025	-0.073	0.033	0.073	0.098	-0.017	-0.001	0.060
5.O	-0.001	0.018	-0.002	-0.028	0.077	-0.028	-0.145	-0.019	-0.116
6.H	0.030	0.206	0.036	0.002	-0.138	-0.049	0.161	0.025	-0.060
7.H	-0.031	0.195	-0.082	0.054	-0.128	0.044	0.145	0.024	-0.074
8.C	0.020	-0.327	0.046	-0.006	-0.255	-0.007	-0.134	0.009	-0.297
9.H	0.031	-0.609	0.083	0.028	-0.582	0.026	0.008	0.050	-0.378
10.H	0.025	-0.350	0.051	-0.023	-0.217	-0.021	-0.271	-0.010	-0.385
11.N	0.003	-0.013	0.006	0.014	0.000	0.021	0.053	-0.005	0.079
12.C	0.047	-0.020	0.111	-0.089	-0.013	-0.104	0.048	-0.001	0.056
13.C	0.049	-0.046	0.115	-0.117	-0.037	-0.142	-0.045	0.001	-0.086
14.H	0.080	-0.003	0.193	-0.150	-0.010	-0.178	0.105	-0.002	0.131
15.H	0.086	-0.052	0.203	-0.209	-0.047	-0.257	-0.056	0.003	-0.113
16.C	0.001	-0.064	0.006	-0.025	-0.044	-0.036	-0.129	-0.001	-0.206
17.C	-0.045	-0.054	-0.100	0.097	-0.033	0.115	-0.093	-0.004	-0.145
18.C	-0.041	-0.027	-0.097	0.110	-0.010	0.134	0.005	-0.008	0.003
19.H	-0.001	-0.082	0.004	-0.049	-0.059	-0.069	-0.224	0.000	-0.349
20.H	-0.082	-0.064	-0.185	0.179	-0.040	0.214	-0.148	-0.003	-0.222
21.H	-0.071	-0.016	-0.176	0.187	-0.003	0.230	0.028	-0.007	0.036

	117.652			133.295			199.431		
1.Re	0.006	0.043	0.003	0.021	-0.006	0.022	0.003	0.004	-0.019
2.C	-0.039	0.001	0.043	-0.154	0.012	0.159	-0.282	0.024	0.214
3.O	-0.141	0.063	0.047	0.116	-0.030	0.018	-0.053	0.013	-0.010
4.O	0.196	0.068	-0.050	0.043	0.013	0.042	-0.074	0.003	0.020
5.O	-0.002	-0.388	0.032	-0.053	0.090	-0.036	-0.026	-0.025	0.017
6.H	-0.124	0.001	0.101	-0.204	0.018	0.201	-0.428	0.039	0.340
7.H	0.018	-0.006	0.009	-0.234	0.019	0.217	-0.449	0.033	0.350
8.C	-0.018	-0.050	-0.078	-0.031	-0.039	-0.211	-0.023	-0.004	-0.024
9.H	0.004	0.551	-0.183	0.138	-0.212	-0.274	0.002	0.069	-0.050
10.H	-0.052	-0.368	-0.074	-0.187	0.022	-0.318	-0.054	-0.062	-0.039

11.N	-0.033	0.052	-0.047	-0.115	-0.013	-0.167	0.091	-0.034	0.054
12.C	-0.091	0.010	0.003	-0.093	-0.007	-0.153	0.140	-0.018	0.057
13.C	-0.073	-0.091	0.049	0.015	0.013	0.007	0.088	0.007	-0.031
14.H	-0.148	0.054	0.026	-0.128	-0.018	-0.224	0.185	-0.033	0.083
15.H	-0.126	-0.124	0.096	0.055	0.021	0.045	0.088	0.011	-0.052
16.C	0.017	-0.141	0.047	0.088	0.026	0.141	0.018	0.012	-0.117
17.C	0.068	-0.098	-0.021	-0.005	0.017	0.025	0.055	-0.002	-0.012
18.C	0.033	0.005	-0.073	-0.110	-0.002	-0.133	0.111	-0.028	0.075
19.H	0.045	-0.208	0.094	0.203	0.043	0.312	-0.056	0.024	-0.229
20.H	0.140	-0.137	-0.035	0.016	0.024	0.078	0.026	0.012	-0.014
21.H	0.073	0.044	-0.126	-0.156	-0.009	-0.187	0.130	-0.032	0.115

	213.590			222.549			231.571		
1.Re	-0.096	0.008	0.061	-0.059	0.010	0.044	-0.013	-0.018	0.008
2.C	-0.035	-0.003	0.018	0.079	0.022	-0.073	-0.038	-0.081	0.035
3.O	0.237	0.033	-0.280	0.048	-0.011	0.010	-0.110	-0.040	0.173
4.O	0.205	-0.068	-0.244	0.013	0.054	0.084	0.157	-0.064	-0.187
5.O	0.243	-0.005	-0.055	-0.136	-0.048	0.038	-0.040	0.176	-0.028
6.H	0.065	-0.014	-0.071	0.199	0.034	-0.141	-0.225	-0.132	0.087
7.H	0.056	-0.013	-0.045	0.115	0.037	-0.147	0.130	-0.135	0.010
8.C	0.250	-0.021	-0.245	-0.149	-0.003	0.134	-0.034	0.040	0.017
9.H	0.426	0.030	-0.340	-0.245	0.109	0.167	-0.028	-0.467	0.091
10.H	0.125	-0.087	-0.327	-0.060	-0.076	0.199	-0.035	0.445	-0.017
11.N	0.048	-0.025	0.046	0.089	-0.058	-0.146	0.039	0.147	-0.013
12.C	0.088	-0.004	0.053	0.157	-0.024	-0.196	-0.017	0.109	0.037
13.C	0.055	0.010	-0.009	0.214	0.009	-0.149	-0.034	-0.017	0.033
14.H	0.128	-0.015	0.082	0.176	-0.065	-0.259	-0.057	0.156	0.086
15.H	0.063	0.016	-0.022	0.222	0.010	-0.143	-0.109	-0.061	0.090
16.C	0.001	0.014	-0.073	0.253	0.011	-0.089	0.034	-0.085	-0.040
17.C	0.030	0.000	0.016	0.165	-0.024	-0.114	0.118	-0.032	-0.078
18.C	0.063	-0.030	0.072	0.116	-0.069	-0.159	0.118	0.095	-0.062
19.H	-0.061	0.030	-0.166	0.302	0.041	-0.017	0.020	-0.170	-0.055
20.H	0.011	0.012	0.024	0.129	0.006	-0.077	0.186	-0.080	-0.126
21.H	0.081	-0.034	0.112	0.110	-0.059	-0.193	0.183	0.143	-0.098

	247.633			249.967			269.856		
1.Re	0.014	0.002	0.048	-0.002	0.032	-0.004	-0.058	-0.012	-0.038
2.C	0.102	-0.017	0.016	0.004	-0.277	0.021	-0.034	0.010	-0.109
3.O	-0.407	0.144	-0.062	0.165	-0.027	0.106	0.002	-0.159	0.387
4.O	-0.405	-0.180	-0.056	-0.154	-0.033	-0.076	0.004	0.222	0.376
5.O	0.185	0.021	0.044	0.000	-0.053	0.008	0.281	0.016	0.005
6.H	0.113	-0.019	0.011	-0.166	-0.543	-0.277	-0.024	0.017	-0.111
7.H	0.146	-0.039	0.036	0.183	-0.479	0.357	-0.067	0.039	-0.160
8.C	0.204	-0.011	-0.159	-0.002	-0.015	0.004	0.297	-0.005	-0.157
9.H	0.383	-0.037	-0.245	-0.013	0.168	-0.018	0.447	-0.005	-0.230
10.H	0.043	-0.011	-0.266	0.008	-0.168	0.024	0.179	-0.023	-0.237
11.N	0.011	0.027	-0.076	0.000	0.009	-0.005	0.018	0.037	-0.018
12.C	-0.008	0.021	-0.111	-0.003	0.008	-0.001	0.023	0.034	0.007
13.C	0.035	-0.003	-0.053	0.000	0.003	0.005	0.020	0.001	0.003
14.H	-0.041	0.023	-0.146	-0.005	0.010	0.001	0.020	0.037	0.014
15.H	0.016	-0.014	-0.041	0.001	0.002	0.009	0.007	-0.009	0.025
16.C	0.111	-0.018	0.016	0.003	0.000	0.000	0.021	-0.016	-0.040
17.C	0.065	-0.013	-0.071	0.005	0.002	-0.006	0.051	-0.004	-0.029
18.C	0.021	0.012	-0.125	0.005	0.007	-0.006	0.056	0.023	-0.011
19.H	0.173	-0.030	0.109	0.003	-0.003	0.000	-0.001	-0.036	-0.071
20.H	0.074	-0.019	-0.080	0.008	0.001	-0.005	0.066	-0.015	-0.040
21.H	0.013	0.027	-0.175	0.007	0.009	-0.008	0.084	0.039	-0.012

	274.463			342.018			380.753		
1.Re	0.002	0.040	-0.005	0.000	0.003	0.022	0.000	0.001	0.000
2.C	0.023	-0.056	-0.015	-0.037	0.005	0.055	0.000	-0.005	0.000
3.O	-0.186	0.030	0.207	-0.019	0.016	0.029	-0.006	0.005	0.000
4.O	0.159	0.015	-0.157	-0.020	-0.009	0.031	0.007	0.003	-0.005
5.O	0.024	0.075	0.000	0.075	-0.055	-0.464	0.000	0.002	-0.002
6.H	-0.183	-0.125	0.019	-0.082	0.008	0.093	0.017	0.004	0.001
7.H	0.244	-0.124	-0.054	-0.086	0.006	0.101	-0.016	0.003	-0.003
8.C	0.030	0.014	-0.016	0.041	0.012	0.084	0.000	-0.004	0.001
9.H	0.060	-0.149	-0.007	-0.429	0.032	0.321	-0.002	0.008	0.000
10.H	0.003	0.128	-0.043	0.512	0.059	0.385	0.003	-0.019	0.004
11.N	-0.024	-0.262	0.004	0.011	-0.004	0.023	-0.003	-0.002	-0.003
12.C	0.090	-0.210	-0.062	-0.014	-0.003	-0.023	-0.108	-0.007	-0.161
13.C	0.107	-0.029	-0.079	-0.013	-0.003	-0.021	0.109	0.002	0.167
14.H	0.166	-0.278	-0.111	-0.024	-0.005	-0.039	-0.284	-0.022	-0.429
15.H	0.212	0.034	-0.163	-0.022	-0.001	-0.041	0.221	0.009	0.334
16.C	-0.003	0.070	0.013	0.019	0.002	0.034	-0.003	-0.001	-0.001
17.C	-0.125	-0.016	0.097	-0.017	0.001	-0.016	-0.108	-0.004	-0.161
18.C	-0.127	-0.204	0.076	-0.020	-0.006	-0.022	0.108	0.000	0.165
19.H	0.004	0.206	0.013	0.055	0.006	0.088	-0.007	0.000	-0.007
20.H	-0.229	0.060	0.180	-0.028	0.001	-0.031	-0.222	-0.005	-0.333
21.H	-0.213	-0.264	0.118	-0.033	-0.008	-0.035	0.278	-0.002	0.427

	428.953			436.742			613.164		
1.Re	0.000	-0.007	0.000	-0.007	0.001	-0.009	0.000	-0.001	0.000
2.C	-0.001	-0.001	0.001	-0.028	-0.002	0.006	0.000	0.033	-0.004

3.O	-0.024	-0.008	0.013	0.020	-0.008	-0.005	0.020	-0.007	-0.025
4.O	0.026	-0.010	-0.014	0.017	0.012	-0.008	-0.020	-0.002	0.026
5.O	-0.008	0.121	-0.010	0.001	-0.014	0.049	0.000	-0.008	0.000
6.H	-0.025	0.009	0.033	-0.068	-0.003	0.032	-0.625	-0.037	0.327
7.H	0.018	0.004	-0.029	-0.065	-0.001	0.039	0.626	-0.082	-0.315
8.C	0.001	-0.026	0.004	0.003	0.001	-0.014	-0.001	0.004	0.000
9.H	-0.032	0.587	-0.074	0.061	-0.095	-0.027	0.000	0.001	0.000
10.H	0.043	-0.784	0.095	-0.053	0.113	-0.059	0.000	0.008	0.000
11.N	0.010	0.008	0.013	0.196	0.005	0.277	-0.001	0.001	0.000
12.C	-0.002	0.007	0.001	-0.025	-0.011	-0.042	-0.003	0.001	-0.003
13.C	-0.009	-0.001	-0.007	-0.093	-0.013	-0.147	0.000	0.002	0.001
14.H	-0.006	0.009	0.000	-0.096	-0.014	-0.144	0.003	0.001	0.005
15.H	-0.020	-0.003	-0.014	-0.217	-0.016	-0.348	0.004	0.002	0.008
16.C	0.007	-0.003	0.010	0.126	0.003	0.196	0.001	0.001	0.000
17.C	0.000	0.000	-0.009	-0.099	0.002	-0.150	-0.001	0.001	-0.002
18.C	0.000	0.007	-0.007	-0.023	0.007	-0.034	0.003	0.000	0.003
19.H	0.016	-0.007	0.025	0.311	0.014	0.471	0.002	0.000	0.001
20.H	-0.001	-0.004	-0.021	-0.226	-0.003	-0.353	-0.003	0.001	-0.004
21.H	-0.003	0.009	-0.015	-0.083	0.006	-0.121	0.002	0.000	-0.001

	623.904			635.164			645.862		
1.Re	0.000	-0.005	0.000	0.004	0.000	-0.002	-0.010	0.001	0.005
2.C	-0.002	0.159	-0.015	-0.003	-0.010	-0.004	0.010	0.001	0.024
3.O	-0.025	-0.018	-0.017	0.011	0.009	-0.003	-0.002	0.000	0.002
4.O	0.026	-0.014	0.020	-0.007	0.006	-0.001	-0.008	0.008	0.002
5.O	0.000	0.003	0.000	0.001	0.000	-0.001	-0.006	-0.001	0.003
6.H	-0.233	-0.309	-0.580	0.013	0.020	0.030	0.010	0.013	0.044
7.H	0.239	-0.192	0.626	-0.018	0.013	-0.045	0.021	0.004	0.008
8.C	0.000	-0.002	0.000	0.002	0.003	0.000	-0.007	0.000	0.000
9.H	0.000	-0.002	0.000	0.003	0.001	-0.001	-0.007	-0.001	0.002
10.H	0.000	-0.004	0.000	-0.001	0.008	-0.002	0.002	0.002	0.006
11.N	0.000	0.002	0.000	-0.104	0.129	0.056	0.285	0.038	-0.153
12.C	0.001	0.003	-0.005	0.171	0.271	-0.108	0.105	-0.131	-0.103
13.C	0.003	-0.003	-0.001	0.181	-0.132	-0.128	0.114	-0.333	-0.024
14.H	0.003	0.005	0.001	0.194	0.262	-0.112	-0.133	0.060	0.026
15.H	0.003	-0.005	0.003	-0.048	-0.270	0.036	0.327	-0.218	-0.149
16.C	0.000	-0.002	0.000	0.107	-0.140	-0.062	-0.299	-0.042	0.152
17.C	-0.004	-0.004	0.001	-0.220	-0.312	0.139	-0.041	0.150	0.066
18.C	-0.001	0.003	0.004	-0.189	0.133	0.134	-0.036	0.282	-0.020
19.H	0.000	0.004	0.000	0.141	0.263	-0.043	-0.326	0.122	0.100
20.H	-0.003	-0.005	-0.002	-0.185	-0.338	0.121	0.271	-0.060	-0.110
21.H	-0.001	0.005	0.000	-0.019	0.244	0.062	-0.226	0.153	0.095

	679.524			743.552			759.574		
1.Re	0.000	0.000	-0.001	-0.002	0.000	-0.002	0.025	0.003	0.031
2.C	-0.005	0.000	-0.005	0.012	0.001	0.011	-0.300	-0.039	-0.374
3.O	0.002	-0.001	-0.001	0.001	0.000	0.001	-0.010	0.011	-0.015
4.O	0.002	0.001	-0.002	0.002	0.000	0.001	-0.010	-0.014	-0.012
5.O	0.000	0.000	0.002	0.000	0.000	0.002	-0.002	0.000	-0.001
6.H	-0.026	-0.002	0.006	-0.004	0.006	0.032	-0.405	-0.109	-0.448
7.H	-0.019	0.002	0.003	-0.009	0.001	0.035	-0.409	0.014	-0.458
8.C	0.001	0.000	0.000	0.000	0.000	-0.002	-0.002	0.000	0.003
9.H	0.004	0.000	-0.002	0.004	-0.001	-0.003	0.004	-0.001	-0.001
10.H	-0.001	0.000	-0.001	-0.003	0.000	-0.004	0.002	0.002	0.005
11.N	0.060	0.003	0.126	0.064	0.002	0.109	0.008	0.001	0.004
12.C	-0.059	0.008	-0.081	-0.061	-0.002	-0.084	-0.001	-0.007	-0.008
13.C	0.076	0.021	0.114	0.006	0.012	0.013	0.002	-0.010	-0.004
14.H	-0.269	-0.028	-0.442	0.098	0.007	0.146	0.012	-0.003	0.018
15.H	-0.110	0.005	-0.142	0.320	0.024	0.505	0.053	-0.001	0.045
16.C	-0.015	-0.002	-0.063	-0.052	-0.001	-0.109	-0.015	0.000	-0.001
17.C	0.076	-0.016	0.116	0.007	-0.007	0.010	0.001	0.008	-0.003
18.C	-0.060	-0.012	-0.082	-0.058	-0.009	-0.083	-0.001	0.009	-0.008
19.H	-0.295	-0.010	-0.481	0.242	0.003	0.329	0.016	0.005	0.045
20.H	-0.112	-0.009	-0.142	0.319	0.005	0.506	0.050	0.000	0.045
21.H	-0.264	0.003	-0.440	0.099	-0.007	0.150	0.012	0.008	0.013

	853.049			891.527			929.833		
1.Re	0.000	-0.001	0.000	-0.004	0.000	0.003	0.000	-0.004	0.001
2.C	0.002	0.002	-0.003	0.141	-0.008	-0.105	0.001	0.003	0.003
3.O	0.001	0.005	0.000	0.006	-0.001	-0.005	0.003	0.013	0.003
4.O	-0.001	0.005	-0.002	0.006	-0.001	-0.004	-0.007	0.026	-0.013
5.O	0.000	0.000	0.000	0.001	0.000	0.005	0.000	0.000	-0.001
6.H	-0.022	-0.003	0.007	-0.537	0.034	0.438	0.002	-0.005	-0.011
7.H	0.003	-0.003	0.008	-0.540	0.034	0.440	0.017	-0.002	0.000
8.C	0.000	0.000	0.000	0.002	0.000	-0.001	0.000	-0.001	-0.001
9.H	0.000	0.000	0.000	0.003	0.000	0.000	-0.001	0.002	-0.001
10.H	0.000	0.000	-0.001	-0.009	-0.001	-0.009	0.001	0.001	0.000
11.N	0.000	-0.003	-0.001	-0.002	-0.001	-0.015	-0.014	-0.002	-0.017
12.C	0.044	0.005	0.069	0.001	0.004	0.001	0.061	0.011	0.077
13.C	0.037	0.004	0.057	-0.002	0.002	0.000	-0.023	-0.001	-0.032
14.H	-0.252	-0.026	-0.397	0.001	0.005	0.003	-0.318	-0.033	-0.532
15.H	-0.294	-0.016	-0.434	-0.006	-0.001	0.005	0.130	0.009	0.194
16.C	-0.002	-0.003	-0.002	-0.001	0.000	0.000	-0.052	-0.002	-0.049
17.C	-0.038	0.001	-0.058	-0.001	-0.002	0.003	-0.012	0.001	-0.020
18.C	-0.041	0.001	-0.065	0.002	-0.003	0.005	0.055	-0.004	0.071
19.H	0.005	-0.007	0.010	0.001	-0.003	0.004	0.214	0.005	0.350

20.H	0.294	0.004	0.443	-0.015	0.000	-0.014	0.087	-0.003	0.118
21.H	0.237	-0.006	0.376	-0.011	-0.005	-0.011	-0.307	0.003	-0.499

	933.642			956.118			959.019		
1.Re	0.001	-0.092	0.008	0.000	-0.004	0.000	0.026	0.002	0.042
2.C	-0.001	0.068	-0.009	0.000	0.002	0.000	0.026	0.005	0.033
3.O	0.112	0.544	0.129	0.006	0.027	0.007	-0.160	-0.625	-0.194
4.O	-0.119	0.488	-0.217	-0.003	0.014	-0.006	-0.179	0.596	-0.314
5.O	0.000	0.007	-0.001	0.000	0.000	0.000	0.002	-0.003	-0.020
6.H	-0.155	-0.069	-0.122	0.003	0.000	-0.005	0.028	-0.016	0.018
7.H	0.141	-0.043	0.142	-0.002	0.001	0.003	0.029	0.019	0.022
8.C	0.000	-0.010	0.001	0.000	0.001	0.000	0.013	0.001	0.001
9.H	-0.001	0.023	-0.003	0.000	-0.002	0.000	-0.001	0.002	0.006
10.H	0.000	-0.012	0.001	-0.001	-0.005	0.000	0.039	0.005	0.019
11.N	0.005	-0.006	0.006	-0.004	0.003	0.001	0.035	-0.002	-0.020
12.C	-0.004	0.002	-0.008	-0.052	-0.005	-0.077	-0.010	0.032	-0.026
13.C	-0.030	0.011	-0.009	0.055	-0.003	0.077	-0.010	0.028	0.022
14.H	0.134	-0.043	0.062	0.252	0.028	0.405	0.103	0.035	0.123
15.H	0.027	0.005	0.119	-0.260	-0.021	-0.394	-0.066	0.021	-0.031
16.C	0.021	-0.008	0.017	-0.003	0.002	-0.007	-0.010	0.001	0.019
17.C	0.044	0.009	0.029	-0.051	0.002	-0.077	-0.022	-0.025	0.007
18.C	-0.041	0.010	-0.048	0.056	-0.001	0.086	0.002	-0.034	-0.005
19.H	-0.077	-0.074	-0.125	0.025	0.006	0.034	-0.049	0.000	-0.035
20.H	-0.110	-0.003	-0.239	0.250	0.009	0.388	-0.015	-0.018	0.052
21.H	0.099	-0.046	0.347	-0.291	0.004	-0.459	0.040	-0.027	0.020

	973.256			1016.359			1036.280		
1.Re	0.000	0.000	0.000	0.003	0.000	0.001	-0.003	0.000	0.002
2.C	-0.002	0.000	-0.001	0.012	0.000	-0.002	-0.008	0.000	0.000
3.O	0.000	-0.001	0.000	-0.003	-0.029	-0.011	-0.001	0.004	0.002
4.O	0.000	-0.001	0.000	-0.003	0.026	-0.016	-0.001	-0.003	0.003
5.O	0.000	0.000	0.000	0.001	-0.001	-0.005	-0.001	0.000	-0.001
6.H	0.006	0.000	-0.006	-0.016	0.000	0.021	-0.002	-0.008	-0.018
7.H	0.006	-0.002	-0.005	-0.014	0.003	0.021	0.000	0.004	-0.020
8.C	0.000	-0.001	-0.001	0.005	0.000	0.001	-0.001	0.000	-0.002
9.H	-0.001	0.002	0.000	0.010	0.000	-0.003	-0.008	-0.003	0.002
10.H	0.000	0.002	0.000	-0.008	-0.002	-0.007	0.014	-0.001	0.007
11.N	-0.003	0.000	-0.013	-0.213	0.018	0.131	0.265	-0.003	-0.190
12.C	-0.006	0.000	-0.007	-0.117	-0.213	0.103	-0.120	-0.261	0.107
13.C	0.042	0.004	0.066	0.088	-0.253	-0.056	-0.100	0.247	0.054
14.H	0.051	0.011	0.095	-0.278	-0.151	0.100	-0.284	-0.175	0.125
15.H	-0.249	-0.012	-0.370	0.033	-0.323	0.005	0.027	0.325	-0.021
16.C	-0.072	-0.001	-0.107	0.258	-0.014	-0.187	0.207	-0.002	-0.141
17.C	0.046	-0.001	0.071	0.100	0.237	-0.067	-0.117	-0.242	0.069
18.C	-0.007	-0.002	-0.012	-0.117	0.220	0.082	-0.099	0.251	0.087
19.H	0.399	0.016	0.597	0.315	-0.008	-0.158	0.223	0.013	-0.128
20.H	-0.266	-0.002	-0.392	0.018	0.321	-0.035	-0.019	-0.305	0.049
21.H	0.071	-0.005	0.115	-0.243	0.172	0.122	-0.259	0.188	0.075

	1067.882			1084.300			1167.038		
1.Re	0.001	0.000	0.000	0.000	-0.003	0.000	0.000	0.000	0.000
2.C	0.007	0.000	0.000	0.000	0.001	0.000	0.000	0.000	0.000
3.O	0.001	-0.005	-0.002	0.003	0.010	0.002	0.000	0.001	0.000
4.O	0.000	0.006	-0.004	-0.003	0.009	-0.003	0.000	0.001	0.000
5.O	0.001	0.000	-0.002	0.000	0.001	0.000	0.000	-0.001	0.000
6.H	-0.007	0.001	0.012	-0.005	-0.002	0.000	0.000	0.000	0.000
7.H	-0.007	0.001	0.013	-0.002	0.000	0.004	-0.001	0.000	0.001
8.C	0.002	0.000	0.003	0.000	0.001	0.001	0.000	0.006	-0.001
9.H	0.009	0.000	-0.002	0.002	-0.002	0.000	0.001	-0.023	0.003
10.H	-0.011	-0.002	-0.006	0.000	-0.008	0.001	0.002	-0.024	0.003
11.N	-0.124	0.013	0.080	0.005	0.099	-0.006	0.000	0.024	-0.001
12.C	0.006	-0.098	-0.004	-0.079	-0.053	0.061	-0.002	0.004	0.002
13.C	0.046	0.073	-0.031	0.039	-0.082	-0.026	0.028	0.013	-0.019
14.H	0.178	-0.239	-0.078	-0.355	0.156	0.196	-0.088	0.075	0.052
15.H	0.434	0.306	-0.308	0.242	0.021	-0.151	0.383	0.220	-0.260
16.C	-0.078	0.009	0.053	0.003	0.101	-0.003	-0.002	-0.059	0.002
17.C	0.038	-0.084	-0.024	-0.046	-0.064	0.032	-0.027	0.016	0.018
18.C	0.018	0.086	-0.015	0.081	-0.080	-0.057	0.004	0.002	-0.002
19.H	-0.079	0.031	0.068	0.013	0.605	-0.027	-0.017	-0.651	0.025
20.H	0.395	-0.338	-0.257	-0.274	0.084	0.183	-0.378	0.261	0.244
21.H	0.217	0.228	-0.118	0.357	0.099	-0.211	0.095	0.068	-0.062

	1172.125			1208.231			1214.920		
1.Re	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.001	0.000	0.000
2.C	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	-0.001	0.000	0.001
3.O	0.000	0.001	0.001	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000
4.O	0.000	0.001	-0.001	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.001
5.O	0.002	-0.038	0.006	0.001	0.011	0.084	0.000	-0.001	-0.008
6.H	0.002	-0.001	-0.003	-0.004	-0.003	-0.003	-0.002	-0.003	-0.005
7.H	-0.003	0.001	0.002	-0.004	0.002	-0.004	-0.002	0.002	-0.006
8.C	-0.010	0.167	-0.023	0.003	-0.021	-0.145	-0.002	0.000	0.015
9.H	0.030	-0.697	0.089	-0.679	-0.002	0.196	0.066	0.008	-0.020
10.H	0.053	-0.680	0.088	0.628	0.080	0.243	-0.063	0.000	-0.025
11.N	0.000	-0.001	0.000	-0.002	0.000	0.002	0.013	-0.001	-0.007

12.C	0.000	0.002	0.001	-0.005	0.007	0.003	-0.043	0.070	0.029
13.C	-0.001	0.000	0.001	0.005	-0.001	-0.003	0.035	-0.002	-0.024
14.H	0.002	-0.002	-0.006	-0.039	0.034	0.022	-0.376	0.347	0.215
15.H	-0.011	-0.006	0.009	0.042	0.020	-0.027	0.330	0.166	-0.221
16.C	0.000	0.001	0.000	0.001	0.000	0.000	0.009	0.000	-0.006
17.C	0.003	0.000	-0.001	0.004	0.000	-0.003	0.034	-0.002	-0.023
18.C	-0.001	0.000	0.000	-0.005	-0.007	0.004	-0.045	-0.064	0.033
19.H	0.003	0.027	0.002	0.000	0.000	-0.002	0.010	-0.002	-0.007
20.H	0.016	-0.012	-0.016	0.039	-0.024	-0.025	0.315	-0.197	-0.203
21.H	-0.012	-0.010	0.011	-0.037	-0.029	0.023	-0.385	-0.307	0.239

	1289.392			1332.494			1343.987		
1.Re	0.000	0.000	0.000	0.001	0.000	0.001	0.000	-0.001	0.000
2.C	0.005	0.000	0.005	-0.078	-0.010	-0.099	0.000	0.000	0.000
3.O	-0.002	0.006	0.003	0.001	-0.002	0.001	0.001	0.004	0.001
4.O	0.002	0.005	-0.004	0.001	0.002	0.001	-0.001	0.003	-0.001
5.O	0.001	0.000	0.000	0.000	0.000	0.001	0.000	0.000	0.000
6.H	-0.012	-0.023	-0.021	0.347	0.463	0.396	0.001	0.001	0.000
7.H	-0.014	0.014	-0.018	0.357	-0.374	0.474	0.004	-0.003	0.003
8.C	0.001	0.000	0.000	0.000	0.000	-0.001	0.000	0.001	0.000
9.H	-0.010	-0.001	0.004	-0.004	-0.001	0.000	0.000	-0.006	0.001
10.H	-0.006	0.003	-0.004	0.003	0.000	0.001	-0.001	-0.006	0.000
11.N	-0.010	-0.433	0.018	0.001	-0.002	0.000	-0.001	-0.044	0.002
12.C	-0.217	0.217	0.128	-0.003	0.001	0.002	0.050	-0.032	-0.030
13.C	0.158	0.093	-0.109	0.001	0.001	-0.001	0.021	0.016	-0.015
14.H	-0.222	0.221	0.168	-0.004	0.001	-0.001	-0.393	0.338	0.230
15.H	-0.022	-0.012	0.032	0.005	0.003	-0.002	-0.240	-0.135	0.164
16.C	-0.002	-0.207	0.006	0.001	-0.002	0.000	0.002	0.078	-0.003
17.C	-0.155	0.106	0.104	-0.002	0.001	0.001	-0.020	0.017	0.013
18.C	0.219	0.218	-0.146	0.002	0.001	-0.001	-0.051	-0.026	0.032
19.H	0.015	0.420	-0.017	0.000	0.005	-0.002	-0.010	-0.360	0.013
20.H	0.033	-0.025	-0.029	0.004	-0.003	-0.001	0.233	-0.159	-0.152
21.H	0.242	0.227	-0.175	-0.005	-0.002	-0.001	0.408	0.303	-0.257

	1448.632			1462.429			1469.684		
1.Re	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000
2.C	0.000	0.000	0.000	0.002	0.000	0.000	-0.001	0.000	0.001
3.O	0.000	-0.001	0.000	0.000	0.001	0.000	0.000	0.002	0.001
4.O	0.000	-0.001	0.000	0.000	-0.001	0.000	0.000	-0.002	0.001
5.O	-0.001	0.000	0.000	-0.084	-0.005	0.000	0.007	0.000	0.000
6.H	0.000	-0.003	-0.003	-0.002	0.001	0.003	0.000	-0.002	-0.003
7.H	-0.002	0.002	-0.002	-0.003	-0.001	0.004	0.000	0.001	-0.003
8.C	0.000	0.000	0.000	0.004	0.000	-0.001	-0.002	0.000	0.001
9.H	0.008	0.000	-0.003	0.620	0.000	-0.300	-0.043	0.000	0.021
10.H	0.006	-0.002	0.004	0.611	0.083	0.369	-0.047	-0.007	-0.026
11.N	-0.002	0.123	-0.002	0.002	-0.001	-0.002	0.070	0.002	-0.047
12.C	-0.100	-0.048	0.068	-0.003	0.005	0.002	-0.072	0.096	0.045
13.C	0.148	0.017	-0.100	-0.003	-0.003	0.002	-0.066	-0.093	0.047
14.H	0.157	-0.291	-0.090	0.015	-0.010	-0.008	0.388	-0.280	-0.233
15.H	-0.281	-0.251	0.199	0.015	0.007	-0.011	0.321	0.121	-0.220
16.C	-0.002	0.062	0.000	0.003	-0.002	-0.002	0.076	-0.002	-0.051
17.C	-0.141	0.022	0.094	-0.003	0.005	0.001	-0.075	0.103	0.048
18.C	0.107	-0.050	-0.069	-0.003	-0.004	0.003	-0.069	-0.093	0.047
19.H	-0.017	-0.532	0.025	0.004	0.003	-0.002	0.094	-0.031	-0.059
20.H	0.231	-0.261	-0.157	0.015	-0.007	-0.010	0.340	-0.178	-0.225
21.H	-0.214	-0.302	0.134	0.019	0.012	-0.012	0.382	0.218	-0.243

	1560.665			1601.890			1684.874		
1.Re	0.000	-0.001	0.000	0.000	0.000	0.000	0.001	0.000	0.000
2.C	0.000	0.000	0.000	-0.004	0.000	0.001	0.001	0.000	0.001
3.O	0.002	0.002	0.000	-0.001	0.002	0.000	-0.003	-0.003	0.001
4.O	-0.002	0.002	0.000	-0.001	-0.001	0.000	-0.003	0.003	0.001
5.O	0.001	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.399	0.026	0.018
6.H	-0.002	-0.002	0.000	0.005	0.003	-0.001	-0.005	-0.001	0.003
7.H	-0.001	0.000	0.000	0.005	-0.003	-0.001	-0.006	0.002	0.004
8.C	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	-0.567	-0.037	-0.026
9.H	-0.006	0.000	0.003	-0.001	0.000	0.001	0.265	-0.042	-0.468
10.H	-0.006	-0.003	-0.004	-0.004	-0.001	-0.001	0.148	0.064	0.446
11.N	0.006	0.183	-0.008	0.100	-0.009	-0.066	-0.004	0.000	0.002
12.C	0.059	-0.151	-0.033	-0.227	0.079	0.150	0.000	-0.003	0.000
13.C	0.078	0.218	-0.059	0.237	0.057	-0.160	0.001	0.001	0.000
14.H	-0.216	0.072	0.131	0.223	-0.325	-0.127	-0.002	-0.003	0.000
15.H	-0.178	0.098	0.116	-0.232	-0.230	0.167	-0.004	-0.001	0.003
16.C	-0.014	-0.419	0.018	-0.124	0.015	0.082	0.000	0.000	0.000
17.C	-0.057	0.220	0.035	0.235	-0.090	-0.155	0.000	-0.001	0.000
18.C	-0.074	-0.153	0.051	-0.226	-0.051	0.152	0.000	0.003	0.000
19.H	0.011	0.612	-0.022	-0.145	-0.004	0.098	-0.001	0.000	0.000
20.H	0.166	0.092	-0.115	-0.228	0.250	0.152	-0.004	0.002	0.003
21.H	0.223	0.052	-0.142	0.226	0.296	-0.144	-0.002	0.004	-0.001

	2943.900			3012.425			3066.517		
1.Re	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000
2.C	0.000	0.000	0.000	0.040	0.005	0.050	0.000	0.000	0.000
3.O	0.000	0.000	0.000	0.000	-0.001	0.000	0.000	0.000	0.000

4.O	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000
5.O	0.002	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000
6.H	0.001	-0.001	0.001	-0.235	0.570	-0.338	0.001	0.000	0.001
7.H	0.001	0.000	0.000	-0.222	-0.632	-0.229	0.000	0.000	0.000
8.C	-0.060	-0.005	-0.015	0.000	0.000	0.000	0.013	-0.012	-0.102
9.H	0.345	0.106	0.698	0.000	0.000	0.001	0.271	0.082	0.536
10.H	0.324	-0.045	-0.522	0.000	0.000	0.000	-0.423	0.056	0.663
11.N	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000
12.C	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000
13.C	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000
14.H	0.000	-0.001	0.000	0.001	0.001	-0.001	-0.001	-0.001	0.001
15.H	0.000	0.000	0.000	-0.001	0.001	0.000	0.001	-0.001	0.000
16.C	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000
17.C	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000
18.C	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000
19.H	0.000	0.000	0.000	-0.001	0.000	0.001	0.002	0.000	-0.002
20.H	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	-0.001	0.000
21.H	0.000	0.001	0.000	0.000	-0.001	0.000	-0.001	0.002	0.001

	3115.837			3128.013			3139.677		
1.Re	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000
2.C	0.001	-0.098	0.009	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.O	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000
5.O	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000
6.H	-0.251	0.555	-0.357	-0.001	0.002	-0.001	0.001	-0.001	0.001
7.H	0.234	0.613	0.246	0.000	0.001	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	0.000	0.000	0.001	-0.001	0.000	-0.001	0.000	0.000	0.001
10.H	0.000	0.000	0.000	0.001	0.000	-0.001	-0.001	0.000	0.001
11.N	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.001	0.000
12.C	0.000	0.000	0.000	0.002	0.005	-0.002	0.006	0.013	-0.005
13.C	0.000	0.000	0.000	0.013	-0.027	-0.008	0.020	-0.047	-0.011
14.H	-0.002	-0.003	0.002	-0.030	-0.054	0.023	-0.086	-0.152	0.065
15.H	0.002	-0.004	-0.001	-0.137	0.324	0.079	-0.226	0.542	0.131
16.C	0.000	0.000	0.000	-0.059	0.003	0.040	-0.009	0.004	0.006
17.C	0.000	0.000	0.000	0.017	0.030	-0.011	-0.026	-0.055	0.017
18.C	0.000	0.000	0.000	0.003	-0.007	-0.002	-0.008	0.020	0.006
19.H	0.001	0.000	-0.001	0.681	-0.034	-0.455	0.098	-0.009	-0.065
20.H	0.001	0.003	-0.001	-0.179	-0.364	0.121	0.299	0.617	-0.202
21.H	0.002	-0.004	-0.001	-0.037	0.076	0.025	0.113	-0.230	-0.075

	3145.092			3160.796			3164.459		
1.Re	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000
2.C	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.O	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000
5.O	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000
6.H	0.001	-0.002	0.001	-0.002	0.003	-0.002	0.000	0.001	0.000
7.H	-0.001	-0.004	-0.001	0.002	0.003	0.001	0.001	0.004	0.001
8.C	0.000	0.000	0.000	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	0.001	0.000	0.002
10.H	0.001	0.000	-0.001	0.000	0.000	0.000	-0.001	0.000	0.001
11.N	0.000	0.000	0.000	0.000	0.002	0.000	-0.001	0.000	0.001
12.C	-0.011	-0.023	0.009	-0.023	-0.037	0.017	-0.033	-0.055	0.025
13.C	-0.018	0.051	0.010	0.008	-0.013	-0.005	0.013	-0.025	-0.008
14.H	0.146	0.255	-0.110	0.249	0.428	-0.187	0.358	0.614	-0.269
15.H	0.227	-0.553	-0.131	-0.063	0.148	0.036	-0.120	0.281	0.069
16.C	-0.041	0.002	0.027	-0.003	0.002	0.002	0.011	0.000	-0.008
17.C	-0.014	-0.034	0.009	-0.013	-0.021	0.009	0.010	0.018	-0.007
18.C	-0.008	0.020	0.005	0.031	-0.058	-0.021	-0.019	0.039	0.013
19.H	0.443	-0.022	-0.295	0.026	-0.003	-0.018	-0.116	0.005	0.078
20.H	0.171	0.358	-0.116	0.120	0.241	-0.081	-0.097	-0.196	0.066
21.H	0.108	-0.218	-0.072	-0.337	0.665	0.222	0.214	-0.423	-0.141

List of All Frequencies:

Intensities
==========

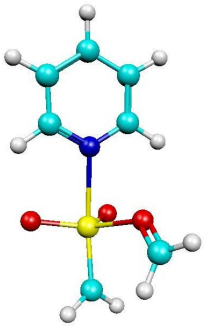
Frequency cm-1	Dipole Strength 1e-40 esu2 cm2	Absorption Intensity (degeneracy not counted) km/mole
34.383691	701.388109	6.044898
36.851450	1209.192240	11.169353
41.714367	897.370503	9.382866
117.652335	9.944871	0.293277
133.294663	30.111344	1.006053
199.431087	34.368536	1.718035
213.590147	1000.278891	53.552579
222.549197	79.065100	4.410511
231.570619	26.912210	1.562107
247.632868	134.838412	8.369509
249.966885	40.926687	2.564290

269.855535	56.451223	3.818412
274.462781	24.330539	1.673837
342.017561	591.079689	50.672521
380.753409	0.795065	0.075880
428.952823	17.222889	1.851798
436.742375	27.959111	3.060742
613.163996	4.062838	0.624431
623.904023	3.661848	0.572659
635.163611	7.152200	1.138684
645.862048	24.295195	3.933129
679.524429	298.529234	50.847547
743.552352	280.010790	52.187247
759.573542	14.389660	2.739671
853.048892	4.184760	0.894793
891.527080	310.288277	69.339064
929.833499	9.414482	2.194218
933.641786	565.085077	132.242847
956.117652	3.395134	0.813666
959.018704	108.126354	25.991821
973.255949	0.698307	0.170354
1016.358718	44.845384	11.424648
1036.280019	4.356488	1.131597
1067.881939	118.547999	31.731861
1084.300443	14.700406	3.995370
1167.038045	5.480991	1.603327
1172.124634	27.465784	8.069449
1208.231142	26.410280	7.998363
1214.920098	49.950984	15.211423
1289.391926	0.977661	0.315974
1332.494302	50.387934	16.829452
1343.986778	14.016969	4.722013
1448.631513	132.523218	48.120261
1462.428618	154.851795	56.763477
1469.684455	13.117986	4.832472
1560.665131	0.873081	0.341541
1601.890279	53.293816	21.398713
1684.874436	368.150566	155.478765
2943.899805	21.882899	16.147525
3012.424723	34.459504	26.019761
3066.517128	2.359846	1.813874
3115.837102	19.851729	15.504264
3128.013433	0.027265	0.021377
3139.677311	7.729668	6.083086
3145.091600	37.557890	29.608237
3160.795641	22.619966	17.921173
3164.459418	7.065546	5.604325

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

872.8563	4439.9812	4765.1171
0.8362	0.0205	0.5481
-0.0368	0.9991	0.0187
-0.5472	-0.0358	0.8362

IVb



CCSD=-629.66974

ATOMS cartesian

C	1.316919	-1.814548	-3.279784
N	0.660629	-0.661830	-3.040125
C	0.422787	0.173807	-4.069581
C	0.834678	-0.112261	-5.364943
C	1.513880	-1.301586	-5.610402
C	1.757167	-2.167375	-4.546742
Re	-0.335792	-0.202570	-0.875920
O	-1.168079	-1.694045	-0.970908
C	-0.706849	0.306438	0.917167
O	1.776748	-0.528164	-0.500838
C	2.457582	-0.074585	0.426869
H	3.531284	-0.318908	0.442197
O	-0.958261	1.171977	-1.690767
H	2.011532	0.551469	1.215927
H	-0.760423	1.354815	1.239676
H	-0.868380	-0.424718	1.720818
H	-0.125410	1.085396	-3.832947
H	0.615759	0.590493	-6.168617
H	1.845708	-1.555239	-6.617954
H	2.274703	-3.114966	-4.694744
H	1.477337	-2.477175	-2.429749

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)

	-74.400			36.146			51.772		
1.C	0.130	0.059	-0.011	-0.016	-0.036	-0.031	-0.129	0.001	0.043
2.N	0.141	0.049	0.039	-0.027	-0.044	-0.021	-0.054	0.054	-0.026
3.C	0.078	0.029	0.043	0.048	-0.001	-0.006	0.027	0.042	-0.060
4.C	-0.097	-0.035	-0.001	0.159	0.072	0.015	0.109	-0.019	-0.027
5.C	-0.133	-0.031	-0.066	0.163	0.073	0.010	0.072	-0.067	0.060
6.C	0.015	0.038	-0.049	0.060	0.013	-0.018	-0.089	-0.093	0.079
7.Re	-0.003	-0.021	0.007	-0.031	0.004	0.021	-0.002	-0.004	0.009
8.O	-0.110	0.044	-0.049	-0.029	-0.005	0.153	0.004	0.002	-0.177
9.C	-0.069	0.057	-0.028	0.096	0.110	0.012	-0.051	-0.228	0.064
10.O	-0.063	-0.162	0.135	-0.042	-0.147	-0.072	-0.004	0.050	-0.029
11.C	0.019	0.187	-0.094	0.135	0.008	-0.279	0.074	0.190	-0.155
12.H	0.002	0.123	-0.039	0.098	-0.158	-0.335	0.079	0.207	-0.221
13.O	0.132	0.028	-0.017	-0.093	-0.063	-0.040	0.055	0.096	0.134
14.H	0.112	0.574	-0.348	0.328	0.297	-0.401	0.144	0.292	-0.197
15.H	-0.022	0.081	-0.091	0.102	0.128	-0.049	-0.051	-0.274	0.211
16.H	-0.147	0.117	0.009	0.168	0.150	0.063	-0.059	-0.337	-0.036
17.H	0.214	0.104	0.095	-0.011	-0.035	-0.020	0.055	0.072	-0.110
18.H	-0.190	-0.034	0.023	0.220	0.107	0.029	0.229	-0.027	-0.066
19.H	-0.246	-0.043	-0.097	0.235	0.110	0.024	0.140	-0.096	0.088
20.H	0.059	0.070	-0.062	0.033	0.000	-0.036	-0.183	-0.156	0.130
21.H	0.223	0.071	-0.021	-0.088	-0.089	-0.058	-0.229	0.012	0.073

	93.869			126.648			130.492		
1.C	-0.123	0.088	-0.026	0.053	0.042	-0.021	-0.170	-0.096	-0.110
2.N	0.043	0.176	-0.058	0.052	0.038	-0.030	-0.182	-0.131	-0.053
3.C	0.149	0.165	-0.098	0.091	0.034	-0.043	-0.097	-0.044	-0.004
4.C	0.136	0.042	-0.086	0.067	-0.012	-0.046	0.051	0.091	0.020
5.C	-0.050	-0.076	-0.056	0.018	-0.039	-0.046	0.099	0.125	-0.024
6.C	-0.217	-0.078	-0.023	0.029	-0.002	-0.021	-0.046	0.010	-0.096
7.Re	0.007	-0.019	0.005	-0.025	-0.040	0.010	0.030	-0.028	0.015
8.O	0.108	-0.081	0.090	-0.276	0.101	0.066	-0.060	0.014	0.079
9.C	0.016	0.104	-0.027	0.259	0.039	0.040	-0.161	0.123	-0.060
10.O	0.000	-0.016	0.107	0.077	0.178	-0.137	-0.012	0.086	0.064
11.C	-0.052	0.060	0.110	-0.080	0.077	0.029	-0.058	0.172	0.058
12.H	-0.053	0.063	0.201	-0.008	0.387	-0.016	-0.038	0.261	0.067

13.O	-0.111	-0.105	-0.046	0.076	0.029	0.052	0.225	0.007	-0.084
14.H	-0.096	0.142	0.023	-0.291	-0.300	0.211	-0.124	0.148	0.038
15.H	-0.074	0.143	-0.162	0.472	0.061	0.008	-0.153	0.145	-0.134
16.H	0.113	0.195	0.074	0.228	0.088	0.077	-0.341	0.187	-0.037
17.H	0.256	0.244	-0.149	0.167	0.084	-0.046	-0.129	-0.072	0.030
18.H	0.298	0.077	-0.100	0.092	-0.006	-0.049	0.116	0.158	0.061
19.H	-0.081	-0.146	-0.049	-0.009	-0.068	-0.047	0.208	0.225	-0.015
20.H	-0.384	-0.176	0.028	0.023	-0.008	0.004	-0.081	-0.004	-0.149
21.H	-0.187	0.108	0.000	0.072	0.054	-0.015	-0.284	-0.214	-0.178

	151.326			188.373			239.563		
1.C	-0.103	0.005	0.182	-0.023	-0.021	-0.053	-0.001	0.046	0.041
2.N	-0.064	0.023	0.203	-0.084	-0.046	-0.074	-0.026	0.041	0.001
3.C	-0.038	0.068	0.244	-0.109	-0.059	-0.089	0.001	0.025	-0.011
4.C	-0.011	0.106	0.256	-0.025	-0.028	-0.068	-0.012	-0.027	-0.004
5.C	-0.068	0.088	0.220	0.088	0.020	-0.028	-0.001	-0.023	0.022
6.C	-0.130	0.016	0.177	0.066	0.004	-0.031	0.045	0.036	0.062
7.Re	0.021	-0.028	-0.084	0.007	0.016	-0.014	0.011	0.000	0.005
8.O	-0.057	0.006	0.026	-0.027	0.034	0.008	0.196	-0.121	0.088
9.C	0.163	0.033	-0.063	0.231	-0.088	0.058	0.058	0.037	0.012
10.O	0.054	-0.042	0.009	-0.030	-0.152	0.199	-0.218	-0.120	-0.191
11.C	-0.015	0.112	-0.017	-0.103	0.100	0.131	-0.368	-0.002	-0.133
12.H	-0.009	0.144	0.092	-0.129	0.002	0.360	-0.314	0.256	-0.100
13.O	-0.039	-0.020	-0.035	-0.077	0.026	0.075	0.168	0.115	0.060
14.H	-0.087	0.212	-0.137	-0.149	0.405	-0.137	-0.581	-0.155	-0.135
15.H	0.269	0.040	-0.067	0.283	-0.115	0.149	0.021	0.051	-0.039
16.H	0.269	0.059	-0.017	0.396	-0.161	0.026	0.131	0.071	0.058
17.H	-0.080	0.036	0.256	-0.155	-0.084	-0.097	0.048	0.060	-0.020
18.H	0.035	0.147	0.280	-0.043	-0.058	-0.090	-0.028	-0.050	-0.020
19.H	-0.070	0.124	0.211	0.178	0.053	-0.008	-0.004	-0.043	0.027
20.H	-0.173	0.004	0.137	0.117	0.026	-0.013	0.072	0.043	0.101
21.H	-0.153	-0.032	0.162	-0.033	-0.014	-0.046	-0.017	0.065	0.059

	256.700			290.203			300.247		
1.C	0.028	-0.185	-0.098	-0.039	0.044	0.026	0.017	0.016	0.002
2.N	0.140	-0.168	0.062	-0.044	0.046	-0.015	-0.007	0.008	-0.003
3.C	0.160	-0.063	0.151	-0.103	0.007	-0.030	0.015	0.016	-0.005
4.C	0.050	0.058	0.091	-0.050	-0.013	-0.009	-0.002	0.003	-0.010
5.C	-0.061	0.041	-0.063	0.056	0.027	0.053	-0.023	-0.010	-0.006
6.C	-0.097	-0.067	-0.170	0.007	-0.005	0.050	0.017	0.008	0.003
7.Re	-0.022	0.027	0.012	-0.021	-0.014	0.036	-0.058	-0.012	-0.034
8.O	0.120	-0.044	-0.088	0.092	-0.049	-0.388	0.151	-0.159	0.182
9.C	0.119	-0.094	0.059	0.203	0.217	0.009	0.095	-0.017	-0.004
10.O	-0.056	0.087	-0.009	-0.045	0.029	0.038	-0.013	0.144	0.127
11.C	-0.085	0.098	0.006	0.048	-0.041	0.004	0.190	-0.047	0.064
12.H	-0.082	0.112	0.019	0.039	-0.087	-0.103	0.084	-0.520	0.068
13.O	-0.020	-0.030	-0.079	0.101	-0.072	-0.138	0.238	0.187	0.047
14.H	-0.114	0.084	-0.002	0.140	-0.060	0.073	0.504	0.247	0.011
15.H	0.158	-0.127	0.169	0.319	0.298	-0.224	0.284	-0.014	0.017
16.H	0.223	-0.190	-0.006	0.293	0.419	0.211	0.195	-0.019	0.012
17.H	0.186	-0.077	0.232	-0.113	0.005	-0.037	0.014	0.016	-0.009
18.H	0.059	0.167	0.187	-0.063	-0.055	-0.044	0.001	-0.004	-0.018
19.H	-0.165	0.078	-0.108	0.158	0.073	0.075	-0.046	-0.031	-0.008
20.H	-0.201	-0.100	-0.319	0.047	0.015	0.078	0.067	0.037	0.016
21.H	0.008	-0.324	-0.201	-0.058	0.071	0.051	0.029	0.033	0.013

	319.023			341.392			360.116		
1.C	-0.100	-0.086	-0.058	-0.183	-0.033	-0.015	0.012	0.003	0.005
2.N	-0.032	-0.071	0.020	-0.078	0.019	0.009	-0.001	-0.004	-0.002
3.C	0.132	0.003	0.058	0.160	0.084	0.023	0.001	-0.001	0.002
4.C	-0.041	-0.073	0.013	-0.097	-0.095	-0.026	0.013	0.007	0.004
5.C	0.013	-0.006	-0.041	-0.023	-0.021	-0.019	-0.012	-0.007	0.000
6.C	0.087	0.055	-0.028	0.138	0.139	0.065	-0.002	-0.001	0.002
7.Re	-0.001	-0.010	-0.011	0.003	0.005	0.005	0.023	-0.010	0.002
8.O	0.041	-0.036	-0.083	-0.012	0.015	0.026	-0.052	0.033	-0.021
9.C	-0.029	0.175	-0.064	0.026	-0.094	0.041	0.001	0.016	-0.007
10.O	0.053	0.002	0.003	-0.006	0.019	-0.005	-0.135	0.133	-0.036
11.C	0.025	0.019	0.015	0.005	-0.008	0.000	-0.057	-0.040	-0.015
12.H	0.046	0.107	0.000	-0.019	-0.109	0.046	-0.214	-0.708	0.268
13.O	-0.125	0.109	0.285	0.027	-0.078	-0.154	-0.047	-0.018	0.041
14.H	-0.018	-0.040	0.038	0.042	0.076	-0.045	0.173	0.458	-0.281
15.H	-0.103	0.259	-0.342	0.044	-0.131	0.168	0.015	0.027	-0.039
16.H	0.036	0.378	0.129	0.009	-0.177	-0.037	-0.041	0.049	0.013
17.H	0.397	0.154	0.113	0.444	0.256	0.028	-0.015	-0.010	0.002
18.H	-0.120	-0.062	0.044	-0.218	-0.141	-0.033	0.023	0.012	0.006
19.H	-0.001	0.021	-0.051	-0.041	-0.054	-0.013	-0.030	-0.018	-0.003
20.H	0.157	0.091	-0.019	0.302	0.216	0.148	-0.011	-0.006	-0.001
21.H	-0.279	-0.232	-0.138	-0.436	-0.155	-0.064	0.021	0.009	0.008

	383.865			402.953			573.334		
1.C	-0.086	-0.055	-0.037	-0.004	-0.004	0.000	0.001	0.005	-0.008
2.N	0.251	0.129	0.035	0.003	0.001	-0.001	-0.006	0.001	-0.008
3.C	-0.040	0.011	0.006	0.009	0.006	0.002	-0.002	0.013	0.003
4.C	-0.211	-0.099	-0.028	-0.006	-0.001	-0.001	-0.003	-0.005	0.005

5.C	0.221	0.120	0.064	-0.004	0.000	0.002	0.001	-0.004	0.004
6.C	-0.080	-0.096	-0.033	0.005	0.001	0.002	0.005	-0.012	-0.003
7.Re	-0.001	-0.002	-0.003	0.020	-0.004	-0.012	0.000	-0.002	0.001
8.O	-0.018	0.003	0.056	-0.035	0.022	0.026	0.036	0.005	0.001
9.C	-0.011	-0.008	-0.014	0.022	-0.009	-0.004	0.004	0.011	-0.005
10.O	-0.009	0.016	-0.020	-0.232	0.060	0.133	-0.003	-0.008	0.004
11.C	-0.012	-0.014	-0.005	0.040	-0.018	-0.037	-0.004	0.004	-0.002
12.H	-0.025	-0.068	0.022	0.125	0.319	-0.643	0.001	0.025	-0.009
13.O	0.008	0.009	0.007	-0.043	-0.013	0.019	-0.037	0.014	-0.001
14.H	0.004	0.021	-0.024	0.197	-0.430	0.387	-0.004	-0.007	0.005
15.H	0.005	-0.006	-0.020	0.037	-0.013	0.009	0.697	0.009	0.125
16.H	-0.024	-0.015	-0.025	0.089	-0.021	-0.002	-0.688	0.023	-0.136
17.H	0.026	0.042	0.047	0.013	0.007	0.006	0.017	0.022	0.017
18.H	-0.397	-0.212	-0.076	-0.011	-0.006	-0.003	0.019	-0.001	0.002
19.H	0.523	0.329	0.108	-0.007	-0.002	0.001	0.009	0.014	0.002
20.H	-0.201	-0.158	-0.079	0.014	0.007	0.001	0.017	-0.005	0.002
21.H	-0.241	-0.119	-0.057	-0.020	-0.009	-0.001	0.009	0.014	-0.002

	595.785			613.319			658.380		
1.C	0.054	-0.117	-0.071	0.030	0.120	-0.112	0.024	-0.024	0.052
2.N	0.035	-0.062	-0.275	-0.115	0.017	0.033	-0.008	-0.038	-0.016
3.C	0.009	0.258	-0.018	-0.055	0.077	0.093	0.036	-0.030	-0.028
4.C	-0.111	0.129	0.024	-0.023	-0.138	0.141	-0.030	0.027	-0.062
5.C	-0.140	0.021	0.305	0.062	-0.066	-0.048	-0.011	0.039	0.025
6.C	0.160	-0.270	0.013	-0.007	-0.123	-0.107	-0.051	0.015	0.027
7.Re	-0.002	0.000	0.004	0.001	0.005	-0.002	0.001	0.005	-0.002
8.O	-0.004	0.003	0.011	0.005	0.009	0.009	0.003	0.015	0.016
9.C	-0.004	0.017	-0.023	-0.013	-0.051	0.031	-0.012	-0.136	0.039
10.O	0.007	-0.001	-0.003	-0.004	0.006	-0.008	0.000	-0.002	0.000
11.C	-0.008	0.017	0.003	0.002	-0.017	0.000	-0.001	0.002	-0.001
12.H	-0.004	0.025	0.017	0.005	-0.003	-0.008	0.001	0.009	-0.002
13.O	-0.003	-0.008	0.008	-0.005	-0.002	-0.021	-0.001	0.001	-0.020
14.H	-0.017	0.019	-0.006	0.019	0.006	-0.005	-0.002	-0.001	0.001
15.H	-0.137	0.004	-0.017	-0.033	0.001	-0.118	0.149	0.091	-0.642
16.H	0.078	-0.036	-0.055	0.078	0.083	0.166	-0.100	0.418	0.512
17.H	-0.004	0.188	0.178	0.350	0.329	0.093	0.142	0.018	0.030
18.H	0.196	-0.017	-0.182	0.293	0.043	0.211	0.032	0.069	-0.042
19.H	-0.190	0.148	0.255	0.285	0.304	-0.067	0.118	0.024	0.072
20.H	0.487	-0.048	-0.206	0.212	-0.031	0.079	0.046	0.080	-0.027
21.H	-0.081	0.027	0.070	0.346	0.280	-0.052	0.084	0.000	0.060

	664.183			739.587			755.678		
1.C	0.048	-0.014	0.082	-0.130	-0.049	-0.037	-0.058	-0.039	-0.016
2.N	-0.051	-0.065	-0.014	0.132	0.069	0.037	0.091	0.032	0.010
3.C	0.080	-0.043	-0.030	-0.114	-0.087	-0.026	-0.065	-0.048	-0.023
4.C	-0.078	0.002	-0.101	0.057	0.020	0.011	0.026	0.022	-0.008
5.C	-0.002	0.060	0.017	-0.117	-0.054	-0.013	-0.065	-0.021	0.004
6.C	-0.129	0.012	0.029	0.027	0.028	0.005	0.019	0.010	0.001
7.Re	0.001	-0.003	0.001	-0.001	0.003	0.010	0.004	-0.008	-0.029
8.O	0.001	-0.008	-0.006	-0.002	-0.002	0.002	0.004	0.005	0.000
9.C	0.006	0.071	-0.023	0.032	-0.043	-0.139	-0.108	0.118	0.393
10.O	-0.001	0.002	-0.002	-0.001	0.002	-0.001	0.005	0.001	-0.003
11.C	0.001	-0.002	0.000	-0.003	0.004	-0.002	0.001	0.002	-0.001
12.H	0.001	-0.002	0.001	-0.003	0.001	-0.004	0.000	-0.003	0.008
13.O	-0.002	-0.004	0.009	0.000	0.001	0.006	0.000	-0.005	0.003
14.H	0.004	0.007	-0.005	-0.001	-0.004	0.004	-0.013	0.001	-0.008
15.H	-0.075	-0.047	0.332	0.009	-0.028	-0.214	0.064	0.095	0.546
16.H	0.046	-0.219	-0.273	-0.005	-0.049	-0.159	0.044	0.162	0.484
17.H	0.408	0.129	0.074	0.062	0.010	0.003	0.049	0.009	0.023
18.H	0.183	0.176	-0.021	0.482	0.241	0.091	0.266	0.133	0.024
19.H	0.405	0.149	0.130	0.275	0.128	0.072	0.136	0.056	0.051
20.H	0.196	0.200	0.008	0.556	0.307	0.105	0.275	0.148	0.024
21.H	0.345	0.124	0.133	0.031	0.004	-0.025	-0.034	-0.039	-0.020

	850.224			864.852			919.610		
1.C	0.057	0.016	0.023	0.052	0.013	0.020	0.094	0.049	0.035
2.N	0.013	-0.001	-0.028	-0.004	0.002	0.006	-0.029	-0.004	0.037
3.C	-0.069	-0.036	-0.014	-0.040	-0.015	-0.012	0.064	0.053	0.019
4.C	-0.039	-0.027	0.001	-0.034	-0.007	-0.025	-0.039	0.005	-0.019
5.C	-0.011	0.004	0.007	-0.005	0.003	-0.002	-0.045	-0.051	-0.055
6.C	0.051	0.037	0.023	0.040	0.005	0.008	-0.022	-0.038	-0.020
7.Re	-0.003	0.000	-0.003	0.003	0.001	0.005	0.000	0.002	0.000
8.O	0.005	0.001	0.003	-0.007	-0.004	0.000	-0.007	-0.010	-0.003
9.C	0.090	0.000	0.028	-0.128	-0.004	-0.062	0.014	-0.001	0.007
10.O	-0.003	0.002	0.006	0.004	-0.001	-0.007	0.001	-0.002	0.001
11.C	0.006	-0.005	0.003	-0.003	-0.006	0.000	-0.002	0.002	0.000
12.H	0.007	0.003	-0.015	0.000	0.012	0.014	-0.004	-0.009	-0.001
13.O	0.001	0.001	-0.004	-0.005	0.001	-0.007	0.004	-0.004	0.005
14.H	0.010	0.010	-0.002	-0.002	0.006	-0.010	-0.002	-0.008	0.006
15.H	-0.375	-0.001	-0.042	0.561	-0.014	0.091	-0.059	0.002	-0.018
16.H	-0.363	0.000	-0.064	0.570	-0.030	0.055	-0.074	0.008	-0.003
17.H	0.332	0.186	0.082	0.183	0.107	0.038	-0.442	-0.225	-0.086
18.H	0.379	0.226	0.108	0.267	0.165	0.041	0.118	0.088	0.008
19.H	-0.045	0.029	-0.009	-0.037	-0.001	-0.012	0.442	0.187	0.041
20.H	-0.408	-0.193	-0.093	-0.228	-0.127	-0.066	0.204	0.065	0.072
21.H	-0.318	-0.139	-0.028	-0.280	-0.138	-0.035	-0.544	-0.300	-0.111

	946.933			952.401			967.256		
1.C	-0.056	-0.028	-0.020	0.084	0.041	0.026	0.020	0.018	-0.028
2.N	-0.001	-0.004	0.013	-0.005	0.013	-0.015	0.035	-0.036	-0.158
3.C	0.044	0.029	0.009	-0.076	-0.058	-0.022	0.000	-0.013	-0.006
4.C	-0.066	-0.018	-0.003	0.092	0.010	0.030	0.092	-0.055	0.123
5.C	0.004	-0.006	-0.002	0.016	0.037	0.019	-0.114	-0.050	0.031
6.C	0.058	0.025	0.007	-0.090	-0.047	-0.023	-0.031	0.137	0.035
7.Re	0.000	0.066	-0.021	0.000	0.008	-0.002	-0.002	0.001	0.000
8.O	-0.182	-0.338	-0.016	-0.018	-0.037	0.002	0.011	0.017	0.003
9.C	-0.006	-0.012	0.006	0.003	-0.004	-0.003	-0.020	-0.003	-0.007
10.O	-0.001	-0.004	0.005	0.000	0.003	-0.003	0.001	0.001	0.001
11.C	0.000	0.008	-0.007	-0.002	-0.010	0.004	0.004	-0.003	0.003
12.H	-0.006	-0.015	0.015	0.008	0.031	-0.013	0.005	0.009	0.003
13.O	0.189	-0.427	0.253	0.019	-0.052	0.027	0.010	-0.021	0.014
14.H	-0.015	-0.022	0.008	0.013	0.028	-0.015	0.000	0.005	-0.005
15.H	0.279	0.016	-0.039	0.013	-0.007	0.019	0.092	-0.003	0.016
16.H	-0.259	0.061	0.018	-0.041	-0.011	-0.021	0.095	-0.010	0.008
17.H	-0.186	-0.087	-0.102	0.408	0.228	0.002	0.051	0.013	0.014
18.H	0.275	0.153	0.054	-0.376	-0.214	-0.037	-0.337	-0.308	0.029
19.H	0.028	-0.007	0.005	-0.247	-0.014	-0.053	0.610	0.355	0.179
20.H	-0.271	-0.153	-0.021	0.424	0.233	0.007	-0.374	-0.025	-0.039
21.H	0.330	0.175	0.064	-0.453	-0.186	-0.052	-0.009	0.041	-0.013

	984.246			999.777			1051.623		
1.C	-0.002	0.020	0.009	-0.012	-0.015	0.008	0.041	0.019	-0.107
2.N	0.007	-0.008	-0.010	-0.061	0.033	0.166	-0.055	0.046	0.126
3.C	0.015	0.008	0.016	-0.031	-0.026	-0.012	0.057	-0.038	-0.081
4.C	-0.049	-0.025	0.003	0.058	0.146	-0.109	0.019	-0.106	-0.001
5.C	0.058	0.016	-0.016	-0.100	-0.038	-0.012	-0.051	0.049	0.213
6.C	-0.034	0.002	0.007	0.143	-0.114	-0.022	-0.026	0.066	-0.068
7.Re	-0.045	-0.017	-0.024	-0.003	0.000	-0.002	0.000	-0.001	0.000
8.O	0.346	0.589	0.053	0.021	0.030	0.004	0.004	0.009	-0.002
9.C	-0.015	0.001	-0.038	0.009	0.000	-0.002	0.004	0.000	0.000
10.O	-0.007	0.004	0.006	-0.001	0.005	-0.002	-0.001	-0.002	0.001
11.C	-0.002	-0.002	-0.008	-0.003	-0.004	0.002	-0.002	-0.003	-0.001
12.H	-0.005	-0.022	0.000	0.004	0.024	-0.015	-0.003	-0.010	-0.001
13.O	0.202	-0.388	0.253	0.012	-0.030	0.013	0.002	0.002	0.000
14.H	-0.006	-0.011	-0.002	0.006	0.025	-0.015	0.002	-0.006	0.003
15.H	0.043	-0.008	-0.041	-0.043	-0.004	0.007	-0.014	-0.003	0.009
16.H	0.111	-0.043	-0.067	-0.042	-0.005	-0.021	-0.021	0.001	-0.004
17.H	-0.140	-0.082	0.001	0.325	0.186	-0.009	-0.082	-0.032	-0.430
18.H	0.226	0.146	0.077	-0.477	-0.121	-0.209	0.340	-0.301	-0.244
19.H	-0.236	-0.168	-0.068	0.422	0.274	0.074	-0.107	0.032	0.221
20.H	0.133	0.076	0.111	-0.233	-0.299	-0.190	-0.048	0.131	-0.454
21.H	-0.093	-0.028	-0.010	0.095	0.032	0.029	0.097	-0.200	-0.295

	1070.636			1090.242			1167.121		
1.C	0.052	-0.173	0.108	0.030	0.072	-0.168	0.000	-0.006	0.006
2.N	0.008	-0.023	0.046	0.021	-0.059	0.026	0.006	-0.014	0.007
3.C	-0.156	0.233	0.043	-0.041	0.007	0.073	0.008	-0.010	-0.004
4.C	0.052	-0.046	-0.036	-0.008	0.064	-0.087	0.016	-0.018	-0.021
5.C	0.034	-0.045	-0.089	0.020	-0.050	0.066	-0.026	0.052	-0.020
6.C	-0.042	0.092	-0.022	-0.043	0.038	0.050	0.000	-0.011	0.033
7.Re	0.000	0.000	0.000	0.000	0.001	-0.001	0.000	0.000	0.000
8.O	0.002	0.001	-0.001	-0.004	-0.007	0.001	0.000	0.000	0.000
9.C	0.003	0.001	-0.004	0.003	-0.002	-0.003	0.000	0.001	0.001
10.O	0.000	0.001	0.001	-0.001	0.000	-0.003	-0.001	-0.002	0.003
11.C	0.001	0.007	-0.004	-0.002	-0.009	0.003	0.004	0.013	-0.009
12.H	-0.006	-0.021	0.007	0.007	0.027	-0.009	-0.011	-0.051	0.036
13.O	0.004	-0.008	0.002	0.002	-0.006	0.001	0.000	0.000	0.000
14.H	-0.009	-0.021	0.011	0.019	0.027	-0.011	-0.019	-0.054	0.031
15.H	-0.014	0.002	-0.013	-0.015	-0.004	0.009	0.000	0.001	-0.003
16.H	-0.011	0.006	-0.001	-0.008	0.006	0.001	0.001	0.000	0.001
17.H	-0.038	0.289	0.172	0.075	0.000	0.378	-0.013	-0.048	0.091
18.H	0.244	-0.424	-0.427	0.013	-0.070	-0.221	0.222	-0.293	-0.316
19.H	0.144	-0.205	-0.017	0.159	-0.449	0.215	-0.263	0.612	-0.239
20.H	0.004	0.161	-0.318	-0.067	-0.040	0.542	-0.047	-0.104	0.465
21.H	0.198	-0.279	0.015	0.039	-0.149	-0.357	0.051	-0.065	-0.048

	1181.334			1205.542			1214.089		
1.C	0.017	-0.009	-0.015	-0.010	0.015	0.005	0.035	-0.075	-0.006
2.N	-0.005	0.007	0.002	0.002	-0.003	-0.001	0.002	-0.006	0.016
3.C	-0.007	0.000	-0.001	0.005	-0.007	0.011	-0.018	0.058	-0.079
4.C	-0.001	0.006	0.005	0.002	-0.002	-0.008	-0.018	0.019	0.045
5.C	-0.001	-0.002	0.003	0.001	-0.001	0.002	0.002	-0.004	-0.005
6.C	-0.003	-0.003	0.001	0.002	-0.001	-0.008	-0.010	0.003	0.033
7.Re	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	-0.001	0.000
8.O	0.000	0.000	0.000	0.000	-0.001	0.000	0.002	0.002	-0.001
9.C	-0.001	0.001	0.000	0.002	-0.001	-0.001	-0.001	0.002	0.002
10.O	-0.017	-0.021	0.029	-0.061	0.044	0.032	-0.007	0.012	0.004
11.C	0.051	0.119	-0.101	0.106	-0.087	-0.043	0.011	-0.028	0.004
12.H	-0.094	-0.490	0.450	0.219	0.402	0.485	0.046	0.122	0.017
13.O	0.000	0.001	-0.001	0.000	0.001	0.000	-0.001	0.003	-0.001

14.H	-0.247	-0.581	0.285	-0.534	-0.037	-0.457	-0.070	0.063	-0.118
15.H	0.001	0.003	-0.007	-0.001	-0.001	-0.002	0.006	0.005	-0.012
16.H	0.004	-0.006	-0.005	-0.005	-0.001	-0.002	-0.002	-0.007	-0.006
17.H	0.063	0.061	-0.088	-0.026	-0.048	0.100	0.041	0.210	-0.532
18.H	-0.069	0.054	0.066	0.040	-0.044	-0.056	-0.182	0.235	0.278
19.H	0.043	-0.081	0.037	-0.006	0.006	-0.002	-0.006	0.039	-0.020
20.H	0.000	-0.008	0.036	0.013	0.015	-0.076	-0.028	-0.067	0.406
21.H	-0.011	-0.017	-0.018	-0.040	0.055	0.040	0.263	-0.364	-0.263

	1298.487			1341.638			1346.301		
1.C	-0.149	0.248	0.137	0.005	-0.003	-0.008	0.028	-0.047	-0.032
2.N	0.169	-0.373	0.138	0.003	-0.012	0.005	0.008	-0.012	0.000
3.C	-0.024	0.106	-0.263	-0.002	-0.005	0.016	0.000	-0.024	0.067
4.C	-0.105	0.146	0.127	-0.006	0.006	0.008	-0.017	0.015	0.032
5.C	0.087	-0.179	0.083	-0.006	0.016	-0.008	-0.036	0.086	-0.043
6.C	0.004	0.082	-0.206	0.002	0.001	-0.010	0.009	-0.008	-0.024
7.Re	0.000	0.000	0.000	0.001	-0.001	-0.001	0.000	-0.001	0.001
8.O	0.000	-0.001	0.000	-0.001	-0.001	-0.001	0.001	0.003	0.000
9.C	0.005	-0.005	-0.017	-0.022	0.032	0.110	0.006	-0.007	-0.031
10.O	-0.001	-0.006	-0.003	0.000	0.000	-0.002	0.000	0.002	0.001
11.C	0.000	0.009	-0.010	0.000	-0.002	0.002	-0.002	-0.006	0.004
12.H	-0.017	-0.056	0.035	0.003	0.010	-0.006	0.008	0.032	-0.026
13.O	-0.004	0.004	-0.003	-0.001	0.002	-0.003	-0.001	0.004	0.000
14.H	0.032	-0.051	0.062	0.004	0.015	-0.007	-0.009	0.030	-0.031
15.H	-0.017	-0.031	0.091	0.123	0.243	-0.621	-0.034	-0.067	0.167
16.H	-0.009	0.061	0.040	0.071	-0.532	-0.409	-0.027	0.156	0.121
17.H	0.138	0.175	-0.265	0.018	0.045	-0.138	0.032	0.145	-0.527
18.H	0.091	-0.197	-0.237	0.048	-0.063	-0.067	0.170	-0.210	-0.211
19.H	-0.098	0.118	-0.047	0.033	-0.076	0.028	0.147	-0.298	0.111
20.H	-0.027	0.025	0.110	-0.012	-0.017	0.067	-0.024	-0.076	0.277
21.H	-0.233	0.310	0.211	-0.075	0.104	0.089	-0.233	0.345	0.320

	1443.989			1452.262			1473.206		
1.C	-0.014	-0.018	0.121	-0.006	0.013	-0.013	0.057	-0.104	-0.039
2.N	-0.049	0.107	-0.041	0.011	-0.018	-0.003	-0.016	0.001	0.078
3.C	0.047	-0.065	-0.088	-0.006	0.002	0.029	-0.015	0.077	-0.109
4.C	-0.051	0.049	0.138	0.002	0.001	-0.017	0.067	-0.102	-0.049
5.C	-0.018	0.037	-0.013	0.004	-0.003	-0.010	-0.036	0.039	0.069
6.C	0.042	-0.017	-0.157	-0.004	-0.005	0.041	-0.006	0.045	-0.101
7.Re	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000
8.O	0.000	-0.001	0.000	0.000	0.001	0.000	0.001	0.001	-0.001
9.C	0.000	0.000	0.001	0.002	0.000	0.001	0.002	0.001	0.000
10.O	-0.017	-0.009	-0.019	-0.055	-0.030	-0.064	-0.011	-0.005	-0.014
11.C	0.003	0.004	0.002	0.009	0.006	0.007	0.001	0.000	0.003
12.H	0.028	0.106	0.184	0.096	0.365	0.602	0.023	0.090	0.117
13.O	0.001	-0.003	0.000	0.000	0.000	0.000	0.001	-0.002	0.001
14.H	0.177	0.011	0.100	0.585	0.048	0.316	0.122	0.022	0.055
15.H	0.000	0.004	-0.010	-0.010	-0.003	0.006	-0.006	0.000	-0.006
16.H	0.002	-0.011	-0.010	-0.004	0.006	0.004	-0.004	0.003	0.002
17.H	0.107	-0.177	0.377	-0.019	0.042	-0.135	-0.083	-0.088	0.418
18.H	0.147	-0.257	-0.162	0.000	0.016	-0.008	-0.178	0.234	0.326
19.H	0.175	-0.394	0.159	-0.021	0.054	-0.036	-0.020	0.031	0.095
20.H	-0.020	-0.140	0.337	0.007	0.026	-0.105	-0.048	-0.049	0.405
21.H	0.198	-0.335	-0.139	0.005	0.002	-0.028	-0.244	0.348	0.374

	1567.350			1599.381			1642.441		
1.C	-0.102	0.189	0.048	0.098	-0.101	-0.215	-0.002	0.000	0.007
2.N	0.076	-0.162	0.044	-0.031	0.016	0.112	-0.001	0.002	-0.009
3.C	-0.028	0.096	-0.100	0.047	0.011	-0.278	-0.001	-0.002	0.012
4.C	0.112	-0.206	-0.006	-0.101	0.113	0.231	0.002	-0.001	-0.007
5.C	-0.160	0.344	-0.124	0.032	-0.002	-0.154	0.001	-0.005	0.006
6.C	0.069	-0.161	0.120	-0.051	-0.033	0.290	0.001	0.004	-0.011
7.Re	0.000	0.001	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000
8.O	-0.001	-0.003	0.000	0.001	0.000	-0.001	-0.001	-0.002	-0.001
9.C	0.000	-0.001	0.001	0.000	0.001	0.001	0.001	0.002	0.003
10.O	0.006	0.003	0.008	0.005	0.005	0.006	0.211	0.131	0.274
11.C	-0.004	-0.002	-0.009	-0.009	-0.003	-0.010	-0.309	-0.193	-0.396
12.H	-0.014	-0.041	-0.025	-0.003	0.022	0.016	-0.222	0.308	0.342
13.O	-0.001	-0.001	0.001	-0.001	-0.001	0.001	0.000	0.003	-0.002
14.H	-0.035	-0.021	-0.008	0.022	0.003	0.000	0.543	-0.125	-0.008
15.H	-0.007	0.005	-0.002	-0.001	0.002	-0.006	-0.015	0.003	-0.006
16.H	-0.001	-0.014	-0.016	-0.002	-0.005	-0.003	-0.001	-0.006	-0.003
17.H	-0.094	-0.009	0.181	0.111	-0.175	0.424	-0.003	0.004	-0.014
18.H	-0.024	-0.053	0.195	0.147	-0.261	-0.142	-0.005	0.009	0.002
19.H	0.216	-0.492	0.213	0.076	-0.084	-0.146	-0.004	0.011	0.001
20.H	0.033	-0.144	-0.136	0.036	0.114	-0.365	-0.004	-0.002	0.015
21.H	0.157	-0.225	-0.318	-0.179	0.299	0.120	0.002	0.001	0.008

	2955.695			3010.580			3085.524		
1.C	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.001	0.000
2.N	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000
3.C	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	-0.003	0.004	0.001
4.C	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	-0.001	0.000
5.C	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	-0.001

6.C	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.002	-0.003	-0.001
7.Re	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000
8.O	0.000	0.000	0.000	0.000	0.001	0.000	0.000	0.000	0.000
9.C	0.000	0.000	0.000	0.012	-0.016	-0.061	0.000	0.001	0.000
10.O	-0.002	-0.001	-0.002	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000
11.C	0.029	0.026	0.049	0.000	0.000	0.000	-0.085	0.045	0.038
12.H	-0.624	0.147	-0.002	0.002	0.000	0.000	0.744	-0.174	0.003
13.O	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.001	0.000	0.000	0.000
14.H	0.318	-0.435	-0.542	0.000	0.001	0.002	0.260	-0.360	-0.450
15.H	-0.001	0.003	0.000	-0.033	0.671	0.185	0.000	-0.008	-0.003
16.H	0.000	-0.001	0.000	-0.105	-0.490	0.509	-0.002	-0.006	0.007
17.H	0.003	-0.002	0.000	-0.002	0.002	0.000	0.029	-0.044	-0.010
18.H	0.000	0.000	-0.001	0.000	-0.001	0.002	-0.001	0.001	0.000
19.H	0.000	-0.001	0.000	0.001	0.000	-0.003	-0.002	0.001	0.004
20.H	0.002	-0.003	-0.001	0.003	-0.004	0.000	-0.025	0.044	0.006
21.H	0.000	0.001	-0.002	0.000	0.001	-0.001	0.001	-0.003	0.003

	3110.343			3122.656			3122.975		
1.C	0.000	0.000	0.002	0.006	-0.029	0.039	-0.006	0.023	-0.029
2.N	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000
3.C	-0.009	0.015	0.004	0.032	-0.052	-0.016	0.011	-0.018	-0.004
4.C	0.001	-0.003	0.001	-0.006	0.018	-0.015	-0.006	0.021	-0.024
5.C	0.001	-0.001	-0.002	-0.001	0.000	0.005	-0.014	0.010	0.045
6.C	-0.001	0.003	0.000	-0.006	0.012	0.000	0.021	-0.038	-0.006
7.Re	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000
8.O	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000
9.C	0.005	0.092	-0.024	0.001	0.013	-0.003	0.001	0.010	-0.003
10.O	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000
11.C	0.002	-0.001	-0.001	-0.004	0.002	0.002	0.001	-0.001	0.000
12.H	-0.017	0.004	0.000	0.036	-0.009	0.000	-0.013	0.002	0.000
13.O	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000
14.H	-0.005	0.008	0.009	0.013	-0.019	-0.022	-0.003	0.002	0.004
15.H	0.038	-0.662	-0.211	0.006	-0.101	-0.032	0.004	-0.074	-0.023
16.H	-0.103	-0.445	0.502	-0.013	-0.064	0.071	-0.012	-0.049	0.055
17.H	0.107	-0.168	-0.042	-0.371	0.616	0.160	-0.124	0.204	0.053
18.H	-0.008	0.022	-0.024	0.057	-0.180	0.200	0.074	-0.243	0.278
19.H	-0.009	0.007	0.027	0.018	-0.015	-0.051	0.172	-0.133	-0.526
20.H	0.017	-0.032	-0.007	0.083	-0.152	-0.021	-0.250	0.455	0.071
21.H	-0.003	0.012	-0.020	-0.081	0.338	-0.443	0.061	-0.258	0.333

	3130.938			3140.222			3152.771		
1.C	0.007	-0.029	0.039	0.002	-0.012	0.015	-0.004	0.021	-0.028
2.N	0.000	0.000	0.000	-0.001	0.001	0.000	0.001	-0.001	0.000
3.C	-0.023	0.037	0.010	0.011	-0.017	-0.008	0.009	-0.015	-0.005
4.C	0.000	0.002	-0.010	0.014	-0.045	0.054	0.006	-0.020	0.021
5.C	-0.017	0.013	0.052	-0.006	0.007	0.013	-0.014	0.010	0.042
6.C	-0.002	0.006	-0.003	0.019	-0.034	-0.007	-0.029	0.054	0.008
7.Re	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000
8.O	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000
9.C	-0.001	-0.009	0.002	0.000	0.003	-0.001	0.000	0.003	-0.001
10.O	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000
11.C	0.001	-0.001	-0.001	0.001	0.000	0.000	-0.004	0.002	0.002
12.H	-0.010	0.004	0.000	-0.009	0.001	0.000	0.034	-0.009	0.000
13.O	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000
14.H	-0.005	0.009	0.009	-0.003	0.002	0.004	0.012	-0.016	-0.019
15.H	-0.004	0.065	0.020	0.001	-0.023	-0.007	0.003	-0.022	-0.007
16.H	0.010	0.046	-0.051	-0.004	-0.018	0.020	-0.001	-0.011	0.012
17.H	0.255	-0.422	-0.111	-0.118	0.187	0.051	-0.096	0.166	0.046
18.H	0.020	-0.066	0.083	-0.163	0.523	-0.602	-0.062	0.203	-0.235
19.H	0.194	-0.146	-0.588	0.056	-0.047	-0.165	0.146	-0.111	-0.439
20.H	0.027	-0.051	-0.004	-0.213	0.389	0.065	0.331	-0.605	-0.095
21.H	-0.080	0.335	-0.435	-0.030	0.126	-0.164	0.054	-0.224	0.294

List of All Frequencies:

Intensities
==========

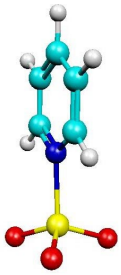
Frequency cm-1	Dipole Strength 1e-40 esu2 cm2	Absorption Intensity (degeneracy not counted) km/mole
-74.399973	308.626257	-5.755509
36.145742	1118.839930	10.136853
51.771762	65.374834	0.848363
93.868950	96.643820	2.273914
126.647941	44.303902	1.406430
130.491553	234.591777	7.673142
151.325822	515.924423	19.569386
188.373045	46.840325	2.211652
239.562557	14.541114	0.873162
256.699579	40.258732	2.590379
290.202711	71.808985	5.223461
300.246565	40.337504	3.035744
319.022988	41.296549	3.302279

341.392166	9.588640	0.820519
360.115825	127.549825	11.513309
383.864500	34.142495	3.285120
402.952631	202.332575	20.436093
573.334182	41.841995	6.013098
595.784783	72.616679	10.844358
613.319409	221.889480	34.111553
658.379997	36.219709	5.977226
664.183212	263.006488	43.785713
739.586718	130.876779	24.262177
755.678072	126.134325	23.891762
850.224012	93.678230	19.964117
864.851761	180.862188	39.207353
919.609739	5.157991	1.188946
946.933083	423.714876	100.570607
952.401176	40.267504	9.612862
967.255679	29.778723	7.219804
984.245619	123.883595	30.562956
999.777210	77.188280	19.343393
1051.622774	70.114179	18.481785
1070.636314	56.137419	15.065116
1090.241781	14.412707	3.938641
1167.121038	5.151974	1.507189
1181.334381	25.772679	7.631510
1205.542109	8.283151	2.502972
1214.089416	76.741152	23.353773
1298.487426	1.337667	0.435375
1341.638236	52.724702	17.730771
1346.301324	6.948817	2.344937
1443.989341	142.320702	51.512204
1452.261593	158.725402	57.778912
1473.206336	11.971753	4.420785
1567.350096	2.937326	1.153975
1599.380764	76.203929	30.549725
1642.440672	233.317425	96.053885
2955.695014	5.385805	3.990141
3010.580416	36.139658	27.271708
3085.524313	6.271390	4.850325
3110.343298	18.160576	14.158460
3122.656181	2.603508	2.037798
3122.974583	1.594393	1.248079
3130.937853	13.179086	10.342793
3140.221608	8.293509	6.527948
3152.770527	4.645270	3.670975

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

1356.5879	4218.3573	4683.0724
-0.3079	0.8741	0.3758
0.2069	-0.3240	0.9232
0.9287	0.3619	-0.0811

V



CCSD=-551.2955963

ATOMS cartesian

Re	-0.001444	-0.133012	0.138071
O	0.009598	0.303937	1.790061
O	1.393844	0.479494	-0.639881
XX	0.000000	1.706378	0.000000
O	-1.425517	0.444345	-0.614278
N	0.024176	-2.199746	-0.028655
C	1.216421	-2.861073	-0.047716
C	-1.152136	-2.887461	-0.075963
C	1.252659	-4.240669	-0.108882
C	-1.156198	-4.267440	-0.137711
C	0.056318	-4.955874	-0.152709
H	2.121054	-2.255583	-0.020950
H	-2.069841	-2.301600	-0.070665
H	2.219636	-4.744039	-0.126281
H	-2.111208	-4.791700	-0.178168
H	0.068932	-6.045825	-0.202972

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)

	6.651			70.287			111.791		
1.Re	0.002	0.000	-0.001	-0.001	0.003	0.021	-0.038	-0.001	-0.002
2.O	0.211	-0.007	0.000	0.009	0.344	-0.071	0.149	-0.032	0.005
3.O	-0.112	0.037	-0.176	-0.002	-0.160	-0.110	0.129	-0.408	-0.028
4.XX	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000
5.O	-0.109	-0.033	0.183	0.010	-0.120	-0.095	0.119	0.440	0.044
6.N	-0.001	0.002	-0.006	-0.010	-0.032	0.259	-0.154	0.000	-0.012
7.C	-0.006	-0.013	0.218	-0.005	-0.022	0.164	-0.076	0.130	0.018
8.C	-0.001	0.014	-0.225	-0.006	-0.033	0.149	-0.072	-0.128	-0.027
9.C	-0.007	-0.014	0.233	0.006	-0.010	-0.105	0.094	0.136	0.037
10.C	-0.001	0.015	-0.228	0.003	-0.021	-0.122	0.097	-0.131	-0.022
11.C	-0.007	0.000	0.007	0.010	-0.005	-0.300	0.176	0.003	0.015
12.H	-0.003	-0.025	0.389	-0.009	-0.021	0.270	-0.148	0.236	0.018
13.H	0.006	0.025	-0.395	-0.009	-0.039	0.242	-0.141	-0.234	-0.042
14.H	-0.009	-0.025	0.425	0.010	0.003	-0.211	0.155	0.253	0.064
15.H	0.001	0.025	-0.409	0.008	-0.018	-0.243	0.162	-0.248	-0.042
16.H	-0.012	0.000	0.016	0.019	0.008	-0.584	0.297	0.004	0.023

	182.498			218.644			225.693		
1.Re	-0.002	-0.003	0.060	-0.054	0.000	-0.001	0.001	0.022	0.004
2.O	-0.001	0.330	-0.027	0.031	0.001	-0.002	-0.005	0.280	-0.073
3.O	0.003	-0.187	-0.075	0.006	-0.157	-0.009	-0.108	0.318	0.062
4.XX	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000
5.O	0.005	-0.160	-0.072	0.005	0.176	0.015	0.100	0.311	0.061
6.N	0.005	0.020	-0.257	0.312	-0.001	0.008	-0.008	-0.164	-0.038
7.C	0.006	0.017	-0.263	0.239	-0.155	-0.002	-0.031	-0.231	-0.038
8.C	0.004	0.018	-0.264	0.235	0.151	0.012	0.020	-0.238	-0.051
9.C	0.002	0.006	-0.031	0.013	-0.170	-0.004	-0.019	-0.246	-0.004
10.C	0.001	0.008	-0.034	0.009	0.162	0.002	0.027	-0.254	0.008
11.C	-0.002	-0.003	0.202	-0.093	-0.006	-0.004	0.007	-0.285	0.016
12.H	0.005	0.022	-0.376	0.317	-0.273	0.002	-0.009	-0.259	-0.080
13.H	0.008	0.024	-0.376	0.310	0.270	0.021	-0.005	-0.274	-0.111
14.H	0.000	0.000	0.034	-0.067	-0.326	-0.006	0.001	-0.207	-0.035
15.H	0.000	0.003	0.031	-0.074	0.315	0.007	0.012	-0.226	-0.015
16.H	-0.006	-0.019	0.529	-0.244	-0.007	-0.007	0.009	-0.283	0.020

	304.129			332.511			337.602		
1.Re	-0.002	0.163	0.006	-0.003	0.002	0.075	-0.071	-0.002	-0.003
2.O	0.007	-0.301	0.134	0.041	-0.257	0.175	0.737	0.024	-0.016
3.O	0.159	-0.275	-0.071	-0.395	0.111	-0.506	0.076	0.148	0.435
4.XX	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000

5.O	-0.153	-0.278	-0.070	0.388	0.106	-0.553	0.037	-0.156	-0.386
6.N	0.003	-0.069	-0.019	0.001	-0.006	-0.012	-0.007	0.001	-0.001
7.C	-0.046	-0.212	-0.007	0.000	0.003	0.010	-0.006	0.005	0.038
8.C	0.052	-0.208	-0.023	0.001	0.004	0.001	-0.006	-0.003	-0.039
9.C	-0.046	-0.242	-0.010	0.003	0.002	0.008	-0.003	0.009	-0.053
10.C	0.053	-0.240	0.011	-0.004	0.003	0.018	-0.004	-0.007	0.052
11.C	0.004	-0.315	-0.020	0.000	0.008	-0.012	0.000	0.001	0.000
12.H	0.004	-0.290	-0.021	0.000	0.004	0.020	-0.010	0.006	0.125
13.H	0.005	-0.284	-0.064	0.002	0.006	-0.007	-0.008	-0.003	-0.124
14.H	-0.010	-0.176	-0.034	0.001	0.000	0.012	-0.001	0.013	-0.098
15.H	0.015	-0.174	0.001	-0.003	0.001	0.031	-0.004	-0.012	0.100
16.H	0.002	-0.314	-0.049	-0.001	0.009	-0.030	0.003	0.001	0.001

	370.113			404.292			634.574		
1.Re	0.003	-0.001	0.000	0.000	0.002	-0.007	0.000	0.009	0.000
2.O	-0.027	0.000	-0.001	0.001	-0.039	0.003	0.001	-0.012	0.001
3.O	-0.003	-0.010	-0.016	-0.002	0.016	-0.002	0.007	-0.003	0.000
4.XX	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000
5.O	-0.003	0.009	0.018	0.002	0.014	-0.003	-0.009	-0.003	0.000
6.N	0.001	0.000	0.002	-0.005	-0.022	0.329	-0.015	-0.161	0.090
7.C	-0.001	-0.006	0.187	0.000	0.001	-0.063	0.076	-0.054	-0.075
8.C	0.001	0.013	-0.188	0.000	0.001	-0.060	-0.124	-0.002	-0.074
9.C	0.005	0.012	-0.198	-0.001	0.008	-0.183	0.140	-0.049	0.109
10.C	-0.002	-0.003	0.196	0.006	0.008	-0.185	-0.084	0.011	0.108
11.C	0.001	0.006	0.001	-0.002	-0.014	0.248	0.017	0.151	-0.024
12.H	-0.002	-0.020	0.519	-0.003	0.008	-0.132	-0.013	0.099	-0.480
13.H	0.010	0.031	-0.519	0.003	0.006	-0.124	-0.044	0.132	-0.470
14.H	0.006	0.021	-0.394	0.002	0.020	-0.383	0.084	-0.145	-0.219
15.H	-0.004	-0.015	0.392	0.009	0.019	-0.389	0.004	-0.121	-0.231
16.H	-0.002	0.006	0.003	-0.008	-0.031	0.648	-0.032	0.172	-0.445

	647.205			684.457			750.824		
1.Re	0.002	0.002	0.000	0.000	0.013	0.001	0.000	-0.003	0.001
2.O	0.001	-0.003	0.000	0.000	0.000	0.003	0.000	0.002	-0.002
3.O	0.006	0.003	-0.004	0.006	-0.003	-0.002	-0.001	-0.001	-0.001
4.XX	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000
5.O	0.003	-0.002	0.004	-0.006	-0.004	-0.002	0.001	-0.001	0.000
6.N	0.125	-0.026	0.036	0.009	-0.158	-0.174	0.000	0.036	-0.110
7.C	0.215	0.213	-0.012	0.126	-0.044	0.122	-0.023	0.001	0.103
8.C	0.183	-0.218	-0.034	-0.111	-0.067	0.120	0.017	0.006	0.103
9.C	-0.207	0.235	0.046	0.129	-0.015	-0.130	-0.017	0.003	-0.013
10.C	-0.245	-0.251	0.024	-0.145	-0.040	-0.135	0.022	0.010	-0.011
11.C	-0.144	0.026	-0.010	-0.009	0.172	0.087	0.000	-0.033	0.107
12.H	0.261	0.163	-0.153	0.044	0.069	0.476	-0.009	-0.005	-0.228
13.H	0.259	-0.107	-0.197	-0.035	0.054	0.478	0.011	0.000	-0.233
14.H	-0.306	0.060	-0.083	0.036	-0.201	0.020	0.003	0.062	-0.592
15.H	-0.320	-0.117	-0.095	-0.060	-0.210	0.015	0.016	0.067	-0.599
16.H	0.269	0.038	-0.159	0.005	0.160	0.432	0.000	-0.013	-0.355

	842.771			925.394			948.985		
1.Re	-0.001	0.000	0.000	0.000	0.000	0.001	-0.002	0.000	0.000
2.O	0.001	0.000	0.000	0.000	-0.003	-0.011	0.001	-0.001	-0.002
3.O	0.003	0.002	-0.001	0.005	0.002	-0.003	0.010	0.004	-0.005
4.XX	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000
5.O	0.002	-0.002	0.001	-0.004	0.002	-0.002	0.009	-0.004	0.004
6.N	-0.001	0.001	0.000	0.000	0.011	-0.013	-0.002	-0.003	0.000
7.C	0.002	-0.005	0.095	0.000	-0.004	0.094	0.001	-0.003	0.086
8.C	0.004	0.004	-0.093	-0.003	-0.004	0.093	0.005	0.003	-0.089
9.C	0.000	-0.002	0.054	0.007	-0.002	-0.045	-0.001	0.005	-0.104
10.C	0.001	0.002	-0.055	-0.005	-0.001	-0.042	0.001	-0.002	0.104
11.C	-0.002	0.001	0.000	0.001	0.001	-0.064	-0.003	0.000	0.001
12.H	-0.002	0.029	-0.517	-0.002	0.030	-0.589	-0.005	0.030	-0.426
13.H	-0.014	-0.031	0.510	0.015	0.030	-0.582	-0.012	-0.029	0.443
14.H	0.001	0.018	-0.474	0.006	-0.017	0.270	-0.006	-0.027	0.539
15.H	-0.010	-0.019	0.470	-0.011	-0.014	0.254	0.010	0.033	-0.538
16.H	-0.004	0.001	-0.002	-0.005	-0.020	0.385	-0.009	0.000	-0.006

	969.676			972.183			977.144		
1.Re	0.099	0.002	-0.001	0.001	-0.007	0.077	0.000	0.001	-0.006
2.O	-0.027	0.000	0.002	-0.004	-0.160	-0.581	0.000	0.012	0.046
3.O	-0.559	-0.251	0.297	0.254	0.120	-0.162	-0.022	-0.011	0.014
4.XX	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000
5.O	-0.564	0.234	-0.283	-0.264	0.116	-0.160	0.022	-0.010	0.014
6.N	0.014	-0.006	0.000	0.001	-0.032	-0.012	0.000	-0.007	-0.013
7.C	-0.014	-0.010	0.022	-0.004	0.009	-0.017	-0.003	0.000	-0.004
8.C	-0.010	0.008	-0.020	0.003	0.009	-0.013	0.003	0.001	-0.004
9.C	-0.015	0.023	-0.016	-0.022	0.011	0.055	-0.006	0.000	0.078
10.C	-0.007	-0.019	0.014	0.020	0.011	0.052	0.004	0.000	0.079
11.C	0.012	0.003	0.001	0.001	-0.011	-0.078	0.002	0.008	-0.140
12.H	0.026	-0.068	-0.136	-0.018	0.022	0.157	-0.003	-0.004	0.067
13.H	0.026	0.067	0.125	0.015	0.025	0.136	0.002	-0.003	0.072
14.H	-0.004	0.047	0.085	-0.010	0.049	-0.291	-0.002	0.027	-0.416
15.H	0.007	-0.040	-0.077	0.015	0.048	-0.270	0.011	0.026	-0.420

16.H	0.078	0.004	-0.001	-0.004	-0.034	0.440	-0.007	-0.034	0.776

	996.092			1005.573			1023.414		
1.Re	-0.001	0.026	0.002	0.000	-0.029	-0.006	0.000	0.008	-0.001
2.O	-0.001	-0.061	-0.203	0.003	0.125	0.439	0.000	-0.006	-0.020
3.O	-0.168	-0.085	0.096	0.330	0.151	-0.181	-0.034	-0.017	0.020
4.XX	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000
5.O	0.178	-0.084	0.096	-0.336	0.142	-0.175	0.035	-0.017	0.020
6.N	0.003	-0.372	-0.031	0.002	-0.309	-0.027	0.000	-0.259	-0.024
7.C	-0.193	-0.097	0.005	-0.077	-0.051	0.007	0.276	0.184	0.021
8.C	0.203	-0.105	0.015	0.085	-0.060	0.013	-0.273	0.168	0.015
9.C	-0.252	0.131	-0.009	-0.226	0.108	-0.006	-0.127	0.085	-0.005
10.C	0.251	0.138	-0.011	0.226	0.115	-0.006	0.128	0.090	-0.006
11.C	-0.007	0.229	0.021	-0.006	0.120	0.009	0.000	-0.348	-0.011
12.H	-0.230	-0.083	-0.035	-0.110	-0.024	-0.030	0.153	0.404	0.020
13.H	0.228	-0.109	-0.055	0.104	-0.052	-0.047	-0.167	0.371	0.011
14.H	-0.275	0.149	0.063	-0.257	0.098	0.042	-0.104	0.126	0.032
15.H	0.257	0.178	0.101	0.242	0.125	0.069	0.091	0.151	0.053
16.H	-0.025	0.261	-0.021	-0.019	0.141	0.006	-0.013	-0.363	-0.015

	1055.276			1086.076			1174.014		
1.Re	0.000	-0.001	0.001	-0.003	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000
2.O	0.000	-0.003	-0.012	0.001	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000
3.O	-0.006	-0.001	0.002	0.010	0.002	-0.005	0.001	0.000	0.000
4.XX	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000
5.O	0.006	-0.001	0.002	0.009	-0.002	0.005	0.001	0.000	0.000
6.N	0.001	0.103	0.008	0.115	-0.008	0.001	0.031	0.000	0.000
7.C	0.103	-0.018	0.000	-0.078	-0.095	-0.001	-0.001	0.001	0.000
8.C	-0.106	-0.015	-0.003	-0.079	0.094	0.001	-0.001	-0.001	0.000
9.C	-0.125	-0.026	0.000	-0.079	0.054	0.000	0.015	0.030	0.002
10.C	0.123	-0.025	0.004	-0.075	-0.050	-0.003	0.016	-0.029	-0.001
11.C	0.002	0.093	0.002	0.111	-0.002	0.002	-0.060	-0.001	-0.001
12.H	0.253	-0.226	-0.024	0.111	-0.395	-0.037	0.061	-0.092	-0.006
13.H	-0.242	-0.212	-0.027	0.113	0.412	0.037	0.059	0.093	0.007
14.H	-0.359	-0.456	-0.037	0.058	0.341	0.021	0.240	0.459	0.023
15.H	0.375	-0.463	-0.032	0.056	-0.308	-0.015	0.250	-0.452	-0.016
16.H	0.011	0.104	-0.001	0.596	0.004	0.004	-0.658	-0.007	-0.008

	1215.523			1291.084			1353.153		
1.Re	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000
2.O	0.000	0.001	0.003	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000
3.O	0.001	0.000	0.000	0.001	0.003	-0.001	-0.002	-0.001	0.001
4.XX	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000
5.O	-0.001	0.000	0.000	0.001	-0.003	0.000	-0.001	0.000	-0.001
6.N	0.002	-0.011	-0.001	-0.408	-0.006	-0.005	0.048	0.001	0.001
7.C	-0.063	0.061	0.002	0.213	-0.246	-0.010	0.026	-0.048	-0.003
8.C	0.060	0.062	0.003	0.209	0.251	0.016	0.025	0.048	0.003
9.C	0.003	-0.048	-0.002	0.066	0.157	0.007	-0.017	-0.035	-0.002
10.C	-0.002	-0.047	-0.002	0.072	-0.156	-0.006	-0.017	0.035	0.001
11.C	0.001	-0.013	0.000	-0.175	-0.002	-0.002	-0.079	-0.001	-0.001
12.H	-0.312	0.423	0.022	0.228	-0.279	-0.003	-0.321	0.460	0.025
13.H	0.302	0.430	0.030	0.236	0.303	0.004	-0.311	-0.468	-0.034
14.H	-0.189	-0.419	-0.023	0.054	0.132	0.010	0.151	0.282	0.014
15.H	0.200	-0.417	-0.017	0.061	-0.133	-0.008	0.157	-0.278	-0.010
16.H	0.000	-0.015	-0.002	0.461	0.005	0.004	0.381	0.004	0.004

	1448.217			1476.071			1551.483		
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	0.000	-0.001	0.000	0.000	0.000
3.O	-0.001	0.001	0.001	-0.002	0.000	0.001	-0.002	0.001	0.001
4.XX	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000
5.O	-0.001	-0.001	-0.001	0.002	0.000	0.000	-0.002	-0.001	-0.001
6.N	-0.112	-0.002	-0.001	-0.002	0.084	0.004	-0.143	-0.002	-0.002
7.C	0.041	0.137	0.007	0.086	-0.072	-0.004	0.134	-0.071	-0.002
8.C	0.046	-0.135	-0.006	-0.083	-0.076	-0.006	0.133	0.075	0.006
9.C	-0.029	-0.185	-0.009	-0.095	-0.091	-0.004	-0.209	-0.073	-0.005
10.C	-0.035	0.185	0.008	0.097	-0.084	-0.001	-0.212	0.068	0.000
11.C	-0.034	-0.001	0.000	-0.001	0.088	0.004	0.402	0.004	0.005
12.H	0.331	-0.240	-0.011	-0.265	0.457	0.025	-0.098	0.282	0.018
13.H	0.319	0.237	0.021	0.258	0.463	0.030	-0.092	-0.286	-0.021
14.H	0.246	0.305	0.015	0.150	0.394	0.016	-0.100	0.191	0.007
15.H	0.256	-0.306	-0.008	-0.155	0.388	0.012	-0.095	-0.196	-0.010
16.H	0.486	0.005	0.007	0.000	0.107	0.003	-0.631	-0.007	-0.008

	1597.884			3128.602			3138.630		
1.Re	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000
2.O	0.000	-0.001	-0.001	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000
3.O	-0.001	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000
4.XX	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000
5.O	0.001	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000
6.N	-0.002	0.108	0.006	0.000	0.000	0.000	0.001	0.000	0.000

7.C	0.062	-0.259	-0.013	-0.008	-0.004	0.000	-0.033	-0.022	-0.001
8.C	-0.055	-0.261	-0.013	0.005	-0.002	0.000	-0.019	0.012	0.000
9.C	0.060	0.272	0.014	0.031	-0.019	-0.001	0.053	-0.025	-0.001
10.C	-0.066	0.271	0.012	-0.023	-0.016	-0.001	0.037	0.020	0.002
11.C	0.002	-0.138	-0.007	-0.001	0.073	0.003	-0.003	-0.017	-0.001
12.H	-0.338	0.288	0.016	0.090	0.060	0.003	0.379	0.256	0.012
13.H	0.331	0.295	0.023	-0.058	0.036	0.000	0.222	-0.142	-0.001
14.H	-0.236	-0.263	-0.013	-0.371	0.197	0.007	-0.592	0.308	0.011
15.H	0.242	-0.255	-0.009	0.286	0.161	0.012	-0.424	-0.234	-0.018
16.H	0.002	-0.166	-0.006	0.010	-0.831	-0.037	0.001	0.184	0.008

	3142.499			3152.907			3158.951		
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.XX	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000
5.O	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000
6.N	0.000	-0.001	0.000	-0.003	0.000	0.000	0.000	-0.001	0.000
7.C	0.025	0.015	0.001	0.050	0.037	0.002	-0.033	-0.024	-0.001
8.C	-0.038	0.023	0.000	0.036	-0.027	0.000	0.049	-0.034	0.000
9.C	-0.023	0.009	0.000	0.034	-0.021	-0.001	-0.026	0.014	0.001
10.C	0.047	0.022	0.002	0.022	0.016	0.001	0.037	0.022	0.002
11.C	-0.001	0.041	0.002	-0.003	-0.005	0.000	-0.001	0.022	0.001
12.H	-0.269	-0.183	-0.008	-0.564	-0.386	-0.017	0.367	0.252	0.011
13.H	0.426	-0.276	-0.003	-0.416	0.272	0.003	-0.539	0.353	0.004
14.H	0.246	-0.126	-0.004	-0.383	0.203	0.007	0.287	-0.151	-0.005
15.H	-0.516	-0.282	-0.022	-0.258	-0.145	-0.011	-0.407	-0.227	-0.018
16.H	0.006	-0.453	-0.021	0.002	0.054	0.002	0.003	-0.236	-0.011

List of All Frequencies:

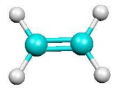
Intensities
==========

Frequency cm-1	Dipole Strength 1e-40 esu2 cm2	Absorption Intensity (degeneracy not counted) km/mole
6.651291	0.000000	0.000000
70.286876	0.519909	0.009160
111.791388	56.901386	1.594444
182.497844	20.129926	0.920827
218.643560	8.879710	0.486646
225.693079	46.196793	2.613414
304.129192	151.200222	11.526265
332.510715	7.040622	0.586806
337.602053	2.911473	0.246375
370.112669	0.026728	0.002480
404.292021	18.316762	1.856188
634.574260	241.485531	38.410648
647.205462	18.120391	2.939597
684.456638	112.963511	19.380376
750.823724	312.569487	58.825095
842.771183	1.627365	0.343774
925.394230	0.905192	0.209964
948.984611	2.062736	0.490660
969.676464	339.039728	82.405370
972.182828	359.793408	87.675695
977.144058	21.130741	5.175489
996.091928	279.497532	69.783937
1005.572779	1.616912	0.407547
1023.414416	5.922398	1.519243
1055.276474	95.848570	25.353036
1086.075866	13.404896	3.649234
1174.013858	5.512288	1.622121
1215.523402	33.689893	10.264576
1291.083667	2.406909	0.778919
1353.153200	7.048650	2.390732
1448.217296	168.834761	61.287748
1476.070938	5.869162	2.171508
1551.482806	1.565200	0.608688
1597.884094	154.559560	61.904072
3128.601695	0.460771	0.361338
3138.630310	8.316168	6.542466
3142.498532	56.507337	44.510041
3152.906959	70.550164	55.755441
3158.950770	3.323341	2.631454

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

760.6388	3227.2901	3540.7391
0.0120	0.9999	-0.0114

-0.9978	0.0113	-0.0651
-0.0650	0.0122	0.9978



CCSD=-78.3750925

ATOMS cartesian

C	0.019769	0.017220	0.000000
C	1.350085	-0.041792	0.000000
H	-0.511124	0.971136	0.000000
H	-0.593076	-0.886223	0.000000
H	1.880149	-0.996128	0.000000
H	1.963058	0.861543	0.000000

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)

	810.864			933.025			944.708		
1.C	-0.002	-0.040	0.000	0.000	0.000	0.151	0.001	0.000	0.086
2.C	-0.002	-0.040	0.000	0.000	0.000	-0.154	-0.001	0.000	0.081
3.H	0.450	0.217	0.000	0.000	0.000	-0.477	0.001	0.000	-0.505
4.H	-0.429	0.256	0.000	0.000	0.000	-0.477	0.001	0.000	-0.505
5.H	0.450	0.217	0.000	0.000	0.000	0.499	-0.001	0.000	-0.488
6.H	-0.429	0.256	0.000	0.000	0.000	0.499	-0.001	0.000	-0.488

	1027.600			1203.081			1344.786		
1.C	0.000	0.000	0.000	-0.007	-0.154	0.000	0.093	-0.004	0.000
2.C	0.000	0.000	0.000	0.007	0.154	0.000	-0.092	0.004	0.000
3.H	0.000	0.000	0.500	0.473	0.122	0.000	0.461	0.178	0.001
4.H	0.000	0.000	-0.500	-0.460	0.163	0.000	0.444	-0.219	0.001
5.H	0.000	0.000	0.500	-0.472	-0.122	0.000	-0.463	-0.179	0.001
6.H	0.000	0.000	-0.500	0.460	-0.164	0.000	-0.445	0.220	0.001

	1427.157			1638.002			3054.307		
1.C	0.069	-0.003	0.000	-0.325	0.014	0.000	0.043	-0.002	0.000
2.C	0.069	-0.003	0.000	0.325	-0.014	0.000	0.042	-0.002	0.000
3.H	-0.423	-0.263	0.000	0.245	0.371	-0.002	-0.235	0.443	0.000
4.H	-0.399	0.300	0.000	0.211	-0.391	-0.002	-0.273	-0.421	0.000
5.H	-0.422	-0.262	0.000	-0.245	-0.370	-0.002	-0.232	0.439	0.000
6.H	-0.396	0.299	0.000	-0.210	0.391	-0.002	-0.270	-0.417	0.000

	3071.460			3139.762			3166.365		
1.C	-0.054	0.002	0.000	0.003	0.070	0.000	0.003	0.070	0.000
2.C	0.055	-0.002	0.000	-0.003	-0.069	0.000	0.003	0.071	0.000
3.H	0.234	-0.437	0.000	0.248	-0.435	0.000	0.244	-0.430	0.000
4.H	0.272	0.415	0.000	-0.285	-0.411	0.000	-0.281	-0.407	0.000
5.H	-0.236	0.441	0.000	-0.245	0.430	0.000	0.247	-0.436	0.000
6.H	-0.275	-0.420	0.000	0.282	0.406	0.000	-0.285	-0.411	0.000

List of All Frequencies:

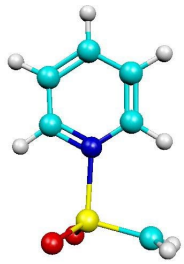
Intensities
==========

Frequency cm-1	Dipole Strength 1e-40 esu2 cm2	Absorption Intensity (degeneracy not counted) km/mole
810.863524	3.257689	0.662118
933.024505	0.174930	0.040911
944.708005	462.163205	109.438727
1027.600497	0.000048	0.000012
1203.080509	0.000061	0.000019
1344.785836	0.002291	0.000772
1427.157020	39.616053	14.171670
1638.001656	0.001184	0.000486
3054.306938	13.431571	10.282946
3071.460314	0.000232	0.000178
3139.762002	0.000428	0.000337
3166.365288	5.817190	4.616920

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

12.4423	60.0602	72.5026
0.9990	0.0443	0.0000
-0.0443	0.9990	0.0000
0.0000	0.0000	1.0000

VI



CCSD=-515.409265

ATOMS cartesian

Re	0.000543	-0.019094	-0.059052
C	1.862116	-0.038578	0.229317
O	-0.517781	1.605448	0.045666
O	-0.695438	-1.193238	0.970822
N	-0.131575	-0.685213	-2.043646
H	2.360416	-0.896515	0.700848
H	2.472170	0.870532	0.140145
C	0.924063	-0.808499	-2.893151
C	-1.386676	-0.974986	-2.485655
C	0.744222	-1.219042	-4.201575
C	-1.615141	-1.397955	-3.781844
C	-0.537514	-1.521083	-4.656565
H	1.902836	-0.571527	-2.487894
H	-2.201961	-0.864157	-1.771022
H	1.613598	-1.304535	-4.853595
H	-2.634166	-1.625962	-4.094247
H	-0.695594	-1.852404	-5.683999

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)

	35.992			56.759			131.387		
1.Re	0.001	0.006	0.002	0.001	-0.010	0.005	-0.028	-0.005	0.013
2.C	0.003	0.014	-0.043	0.010	0.197	-0.053	0.020	-0.137	-0.310
3.O	-0.021	-0.017	0.254	-0.149	-0.054	-0.055	0.151	0.048	0.057
4.O	0.078	-0.119	-0.090	0.171	-0.001	0.127	0.117	0.135	0.268
5.N	-0.064	0.220	-0.081	-0.022	-0.070	0.014	-0.101	-0.008	-0.009
6.H	0.021	-0.020	-0.127	0.110	0.293	0.015	0.030	-0.155	-0.354
7.H	-0.036	0.050	0.064	-0.096	0.261	-0.133	0.083	-0.197	-0.482
8.C	-0.034	0.050	-0.020	0.008	-0.215	0.073	-0.048	0.058	0.041
9.C	-0.055	0.246	-0.121	-0.035	0.112	-0.073	-0.054	-0.057	-0.103
10.C	0.017	-0.162	0.039	0.024	-0.149	0.050	0.067	0.091	0.019
11.C	0.020	-0.048	-0.041	-0.024	0.213	-0.110	0.063	-0.084	-0.120
12.C	0.042	-0.252	0.035	0.003	0.099	-0.054	0.119	-0.003	-0.061
13.H	-0.047	0.078	-0.008	0.018	-0.369	0.137	-0.083	0.088	0.104
14.H	-0.108	0.506	-0.218	-0.060	0.161	-0.109	-0.118	-0.018	-0.180
15.H	0.044	-0.271	0.093	0.052	-0.269	0.106	0.117	0.172	0.075
16.H	0.019	-0.042	-0.042	-0.045	0.391	-0.171	0.096	-0.147	-0.185
17.H	0.072	-0.461	0.099	0.006	0.209	-0.088	0.200	0.000	-0.074

	159.275			199.103			232.182		
1.Re	0.015	-0.048	0.014	0.003	0.014	0.004	-0.047	-0.011	-0.005
2.C	-0.015	0.048	0.190	-0.049	0.075	0.307	-0.035	-0.015	-0.105
3.O	-0.038	-0.045	-0.312	0.098	0.024	0.242	0.025	0.004	0.105
4.O	-0.012	0.153	0.224	0.056	0.089	0.114	0.045	0.062	0.143
5.N	-0.017	0.172	-0.074	-0.011	-0.110	-0.094	0.274	0.053	-0.057
6.H	-0.058	0.170	0.456	-0.122	0.092	0.411	0.005	-0.016	-0.152
7.H	-0.041	0.054	0.083	-0.089	0.116	0.475	-0.032	-0.025	-0.189
8.C	-0.034	0.187	-0.095	-0.033	-0.101	-0.131	0.187	0.005	-0.175
9.C	-0.023	0.196	-0.072	-0.007	-0.119	-0.122	0.231	0.067	0.092
10.C	-0.039	0.075	-0.063	-0.051	-0.004	-0.169	-0.005	-0.104	-0.126
11.C	0.000	-0.027	-0.005	-0.018	-0.103	-0.136	0.015	0.110	0.132
12.C	-0.014	-0.127	0.007	-0.046	-0.004	-0.183	-0.086	-0.023	0.028
13.H	-0.038	0.251	-0.123	-0.018	-0.138	-0.140	0.244	0.022	-0.312
14.H	-0.043	0.391	-0.120	-0.024	-0.012	-0.155	0.334	-0.102	0.235
15.H	-0.049	0.100	-0.078	-0.056	0.072	-0.187	-0.092	-0.230	-0.228
16.H	-0.004	-0.066	0.036	-0.024	-0.099	-0.123	-0.037	0.156	0.276
17.H	-0.015	-0.319	0.069	-0.064	0.098	-0.212	-0.214	-0.089	0.069

	263.425			278.521			298.733		
1.Re	0.040	0.029	0.098	-0.001	-0.030	0.009	0.054	-0.031	-0.097
2.C	0.105	-0.078	-0.221	0.019	0.291	-0.097	0.064	-0.027	-0.030

3.O	-0.287	-0.073	-0.052	0.203	0.025	0.032	-0.365	-0.222	0.405
4.O	-0.281	0.065	-0.086	-0.202	0.033	-0.042	-0.309	0.451	0.166
5.N	0.037	-0.025	-0.097	-0.007	0.005	0.000	-0.034	-0.008	0.070
6.H	0.172	-0.120	-0.359	0.386	0.487	-0.137	0.024	0.020	0.105
7.H	0.178	-0.136	-0.359	-0.325	0.518	-0.189	0.056	-0.002	0.133
8.C	-0.010	-0.061	-0.181	-0.006	0.002	0.002	0.011	-0.001	0.141
9.C	0.048	-0.049	-0.141	-0.007	0.006	-0.002	-0.053	0.053	0.091
10.C	-0.042	-0.071	-0.194	0.001	0.009	-0.001	0.031	0.098	0.128
11.C	0.011	-0.044	-0.150	0.004	-0.002	-0.003	0.001	-0.015	0.115
12.C	-0.040	-0.059	-0.207	0.005	-0.005	-0.001	0.035	0.055	0.148
13.H	0.022	-0.073	-0.251	-0.007	-0.006	0.009	-0.014	-0.052	0.225
14.H	0.035	-0.071	-0.155	-0.012	0.029	-0.011	-0.051	0.194	0.074
15.H	-0.037	-0.075	-0.189	0.004	0.014	0.002	0.022	0.156	0.110
16.H	-0.012	-0.039	-0.084	0.006	-0.015	-0.001	0.022	-0.034	0.063
17.H	-0.069	-0.045	-0.207	0.007	-0.020	0.003	0.053	0.066	0.142

	346.431			420.622			570.395		
1.Re	0.007	-0.002	-0.002	0.002	-0.007	0.000	0.000	-0.001	0.000
2.C	0.007	0.009	0.033	0.002	-0.007	0.015	0.003	0.068	-0.021
3.O	0.001	-0.011	0.021	0.004	-0.006	-0.021	0.012	-0.019	-0.026
4.O	-0.013	0.027	0.018	-0.008	0.015	0.020	-0.013	0.000	0.031
5.N	-0.043	0.005	-0.014	-0.043	0.306	-0.096	0.001	0.001	0.000
6.H	0.006	-0.001	0.018	0.014	0.026	0.063	-0.166	-0.351	-0.592
7.H	0.018	0.005	0.061	-0.008	-0.004	-0.030	0.143	0.037	0.684
8.C	-0.047	0.195	-0.043	0.005	-0.036	0.015	0.003	-0.002	0.002
9.C	-0.020	-0.160	0.017	0.002	-0.088	0.028	0.001	0.007	-0.004
10.C	0.032	-0.154	0.058	0.028	-0.178	0.059	-0.001	-0.006	0.003
11.C	-0.047	0.180	-0.085	0.012	-0.164	0.046	-0.001	-0.009	0.001
12.C	0.022	-0.041	0.006	-0.027	0.239	-0.067	-0.002	0.005	-0.001
13.H	-0.088	0.488	-0.114	0.009	-0.088	0.037	0.000	0.022	-0.003
14.H	0.020	-0.557	0.119	0.018	-0.150	0.056	0.000	0.020	-0.006
15.H	0.069	-0.337	0.130	0.056	-0.391	0.122	-0.004	0.005	-0.001
16.H	-0.046	0.288	-0.169	0.043	-0.371	0.094	-0.002	-0.003	0.002
17.H	0.069	-0.111	0.020	-0.064	0.600	-0.178	-0.003	0.024	-0.007

	633.134			641.773			674.279		
1.Re	-0.002	0.000	-0.002	0.000	0.001	0.005	0.000	0.005	-0.002
2.C	-0.015	-0.009	-0.012	0.010	0.011	0.016	-0.005	-0.122	0.041
3.O	-0.004	0.004	0.000	0.000	-0.004	-0.002	-0.019	0.004	-0.014
4.O	0.002	-0.002	-0.001	0.002	-0.002	0.007	0.020	0.010	0.010
5.N	-0.064	-0.066	0.074	-0.074	0.051	-0.123	0.000	0.006	-0.001
6.H	-0.011	0.007	0.009	0.009	-0.029	-0.053	0.627	0.063	-0.309
7.H	-0.054	0.020	0.021	0.052	-0.018	0.008	-0.602	0.302	0.189
8.C	-0.184	0.007	-0.124	-0.003	-0.107	-0.069	0.001	-0.005	0.003
9.C	-0.083	0.042	0.182	-0.131	-0.005	0.064	0.001	-0.005	0.000
10.C	0.104	-0.126	-0.148	0.140	0.084	-0.147	-0.002	0.005	0.000
11.C	0.229	0.011	0.145	-0.027	0.093	0.044	-0.001	0.004	-0.002
12.C	0.080	0.029	-0.067	0.074	0.003	0.111	0.000	-0.004	0.000
13.H	-0.238	0.294	-0.168	-0.016	-0.422	0.146	0.002	-0.007	0.003
14.H	-0.200	0.459	-0.009	-0.036	-0.485	0.244	0.002	-0.009	0.001
15.H	0.180	0.099	-0.078	0.137	-0.148	-0.126	-0.002	0.007	0.000
16.H	0.210	0.292	0.015	0.090	-0.298	-0.047	-0.002	0.003	-0.001
17.H	-0.250	0.289	-0.099	0.015	-0.380	0.243	0.004	-0.011	0.001

	679.204			737.265			770.466		
1.Re	0.001	0.004	0.010	-0.002	0.001	-0.002	-0.039	0.000	-0.006
2.C	-0.012	-0.009	-0.015	0.021	0.000	0.015	0.473	-0.002	0.075
3.O	-0.003	0.006	-0.005	0.001	-0.001	0.004	0.013	-0.004	-0.001
4.O	-0.001	-0.007	-0.008	0.001	0.001	0.000	0.013	0.000	-0.003
5.N	0.004	-0.180	-0.158	0.016	-0.133	0.061	-0.001	0.004	0.001
6.H	0.019	0.024	0.010	0.058	-0.003	-0.027	0.575	0.067	0.132
7.H	-0.061	0.021	-0.039	0.020	-0.002	-0.014	0.582	-0.046	0.160
8.C	0.146	0.082	-0.077	-0.033	0.119	-0.030	0.002	-0.015	0.002
9.C	-0.119	0.065	-0.068	-0.008	0.131	-0.039	-0.002	0.020	-0.003
10.C	0.146	-0.095	0.014	-0.007	-0.033	0.009	0.004	-0.014	-0.001
11.C	-0.165	-0.127	0.016	0.019	-0.034	0.016	0.001	-0.009	0.005
12.C	0.007	0.113	0.207	-0.015	0.115	-0.061	0.002	-0.015	0.004
13.H	0.027	0.471	-0.013	0.010	-0.167	0.033	-0.018	0.097	-0.017
14.H	-0.031	0.386	-0.010	0.015	-0.175	0.032	-0.002	-0.033	0.005
15.H	-0.044	0.071	-0.260	0.080	-0.563	0.193	-0.015	0.141	-0.048
16.H	-0.138	0.065	-0.221	0.092	-0.593	0.186	-0.006	0.056	-0.020
17.H	-0.012	0.468	0.099	0.041	-0.308	0.066	-0.017	0.103	-0.031

	835.763			874.728			925.117		
1.Re	0.003	0.000	-0.002	-0.001	0.002	0.004	-0.001	-0.002	0.000
2.C	-0.031	0.013	0.042	0.024	-0.049	-0.144	0.007	0.009	0.023
3.O	0.001	-0.002	0.004	0.005	-0.004	-0.006	-0.006	0.013	0.001
4.O	-0.002	0.002	0.004	0.003	-0.001	-0.007	0.003	0.004	-0.004
5.N	0.000	0.002	0.020	-0.002	0.001	0.005	-0.005	0.007	-0.027
6.H	0.034	-0.056	-0.154	-0.182	0.227	0.585	0.031	-0.039	-0.094
7.H	0.028	-0.051	-0.186	-0.187	0.172	0.607	0.043	-0.028	-0.101
8.C	-0.011	-0.076	0.029	0.012	-0.029	0.008	0.023	-0.104	0.027
9.C	-0.010	0.097	-0.025	0.000	0.005	-0.001	0.010	-0.076	0.013
10.C	0.006	-0.060	0.016	0.003	-0.014	-0.002	-0.020	0.050	-0.003

11.C	-0.007	0.035	-0.006	-0.004	0.033	-0.008	0.019	0.038	-0.013
12.C	0.007	-0.014	-0.024	-0.003	0.008	-0.008	-0.015	0.072	0.008
13.H	-0.060	0.454	-0.161	-0.012	0.175	-0.051	-0.070	0.615	-0.173
14.H	0.046	-0.417	0.115	0.013	-0.049	0.021	-0.062	0.418	-0.144
15.H	-0.037	0.511	-0.120	-0.013	0.097	-0.039	-0.010	-0.300	0.062
16.H	0.054	-0.417	0.121	0.034	-0.237	0.064	0.048	-0.178	0.057
17.H	0.018	0.100	-0.064	0.002	-0.065	0.015	0.016	-0.418	0.165

	955.146			974.625			976.860		
1.Re	-0.001	-0.002	0.001	0.007	0.087	-0.031	0.000	-0.001	0.001
2.C	0.007	0.006	0.012	0.004	-0.046	0.021	-0.001	0.000	-0.004
3.O	-0.007	0.016	0.000	0.155	-0.535	-0.025	-0.001	0.007	0.000
4.O	0.007	0.010	-0.010	-0.248	-0.448	0.382	0.006	0.010	-0.008
5.N	-0.006	-0.006	-0.030	-0.001	-0.006	-0.016	0.000	0.014	0.002
6.H	0.014	-0.033	-0.069	0.110	0.112	0.203	-0.007	0.006	0.015
7.H	0.027	-0.013	-0.047	-0.079	-0.021	-0.274	-0.006	0.005	0.020
8.C	-0.001	0.076	-0.027	0.002	0.002	-0.003	0.000	0.000	0.006
9.C	0.018	-0.096	0.015	0.003	-0.035	0.006	-0.005	0.018	-0.003
10.C	-0.010	-0.099	0.043	-0.013	-0.025	0.019	0.017	-0.070	0.018
11.C	0.024	0.104	-0.030	0.019	0.014	-0.006	-0.004	-0.086	0.027
12.C	-0.011	0.029	0.030	-0.006	0.040	0.003	-0.014	0.123	-0.056
13.H	0.044	-0.395	0.133	0.004	-0.020	0.000	0.005	-0.041	0.019
14.H	-0.066	0.422	-0.162	-0.020	0.186	-0.053	0.026	-0.152	0.060
15.H	-0.130	0.487	-0.185	-0.053	0.136	-0.050	-0.025	0.395	-0.102
16.H	0.102	-0.462	0.144	0.031	-0.033	-0.003	-0.080	0.460	-0.131
17.H	-0.034	-0.139	0.092	0.013	-0.213	0.085	0.111	-0.698	0.187

	999.394			1016.673			1046.772		
1.Re	-0.035	0.020	0.037	-0.008	0.003	0.003	0.000	-0.001	-0.005
2.C	-0.057	0.001	0.004	-0.009	0.006	0.014	0.001	0.002	0.005
3.O	0.212	-0.618	-0.058	0.039	-0.122	-0.010	0.002	-0.010	0.000
4.O	0.249	0.385	-0.363	0.049	0.069	-0.064	0.000	-0.001	-0.001
5.N	-0.032	-0.038	-0.112	0.036	0.063	0.192	0.037	0.101	0.310
6.H	-0.029	-0.005	-0.064	0.005	-0.028	-0.074	-0.008	-0.006	-0.002
7.H	-0.047	-0.029	-0.080	0.008	-0.021	-0.092	-0.008	0.005	-0.009
8.C	-0.122	-0.029	-0.021	0.267	0.068	0.087	-0.232	-0.039	-0.052
9.C	0.121	0.007	-0.088	-0.209	-0.023	0.191	0.218	-0.057	-0.160
10.C	-0.071	0.014	0.049	0.167	-0.018	-0.111	0.245	-0.027	-0.172
11.C	0.102	0.011	0.051	-0.193	0.000	-0.073	-0.255	-0.034	-0.067
12.C	0.012	0.033	0.118	-0.053	-0.087	-0.268	0.005	0.063	0.178
13.H	-0.143	0.008	-0.027	0.224	0.092	0.249	-0.230	-0.042	-0.075
14.H	0.115	-0.126	-0.097	-0.243	0.379	0.131	0.061	0.153	-0.389
15.H	-0.073	-0.021	0.068	0.182	-0.013	-0.132	0.330	0.035	-0.090
16.H	0.088	0.112	0.072	-0.202	-0.223	0.030	-0.330	-0.091	0.180
17.H	-0.032	0.076	0.123	-0.080	-0.145	-0.273	-0.087	-0.002	0.214

	1066.206			1081.812			1170.125		
1.Re	0.001	0.000	0.001	0.002	0.000	-0.001	0.000	0.000	0.000
2.C	0.003	0.000	0.000	-0.004	0.000	0.004	0.000	0.000	0.000
3.O	-0.004	0.011	0.001	0.000	0.006	0.001	0.000	0.000	0.000
4.O	-0.006	-0.009	0.007	-0.004	-0.003	0.003	0.000	-0.001	0.001
5.N	-0.059	-0.049	-0.139	-0.098	0.005	0.053	-0.027	-0.002	0.004
6.H	0.002	-0.001	0.000	0.003	0.002	0.001	-0.001	0.000	0.002
7.H	0.003	0.001	0.000	0.000	-0.004	-0.003	0.000	0.001	0.001
8.C	-0.033	0.014	0.063	0.110	0.030	0.070	-0.002	0.000	-0.001
9.C	0.096	0.000	-0.014	0.016	-0.009	-0.105	0.002	-0.002	0.004
10.C	0.105	0.019	0.012	0.020	-0.014	-0.065	-0.020	-0.010	-0.025
11.C	-0.046	0.023	0.068	0.115	0.008	0.032	-0.013	0.009	0.031
12.C	-0.051	-0.038	-0.098	-0.088	-0.002	0.035	0.058	0.004	-0.012
13.H	-0.200	0.096	0.399	0.000	0.104	0.318	-0.057	0.028	0.112
14.H	0.192	0.088	0.068	-0.212	-0.295	-0.330	-0.075	-0.007	-0.084
15.H	0.334	0.122	0.290	-0.245	-0.151	-0.414	-0.303	-0.157	-0.380
16.H	-0.226	0.103	0.589	0.082	0.114	0.106	-0.168	0.107	0.460
17.H	-0.203	-0.044	-0.085	-0.530	-0.004	0.106	0.660	0.051	-0.120

	1212.592			1291.814			1326.135		
1.Re	0.000	0.000	0.000	0.001	0.000	-0.001	0.002	0.000	0.000
2.C	0.001	0.000	0.000	0.002	0.003	0.010	-0.121	0.000	-0.024
3.O	0.001	-0.002	0.000	-0.001	-0.001	0.000	0.001	0.001	0.000
4.O	0.001	0.001	0.000	-0.001	0.000	-0.002	0.001	-0.001	0.001
5.N	-0.004	0.003	0.011	-0.418	-0.025	0.092	0.007	0.000	-0.001
6.H	-0.003	0.001	0.006	-0.015	-0.018	-0.013	0.566	0.399	0.014
7.H	-0.003	0.003	0.007	-0.011	0.008	-0.021	0.512	-0.376	0.265
8.C	0.053	-0.009	-0.057	0.176	-0.060	-0.276	0.004	-0.003	-0.013
9.C	-0.069	-0.024	-0.048	0.254	0.096	0.194	0.008	0.003	0.011
10.C	0.009	0.013	0.040	0.107	0.055	0.142	-0.003	-0.001	-0.001
11.C	0.008	0.014	0.050	0.055	-0.046	-0.177	-0.003	0.000	0.003
12.C	0.002	0.003	0.008	-0.192	-0.013	0.037	-0.013	-0.001	0.002
13.H	0.262	-0.114	-0.481	0.203	-0.084	-0.336	-0.043	0.019	0.082
14.H	-0.369	-0.143	-0.367	0.268	0.044	0.227	-0.077	-0.008	-0.082
15.H	0.232	0.128	0.322	0.043	0.027	0.054	0.032	0.017	0.042
16.H	-0.126	0.115	0.418	0.021	-0.017	-0.077	0.015	-0.013	-0.047
17.H	-0.002	0.009	0.007	0.424	0.019	-0.067	0.057	0.002	-0.010

	1341.810			1452.490			1464.350		
1.Re	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000
2.C	-0.020	0.000	-0.003	0.001	-0.002	-0.002	-0.004	0.000	0.002
3.O	0.000	0.000	0.000	0.001	0.000	0.000	0.001	-0.001	0.000
4.O	0.001	0.001	-0.001	0.000	0.001	0.000	0.001	0.001	-0.001
5.N	-0.044	-0.004	0.005	0.103	0.018	0.017	-0.028	0.021	0.080
6.H	0.106	0.071	-0.001	-0.013	-0.004	0.007	0.017	0.008	-0.006
7.H	0.096	-0.070	0.047	-0.010	0.006	0.003	0.016	-0.014	-0.003
8.C	-0.024	0.016	0.064	-0.026	-0.050	-0.153	0.093	-0.004	-0.048
9.C	-0.029	-0.015	-0.036	-0.068	0.024	0.074	-0.089	-0.041	-0.105
10.C	0.029	0.010	0.021	0.008	0.042	0.137	-0.115	-0.048	-0.111
11.C	0.006	-0.008	-0.034	0.038	-0.051	-0.184	0.074	0.002	-0.031
12.C	0.073	0.004	-0.015	0.045	0.013	0.023	0.003	0.024	0.080
13.H	0.245	-0.122	-0.495	-0.316	0.083	0.414	-0.067	0.088	0.318
14.H	0.364	0.151	0.382	-0.157	-0.122	0.033	0.430	0.146	0.451
15.H	-0.195	-0.104	-0.260	-0.192	-0.048	-0.086	0.287	0.158	0.404
16.H	-0.109	0.066	0.278	-0.218	0.119	0.491	-0.027	0.081	0.286
17.H	-0.338	-0.030	0.059	-0.454	-0.032	0.122	0.173	0.041	0.068

	1554.497			1600.858			3010.719		
1.Re	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000
2.C	-0.001	0.001	0.003	-0.002	0.001	0.001	-0.061	-0.003	-0.020
3.O	-0.001	0.000	0.000	0.000	-0.001	-0.001	0.000	-0.001	0.000
4.O	-0.001	-0.001	0.000	0.002	0.000	-0.001	0.001	0.000	0.000
5.N	-0.155	-0.009	0.034	0.014	0.032	0.102	0.000	0.000	0.000
6.H	-0.003	-0.004	-0.004	0.011	0.006	-0.005	0.306	-0.560	0.299
7.H	-0.004	0.002	-0.009	0.009	-0.008	-0.004	0.379	0.592	-0.066
8.C	0.127	-0.015	-0.104	0.013	-0.069	-0.242	0.000	0.000	0.000
9.C	0.146	0.025	0.039	-0.098	-0.092	-0.241	0.000	0.000	0.000
10.C	-0.219	-0.035	-0.022	0.119	0.087	0.243	0.000	0.000	0.000
11.C	-0.202	0.009	0.116	-0.028	0.083	0.281	0.000	0.000	0.000
12.C	0.407	0.030	-0.077	-0.032	-0.046	-0.136	0.000	0.000	0.000
13.H	-0.037	0.075	0.252	-0.228	0.040	0.218	0.004	0.001	0.001
14.H	-0.095	-0.017	-0.239	0.385	0.185	0.224	0.002	0.001	-0.002
15.H	-0.085	0.045	0.190	-0.267	-0.102	-0.225	0.000	0.000	0.000
16.H	-0.121	-0.077	-0.177	0.211	-0.075	-0.332	0.001	0.000	0.001
17.H	-0.632	-0.049	0.107	0.020	-0.039	-0.177	0.000	0.000	0.001

	3120.038			3127.878			3131.355		
1.Re	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000
2.C	0.006	0.094	-0.030	0.000	-0.002	0.001	0.000	0.001	0.000
3.O	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000
4.O	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000
5.N	0.000	0.000	0.000	0.001	0.000	0.000	-0.001	0.000	0.000
6.H	0.327	-0.545	0.303	-0.007	0.012	-0.007	0.004	-0.007	0.004
7.H	-0.396	-0.577	0.054	0.008	0.011	-0.001	-0.004	-0.006	0.001
8.C	0.001	0.000	0.000	0.001	0.000	-0.001	0.004	0.001	0.002
9.C	-0.002	0.000	0.002	-0.033	0.005	0.029	0.050	-0.007	-0.045
10.C	0.001	0.000	-0.001	-0.020	0.003	0.018	-0.015	0.002	0.013
11.C	0.000	0.000	0.000	0.034	0.007	0.011	-0.014	-0.001	0.001
12.C	0.000	-0.001	-0.002	-0.009	-0.018	-0.055	-0.006	-0.015	-0.047
13.H	-0.007	-0.001	-0.003	-0.008	-0.002	-0.003	-0.058	-0.014	-0.024
14.H	0.019	-0.002	-0.017	0.376	-0.050	-0.334	-0.571	0.076	0.508
15.H	-0.010	0.001	0.008	0.250	-0.025	-0.191	0.193	-0.020	-0.147
16.H	0.001	0.000	0.001	-0.401	-0.090	-0.124	0.145	0.030	0.040
17.H	0.003	0.006	0.018	0.097	0.204	0.634	0.081	0.170	0.529

	3142.090			3151.089			3183.121		
1.Re	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000
2.C	0.000	0.001	0.000	0.000	0.002	-0.001	0.000	-0.001	0.000
3.O	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000
4.O	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000
5.N	0.001	0.000	0.000	-0.001	0.000	0.000	-0.001	0.000	0.001
6.H	0.004	-0.006	0.004	0.007	-0.012	0.007	-0.002	0.004	-0.002
7.H	-0.004	-0.006	0.001	-0.007	-0.010	0.001	0.006	0.010	-0.001
8.C	0.010	0.002	0.001	0.009	0.002	0.003	0.078	0.019	0.034
9.C	-0.010	0.001	0.010	0.022	-0.004	-0.023	-0.006	0.001	0.004
10.C	-0.062	0.006	0.045	-0.021	0.001	0.013	0.010	-0.002	-0.012
11.C	-0.030	-0.007	-0.011	0.068	0.016	0.021	-0.004	-0.001	-0.001
12.C	0.008	0.008	0.023	0.003	0.011	0.034	-0.001	-0.001	-0.004
13.H	-0.115	-0.027	-0.046	-0.108	-0.027	-0.045	-0.879	-0.215	-0.374
14.H	0.111	-0.011	-0.100	-0.253	0.036	0.229	0.049	-0.009	-0.045
15.H	0.685	-0.068	-0.514	0.211	-0.021	-0.157	-0.125	0.014	0.099
16.H	0.345	0.078	0.108	-0.751	-0.170	-0.232	0.041	0.010	0.012
17.H	-0.044	-0.085	-0.263	-0.053	-0.114	-0.356	0.006	0.012	0.036

List of All Frequencies:

Intensities
==========

Frequency cm-1	Dipole Strength 1e-40 esu2 cm2	Absorption Intensity (degeneracy not counted) km/mole
35.992169	20.979148	0.189267
56.759059	72.522399	1.031776
131.387378	97.352784	3.206122
159.274985	18.996628	0.758407
199.102664	35.267497	1.760069
232.181514	73.023337	4.249789
263.425179	57.545105	3.799651
278.520721	53.500056	3.734993
298.732753	44.680770	3.345658
346.430573	4.530614	0.393415
420.621670	16.842356	1.775712
570.395485	14.467668	2.068487
633.134124	99.956193	15.862933
641.773114	199.035257	32.017661
674.279397	0.206976	0.034982
679.203693	116.806735	19.885934
737.264575	215.963734	39.910049
770.465936	19.164471	3.701079
835.762657	43.999154	9.217335
874.727954	216.666334	47.505349
925.117303	4.093361	0.949194
955.146326	7.351401	1.760022
974.624758	449.663340	109.850741
976.859998	0.170639	0.041782
999.394309	174.550524	43.725632
1016.672872	91.380320	23.286916
1046.772260	8.975477	2.354983
1066.206344	109.325763	29.217419
1081.812134	29.750570	8.067244
1170.124570	5.446826	1.597547
1212.591660	35.489829	10.786897
1291.813823	7.896480	2.556887
1326.135233	40.032041	13.306799
1341.809692	22.636477	7.613386
1452.489917	124.443516	45.306808
1464.350343	26.345247	9.669975
1554.496764	3.706640	1.444270
1600.858072	132.376781	53.118123
3010.719290	69.036840	52.098982
3120.038058	34.118171	26.682327
3127.878080	1.835836	1.439335
3131.355357	10.801202	8.477787
3142.090064	34.921150	27.503327
3151.089174	36.596941	28.905704
3183.120701	10.758541	8.583898

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

796.3920	3287.2736	3574.8408
0.1048	0.9851	0.1362
0.3097	0.0978	-0.9458
0.9450	-0.1414	0.2948

CCSD=-114.26777994

ATOMS cartesian

H	0.000000	0.000000	0.000000
C	0.000000	0.000000	1.114601
H	0.998974	0.000000	1.608945
O	-1.029812	0.000309	1.753984

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)

	1155.194			1221.641			1486.305		
1.H	0.000	-0.696	0.000	-0.682	0.000	0.135	0.705	0.000	-0.031
2.C	0.000	0.174	0.000	0.077	0.000	0.125	0.006	0.000	-0.004
3.H	0.000	-0.696	0.000	0.425	0.000	-0.555	0.339	0.000	-0.617
4.O	0.000	-0.043	0.000	-0.042	0.000	-0.067	-0.070	0.000	0.044

	1747.917			2808.569			2865.213		
1.H	0.430	0.000	0.247	-0.029	0.000	-0.697	-0.008	0.000	-0.712
2.C	-0.497	0.000	0.308	-0.048	0.000	0.028	0.053	0.000	0.087
3.H	-0.033	0.000	-0.493	0.627	0.000	0.343	-0.619	0.000	-0.314
4.O	0.348	0.000	-0.216	-0.002	0.000	0.001	0.000	0.000	-0.001

List of All Frequencies:

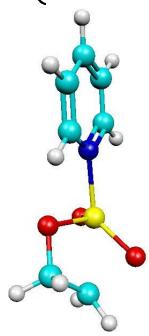
Intensities
==========

Frequency cm-1	Dipole Strength 1e-40 esu2 cm2	Absorption Intensity (degeneracy not counted) km/mole
1155.194135	16.334978	4.729896
1221.641110	29.923372	9.162885
1486.305023	38.721575	14.425771
1747.916769	208.411901	91.310629
2808.569463	84.021693	59.149989
2865.212626	176.544443	126.791161

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

6.4542	46.9846	53.4388
0.8496	0.5275	0.0001
-0.0001	0.0000	1.0000
-0.5275	0.8496	-0.0001

TS(I-IIa)



CCSD=-629.6479532

ATOMS cartesian

Re	-0.023980	0.013761	-0.005643
C	2.346505	-0.026449	0.047510
O	1.202021	1.316367	0.295417
C	2.099289	-1.104122	1.111500
O	-0.482043	-0.438801	-1.577141
O	0.666484	-1.275689	1.257282
H	2.469436	-0.776365	2.094414
H	2.592333	-2.047970	0.822407
H	2.355363	-0.344858	-1.005969
H	3.200050	0.631861	0.244927
N	-1.822175	-0.258354	1.033903
C	-2.983084	0.135810	0.440488
C	-4.202991	-0.013865	1.071247
C	-4.249662	-0.540217	2.362068
C	-3.059734	-0.924874	2.970307
C	-1.863410	-0.789546	2.284086
H	-0.912150	-1.101370	2.707467
H	-3.044524	-1.338073	3.978709
H	-5.200762	-0.641175	2.885831
H	-5.108109	0.297940	0.550638
H	-2.896971	0.571096	-0.552274

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)

	-482.538			67.915			93.909		
1.Re	0.040	0.008	0.006	0.009	0.036	0.032	0.001	-0.013	-0.008
2.C	-0.018	-0.348	-0.128	0.017	-0.203	-0.196	0.014	-0.001	-0.009
3.O	-0.430	0.259	-0.060	0.180	-0.077	-0.176	0.010	0.010	-0.140
4.C	-0.009	-0.114	0.047	0.004	-0.083	-0.077	0.022	0.126	0.117
5.O	0.012	0.076	-0.017	-0.129	0.011	0.079	-0.086	-0.074	0.036
6.O	-0.014	-0.032	0.045	-0.004	0.094	0.083	0.024	0.094	0.098
7.H	0.022	0.039	-0.020	0.137	-0.044	-0.141	-0.021	0.273	0.085
8.H	-0.062	-0.194	0.209	-0.140	-0.167	-0.046	0.067	0.106	0.260
9.H	0.197	-0.430	-0.092	-0.117	-0.298	-0.167	0.017	-0.124	0.030
10.H	-0.468	0.193	-0.032	0.107	-0.276	-0.336	0.011	0.025	-0.081
11.N	-0.004	-0.024	0.013	-0.005	0.072	0.048	0.009	0.037	0.034
12.C	0.011	-0.007	0.000	-0.008	-0.041	-0.020	0.038	0.199	0.082
13.C	0.006	0.008	0.000	-0.032	-0.151	-0.093	0.024	0.186	0.054
14.C	0.001	0.002	-0.004	-0.067	-0.167	-0.103	-0.009	-0.042	-0.038
15.C	-0.004	-0.005	0.004	-0.064	-0.028	-0.021	-0.037	-0.222	-0.093
16.C	-0.001	-0.005	0.011	-0.032	0.099	0.058	-0.019	-0.145	-0.043
17.H	0.003	-0.005	0.005	-0.031	0.197	0.127	-0.033	-0.237	-0.078
18.H	-0.012	-0.003	0.005	-0.086	-0.019	-0.018	-0.075	-0.400	-0.165
19.H	-0.003	0.000	-0.011	-0.095	-0.282	-0.177	-0.014	-0.075	-0.053
20.H	0.010	0.018	-0.002	-0.025	-0.240	-0.158	0.047	0.370	0.125
21.H	0.015	-0.028	-0.010	0.005	-0.058	-0.026	0.078	0.326	0.143

	100.439			119.802			147.709		
1.Re	0.013	-0.045	0.043	-0.014	0.009	0.041	0.002	0.036	0.006
2.C	0.019	0.133	-0.143	-0.051	0.077	-0.178	0.035	-0.152	-0.070
3.O	-0.034	0.009	-0.021	-0.058	0.063	0.015	0.111	-0.052	-0.052
4.C	0.167	0.113	-0.117	0.081	-0.054	-0.264	0.005	0.035	0.080
5.O	-0.275	0.256	0.039	0.229	-0.285	0.054	0.167	-0.017	-0.024
6.O	0.180	0.034	0.033	0.096	0.006	-0.041	-0.005	0.049	0.014
7.H	0.241	0.136	-0.153	0.272	-0.218	-0.282	-0.072	0.222	0.048
8.H	0.179	0.136	-0.163	-0.025	-0.041	-0.487	0.043	-0.011	0.296
9.H	-0.023	0.131	-0.144	-0.147	0.194	-0.215	-0.074	-0.286	-0.029
10.H	-0.004	0.183	-0.206	-0.045	0.072	-0.191	0.090	-0.182	-0.211
11.N	-0.029	-0.147	-0.073	-0.009	-0.005	0.018	-0.108	-0.152	-0.116

12.C	0.002	-0.099	-0.108	0.021	0.055	-0.002	-0.140	-0.126	-0.044
13.C	-0.009	0.072	-0.087	-0.004	0.092	-0.041	-0.098	-0.005	0.089
14.C	-0.042	0.205	-0.032	-0.045	0.055	-0.057	-0.004	0.121	0.148
15.C	-0.080	0.085	-0.032	-0.076	-0.028	-0.042	0.013	-0.021	0.019
16.C	-0.073	-0.103	-0.060	-0.049	-0.053	-0.003	-0.054	-0.177	-0.126
17.H	-0.096	-0.167	-0.048	-0.068	-0.114	0.001	-0.044	-0.259	-0.208
18.H	-0.115	0.142	-0.008	-0.128	-0.068	-0.057	0.083	0.009	0.031
19.H	-0.040	0.381	0.007	-0.056	0.084	-0.071	0.053	0.302	0.284
20.H	0.015	0.110	-0.104	0.021	0.170	-0.038	-0.136	0.011	0.165
21.H	0.039	-0.173	-0.136	0.070	0.067	0.009	-0.196	-0.139	-0.056

	183.803			206.370			230.632		
1.Re	-0.014	-0.005	0.009	-0.005	0.043	-0.008	-0.010	0.022	0.043
2.C	-0.063	-0.070	-0.127	0.000	-0.013	0.056	-0.058	-0.026	0.039
3.O	0.004	-0.040	0.110	0.044	0.043	-0.108	-0.017	0.056	0.021
4.C	0.040	0.147	0.057	-0.079	0.002	0.047	-0.050	-0.048	0.018
5.O	0.042	0.015	-0.015	-0.102	-0.114	0.073	-0.256	-0.226	0.192
6.O	0.043	-0.106	-0.106	-0.084	-0.113	-0.157	-0.050	-0.101	-0.051
7.H	-0.180	0.507	0.023	-0.254	0.076	0.088	-0.093	-0.035	0.029
8.H	0.296	0.175	0.400	0.047	0.031	0.163	-0.003	-0.028	0.029
9.H	-0.287	-0.210	-0.093	0.066	-0.038	0.067	-0.063	-0.008	0.031
10.H	0.010	-0.084	-0.399	0.017	-0.055	0.126	-0.042	-0.050	0.044
11.N	0.027	0.043	0.016	0.114	-0.175	0.138	0.012	0.058	-0.225
12.C	0.033	0.038	0.000	0.198	-0.164	0.018	-0.028	0.020	-0.182
13.C	0.025	0.001	-0.033	0.136	-0.001	-0.091	0.048	-0.017	-0.051
14.C	0.010	-0.024	-0.044	-0.009	0.134	-0.044	0.212	0.025	-0.021
15.C	0.008	0.023	-0.009	-0.098	-0.009	0.050	0.256	0.006	-0.135
16.C	0.021	0.051	0.019	-0.016	-0.170	0.140	0.157	0.006	-0.262
17.H	0.022	0.058	0.026	-0.071	-0.234	0.217	0.205	-0.002	-0.381
18.H	-0.008	0.021	-0.009	-0.235	0.038	0.071	0.359	-0.001	-0.140
19.H	-0.003	-0.073	-0.075	-0.057	0.325	-0.092	0.270	0.049	0.088
20.H	0.031	-0.012	-0.050	0.220	0.073	-0.192	-0.032	-0.089	0.047
21.H	0.047	0.046	0.005	0.306	-0.234	0.000	-0.096	0.029	-0.185

	245.203			285.186			334.302		
1.Re	-0.070	-0.001	0.001	0.047	0.033	-0.082	-0.069	0.019	-0.001
2.C	-0.064	-0.096	-0.051	0.023	-0.134	-0.020	0.406	-0.144	0.124
3.O	-0.020	-0.095	0.131	-0.034	-0.052	0.578	-0.045	-0.052	-0.020
4.C	-0.047	-0.037	0.002	0.093	-0.037	0.015	0.256	-0.093	0.071
5.O	0.112	0.104	-0.098	-0.308	-0.272	0.083	-0.006	-0.033	-0.015
6.O	-0.040	0.253	0.244	0.083	0.212	0.081	0.248	-0.009	-0.081
7.H	0.191	-0.133	-0.055	0.214	-0.058	-0.021	0.175	-0.164	0.128
8.H	-0.296	-0.136	-0.097	-0.067	-0.123	0.017	0.265	-0.110	0.112
9.H	-0.203	-0.131	-0.042	-0.242	-0.114	-0.040	0.452	-0.131	0.137
10.H	-0.024	-0.107	-0.192	0.020	-0.055	-0.282	0.185	0.092	0.261
11.N	0.152	-0.077	0.005	-0.031	-0.027	0.054	-0.003	0.015	0.011
12.C	0.217	-0.063	-0.066	-0.043	-0.077	0.048	0.015	0.080	0.009
13.C	0.214	0.024	-0.098	-0.064	-0.003	0.050	0.004	-0.040	-0.054
14.C	0.184	0.073	-0.081	-0.109	0.033	0.060	0.016	-0.016	-0.042
15.C	0.135	-0.024	-0.044	-0.117	-0.041	0.033	0.016	0.073	0.017
16.C	0.154	-0.081	0.003	-0.089	-0.037	0.053	0.009	-0.023	-0.011
17.H	0.146	-0.062	0.025	-0.104	-0.030	0.093	0.012	-0.097	-0.062
18.H	0.067	-0.006	-0.036	-0.128	-0.066	0.023	0.001	0.135	0.043
19.H	0.169	0.180	-0.088	-0.113	0.091	0.064	0.011	-0.052	-0.059
20.H	0.241	0.084	-0.107	-0.039	0.017	0.017	-0.008	-0.103	-0.070
21.H	0.283	-0.094	-0.072	-0.063	-0.150	0.015	0.054	0.193	0.061

	392.826			428.169			538.125		
1.Re	0.010	-0.004	-0.004	-0.003	-0.005	-0.002	0.006	-0.021	0.019
2.C	-0.064	0.015	-0.016	0.006	0.003	0.012	0.298	0.008	-0.153
3.O	0.001	0.009	0.007	-0.016	-0.006	-0.012	-0.037	-0.019	0.068
4.C	-0.028	0.008	-0.006	0.025	-0.007	0.005	-0.161	0.105	-0.113
5.O	-0.006	0.000	0.002	0.017	0.021	-0.019	-0.002	-0.013	0.009
6.O	-0.022	0.013	0.031	0.027	-0.036	0.012	-0.165	0.132	-0.101
7.H	0.003	0.014	-0.019	0.031	-0.011	0.004	-0.316	0.321	-0.128
8.H	-0.033	0.009	-0.017	0.049	0.010	-0.014	-0.200	-0.012	0.225
9.H	-0.067	0.015	-0.018	-0.001	0.011	0.009	0.524	0.185	-0.198
10.H	-0.034	-0.015	-0.034	-0.005	0.019	0.005	0.155	0.060	0.285
11.N	0.002	0.048	0.036	0.037	0.305	0.122	-0.004	0.023	0.004
12.C	0.019	0.174	0.069	-0.016	-0.080	-0.039	0.002	0.019	-0.008
13.C	-0.020	-0.197	-0.087	-0.020	-0.132	-0.045	0.007	-0.021	-0.008
14.C	0.006	0.016	0.003	0.016	0.213	0.094	0.016	0.014	0.008
15.C	0.012	0.143	0.076	-0.025	-0.186	-0.074	0.007	-0.016	0.000
16.C	-0.030	-0.196	-0.063	-0.011	-0.010	-0.010	-0.005	0.003	-0.007
17.H	-0.067	-0.476	-0.184	-0.014	-0.078	-0.048	-0.007	0.014	-0.002
18.H	0.023	0.313	0.147	-0.046	-0.446	-0.180	0.014	-0.029	-0.005
19.H	0.006	0.076	0.018	0.048	0.497	0.208	0.017	0.045	0.017
20.H	-0.036	-0.351	-0.150	-0.042	-0.351	-0.138	-0.003	-0.053	-0.008
21.H	0.077	0.488	0.212	-0.051	-0.252	-0.119	0.007	0.033	-0.002

	640.278			658.727			671.977		
1.Re	-0.001	-0.002	0.003	0.011	0.003	-0.007	0.005	-0.028	0.018
2.C	0.014	-0.004	-0.002	-0.018	0.011	-0.006	-0.079	-0.026	0.115
3.O	-0.001	0.003	0.000	0.008	-0.026	0.010	0.018	0.101	-0.021

4.C	-0.017	0.003	0.000	0.000	0.003	-0.004	0.022	-0.038	0.060
5.O	0.000	0.003	0.004	-0.003	0.003	-0.002	0.002	0.025	-0.006
6.O	-0.008	0.009	-0.002	-0.003	-0.015	0.010	0.015	0.276	-0.308
7.H	-0.019	0.008	-0.002	0.004	0.031	-0.016	-0.075	-0.348	0.199
8.H	-0.027	-0.004	0.006	0.014	0.008	0.005	-0.133	-0.075	-0.095
9.H	0.013	0.000	-0.004	0.073	0.034	-0.012	-0.410	-0.326	0.200
10.H	0.013	-0.006	0.006	-0.045	0.028	0.060	0.090	-0.105	-0.379
11.N	0.123	-0.036	0.070	-0.259	-0.017	0.194	-0.025	-0.037	-0.005
12.C	-0.063	-0.103	0.308	-0.166	0.010	-0.084	-0.014	0.056	0.012
13.C	-0.297	0.032	-0.028	-0.197	0.147	-0.175	-0.023	-0.050	-0.039
14.C	-0.127	0.054	-0.078	0.290	0.037	-0.194	0.027	0.042	0.002
15.C	0.089	0.146	-0.344	0.123	-0.049	0.146	0.005	-0.062	-0.015
16.C	0.280	-0.052	0.009	0.096	-0.088	0.198	0.011	0.051	0.031
17.H	0.196	-0.148	0.127	0.225	-0.097	-0.079	0.032	0.145	0.053
18.H	-0.025	0.139	-0.351	-0.269	-0.117	0.123	-0.017	-0.021	0.002
19.H	0.077	-0.129	0.254	0.317	-0.140	-0.183	0.046	0.175	0.061
20.H	-0.164	0.077	-0.247	-0.388	-0.106	0.003	-0.033	-0.014	-0.002
21.H	-0.034	-0.230	0.261	0.140	-0.130	-0.123	0.025	0.161	0.061

	675.622			743.961			761.773		
1.Re	0.000	0.006	-0.004	0.000	-0.003	0.000	-0.011	-0.012	-0.008
2.C	0.010	0.005	-0.017	0.021	0.000	0.006	0.177	0.011	0.004
3.O	-0.001	-0.016	0.005	0.002	0.024	0.002	0.070	0.228	0.035
4.C	0.003	0.007	-0.009	-0.001	0.003	0.001	-0.012	0.042	-0.003
5.O	-0.003	-0.005	0.005	0.001	0.005	-0.002	0.002	0.013	0.002
6.O	-0.003	-0.056	0.052	-0.006	0.002	-0.008	-0.069	-0.093	0.087
7.H	0.027	0.044	-0.030	-0.002	-0.036	0.014	0.059	-0.196	0.046
8.H	0.027	0.016	0.001	-0.012	0.004	-0.026	-0.076	0.071	-0.227
9.H	0.056	0.042	-0.027	-0.067	-0.030	0.014	-0.435	-0.190	0.057
10.H	-0.016	0.020	0.047	0.056	-0.022	-0.073	0.472	-0.215	-0.503
11.N	-0.028	-0.114	-0.034	0.015	0.125	0.055	-0.005	-0.020	-0.007
12.C	-0.010	0.072	0.033	-0.019	-0.121	-0.052	-0.004	0.020	0.004
13.C	-0.032	-0.110	-0.063	-0.014	0.031	0.006	-0.004	0.002	-0.005
14.C	0.024	0.057	0.005	-0.007	-0.108	-0.048	0.010	0.017	0.002
15.C	-0.005	-0.122	-0.047	0.007	0.011	0.005	0.000	-0.003	0.012
16.C	0.022	0.082	0.051	-0.011	-0.095	-0.036	0.003	0.001	0.016
17.H	0.077	0.468	0.212	0.025	0.187	0.088	-0.003	-0.034	0.001
18.H	0.003	0.161	0.068	0.059	0.528	0.216	-0.026	-0.084	-0.021
19.H	0.080	0.493	0.192	0.056	0.350	0.156	-0.001	-0.070	-0.037
20.H	-0.012	0.163	0.065	0.032	0.540	0.234	-0.021	-0.090	-0.032
21.H	0.060	0.490	0.221	0.017	0.202	0.092	-0.006	-0.049	-0.026

	801.729			842.608			882.173		
1.Re	-0.014	-0.014	-0.006	0.001	0.000	0.000	-0.002	0.001	0.000
2.C	-0.077	-0.044	-0.020	0.004	0.000	0.001	0.036	0.179	-0.149
3.O	0.135	0.191	0.036	-0.004	-0.003	0.000	0.013	0.000	0.001
4.C	-0.007	-0.101	-0.021	-0.006	0.003	-0.001	0.189	-0.211	0.157
5.O	0.007	0.014	0.008	0.000	0.002	0.005	0.000	-0.004	-0.010
6.O	0.080	0.038	0.013	0.001	0.000	0.002	-0.148	0.002	-0.007
7.H	-0.107	0.388	-0.138	-0.003	-0.007	0.001	-0.024	-0.014	0.170
8.H	0.133	-0.165	0.430	-0.008	0.005	-0.012	-0.021	-0.389	0.449
9.H	0.186	0.410	-0.154	-0.015	-0.004	0.002	-0.052	0.192	-0.165
10.H	-0.047	-0.230	0.469	0.011	-0.006	-0.010	-0.126	0.463	-0.369
11.N	0.002	0.003	0.002	-0.006	0.000	0.005	-0.004	0.000	0.003
12.C	-0.002	-0.009	-0.004	-0.011	-0.098	-0.034	0.003	-0.004	0.006
13.C	-0.001	0.002	-0.001	-0.003	-0.047	-0.017	0.004	-0.004	0.000
14.C	0.000	0.001	-0.001	0.000	0.012	0.001	0.002	0.000	-0.002
15.C	-0.001	-0.003	0.000	0.009	0.064	0.018	0.002	0.005	-0.003
16.C	0.001	0.005	0.004	0.010	0.071	0.028	0.000	0.001	-0.001
17.H	0.002	0.014	0.010	-0.045	-0.380	-0.177	0.001	-0.011	-0.015
18.H	-0.003	-0.009	-0.002	-0.055	-0.497	-0.211	0.001	-0.014	-0.011
19.H	0.000	0.006	0.000	-0.009	-0.064	-0.030	0.002	0.000	-0.002
20.H	-0.001	0.009	0.004	0.044	0.389	0.164	0.011	0.016	0.001
21.H	-0.002	0.037	0.016	0.054	0.508	0.238	0.003	0.002	0.009

	912.280			927.911			945.553		
1.Re	0.000	0.000	0.000	-0.009	-0.007	-0.004	0.000	0.000	-0.001
2.C	0.002	0.000	-0.001	-0.049	-0.041	-0.052	0.003	0.004	-0.003
3.O	0.004	0.002	0.002	0.099	0.055	0.041	-0.003	-0.001	-0.001
4.C	-0.005	-0.001	0.001	0.077	0.093	0.035	-0.006	-0.002	0.002
5.O	-0.002	0.000	-0.005	0.015	0.009	0.041	0.002	0.002	0.008
6.O	0.004	-0.002	0.003	-0.055	-0.014	-0.019	0.002	0.001	0.003
7.H	-0.005	0.006	-0.002	0.197	-0.222	0.085	-0.004	-0.001	0.001
8.H	-0.007	-0.002	0.000	-0.114	0.104	-0.307	-0.007	-0.003	0.003
9.H	0.009	0.010	-0.005	0.589	-0.383	0.047	-0.017	0.006	-0.003
10.H	0.003	-0.006	0.011	-0.365	0.303	0.143	0.017	-0.010	-0.012
11.N	-0.022	-0.012	-0.006	-0.008	0.005	0.009	-0.011	-0.011	0.005
12.C	0.014	0.079	0.055	0.004	-0.005	0.001	-0.004	-0.049	-0.030
13.C	-0.001	-0.069	-0.030	0.011	-0.001	0.005	0.024	0.081	0.043
14.C	0.005	-0.057	-0.031	-0.002	-0.003	0.000	-0.020	-0.035	-0.009
15.C	0.003	-0.004	0.009	0.001	0.005	-0.011	-0.014	-0.077	-0.047
16.C	-0.001	0.072	0.018	-0.001	0.004	-0.004	0.029	0.100	0.047
17.H	-0.042	-0.425	-0.251	0.002	-0.012	-0.022	-0.042	-0.564	-0.270
18.H	0.002	0.032	0.023	0.010	0.003	-0.012	0.037	0.432	0.161
19.H	0.042	0.381	0.121	0.001	0.014	0.008	0.005	0.195	0.082
20.H	0.064	0.424	0.151	0.014	-0.006	-0.003	-0.026	-0.444	-0.182

21.H	-0.067	-0.550	-0.228	-0.002	0.011	0.007	0.037	0.259	0.108

	968.706			974.431			997.711		
1.Re	0.000	0.000	0.001	0.004	0.000	0.008	-0.010	-0.013	-0.059
2.C	-0.004	-0.007	0.011	-0.041	-0.098	0.159	0.018	0.004	0.066
3.O	-0.002	0.000	-0.002	-0.020	0.000	-0.017	-0.086	-0.068	-0.009
4.C	0.023	0.003	-0.014	0.320	0.050	-0.207	0.053	-0.039	-0.077
5.O	-0.003	-0.003	-0.009	-0.023	-0.020	-0.079	0.202	0.201	0.697
6.O	-0.018	0.003	0.002	-0.250	0.040	0.025	-0.038	0.044	0.004
7.H	0.000	0.023	-0.013	-0.043	0.318	-0.180	-0.112	0.169	-0.085
8.H	0.044	0.009	0.005	0.609	0.127	0.042	0.222	-0.028	0.167
9.H	-0.013	0.005	0.009	-0.123	0.050	0.132	-0.233	0.037	0.063
10.H	0.006	-0.020	0.012	0.089	-0.281	0.208	0.164	-0.128	-0.118
11.N	0.017	-0.013	-0.010	-0.026	-0.001	0.017	-0.113	0.000	0.053
12.C	-0.001	0.014	-0.014	0.006	-0.012	0.018	0.019	-0.033	0.103
13.C	-0.004	0.064	0.021	0.016	-0.017	0.004	0.087	-0.017	0.039
14.C	-0.024	-0.121	-0.041	0.017	0.023	0.003	0.062	0.000	-0.050
15.C	0.009	0.084	0.040	0.003	-0.009	-0.032	0.007	0.041	-0.063
16.C	0.005	-0.024	0.002	-0.015	0.016	-0.009	-0.070	0.011	-0.064
17.H	0.015	0.136	0.097	-0.032	-0.069	-0.040	-0.030	0.163	-0.057
18.H	-0.051	-0.484	-0.191	0.032	0.116	0.016	0.020	-0.035	-0.103
19.H	0.074	0.650	0.287	0.010	-0.130	-0.044	0.057	0.092	-0.056
20.H	-0.055	-0.357	-0.144	0.029	0.068	0.034	0.129	-0.056	-0.034
21.H	0.015	0.040	-0.003	0.019	-0.010	0.022	-0.026	-0.113	0.077

	1011.977			1043.364			1057.002		
1.Re	0.006	0.003	0.009	-0.003	0.000	0.002	-0.001	0.000	0.000
2.C	0.005	0.017	-0.024	-0.002	-0.006	-0.006	-0.002	-0.002	0.001
3.O	0.015	0.018	0.001	0.000	0.001	0.000	-0.002	-0.002	-0.001
4.C	-0.057	0.001	0.034	0.005	0.005	0.005	0.004	-0.001	-0.002
5.O	-0.039	-0.042	-0.143	-0.002	-0.001	-0.002	0.001	0.001	0.007
6.O	0.051	-0.017	-0.001	-0.004	0.000	0.002	-0.004	0.002	-0.001
7.H	0.012	-0.066	0.035	0.007	-0.023	0.014	0.001	0.005	-0.003
8.H	-0.081	0.008	-0.035	0.011	0.016	-0.023	0.010	0.000	0.003
9.H	-0.010	0.023	-0.027	0.029	-0.009	-0.006	0.015	-0.008	0.002
10.H	0.033	-0.017	-0.019	-0.033	0.028	0.013	-0.014	0.012	0.003
11.N	-0.301	-0.026	0.163	0.239	0.018	-0.120	0.095	0.019	-0.075
12.C	0.026	-0.105	0.220	0.013	-0.133	0.262	-0.078	0.017	-0.010
13.C	0.229	-0.051	0.145	-0.190	0.095	-0.103	0.038	-0.050	0.108
14.C	0.196	0.007	-0.120	0.229	0.015	-0.109	0.110	0.021	-0.085
15.C	0.012	0.121	-0.246	0.006	-0.094	0.187	-0.080	0.029	-0.052
16.C	-0.215	0.050	-0.141	-0.277	0.117	-0.141	0.015	-0.031	0.078
17.H	-0.218	0.247	-0.046	-0.424	-0.075	-0.003	-0.091	-0.143	0.241
18.H	0.056	0.028	-0.314	0.205	-0.053	0.204	-0.589	0.089	-0.027
19.H	0.236	0.122	-0.076	0.279	-0.004	-0.039	0.069	0.074	-0.178
20.H	0.258	-0.248	0.036	-0.154	-0.059	-0.268	-0.182	-0.145	0.456
21.H	0.026	-0.032	0.281	-0.044	-0.003	0.332	-0.419	0.037	-0.035

	1076.031			1104.509			1166.149		
1.Re	0.001	0.000	0.002	0.001	0.000	-0.001	0.000	-0.001	0.000
2.C	0.001	-0.005	0.000	-0.022	-0.038	-0.072	0.019	-0.036	0.035
3.O	-0.001	0.001	-0.002	-0.038	-0.011	-0.006	0.016	0.000	-0.005
4.C	0.006	0.008	0.002	0.060	0.060	0.130	0.001	0.028	-0.009
5.O	-0.004	-0.005	-0.012	0.003	0.006	0.013	0.001	0.001	0.001
6.O	-0.003	0.000	-0.002	-0.034	-0.007	-0.038	-0.004	-0.009	-0.010
7.H	0.019	0.001	-0.002	0.378	-0.161	0.086	0.158	0.094	-0.091
8.H	-0.027	-0.005	-0.008	-0.181	0.038	-0.219	-0.204	-0.088	0.041
9.H	-0.007	0.023	-0.008	-0.047	0.494	-0.231	-0.178	0.158	-0.017
10.H	0.003	-0.015	0.019	0.266	-0.503	0.286	-0.158	0.203	-0.027
11.N	-0.058	0.044	-0.080	0.004	-0.001	0.002	-0.013	0.010	-0.020
12.C	-0.039	-0.054	0.117	0.003	0.002	-0.004	-0.002	0.000	0.000
13.C	0.063	-0.001	0.013	-0.002	0.000	-0.001	0.019	0.006	-0.022
14.C	-0.059	0.037	-0.075	0.002	-0.001	0.003	0.028	-0.019	0.039
15.C	0.008	-0.039	0.108	-0.003	0.002	-0.002	-0.032	0.004	0.001
16.C	0.104	-0.024	-0.015	-0.002	-0.001	0.001	-0.002	-0.002	0.002
17.H	0.305	0.166	-0.309	0.001	0.004	-0.002	0.048	0.033	-0.083
18.H	-0.171	-0.049	0.118	-0.013	0.002	-0.003	-0.453	0.039	0.020
19.H	-0.294	0.229	-0.461	0.013	-0.014	0.021	0.282	-0.220	0.460
20.H	0.273	0.049	-0.307	-0.014	-0.001	0.019	0.249	0.119	-0.356
21.H	-0.352	0.033	0.139	0.017	-0.004	-0.006	-0.118	0.022	-0.001

	1167.225			1207.317			1210.287		
1.Re	-0.001	-0.001	0.000	0.000	-0.001	0.000	0.001	0.001	0.000
2.C	0.034	-0.067	0.062	0.031	-0.065	-0.026	-0.013	0.027	0.008
3.O	0.028	-0.001	-0.010	0.023	0.002	-0.003	-0.011	-0.002	0.001
4.C	0.003	0.053	-0.013	-0.034	-0.012	0.031	0.016	0.004	-0.009
5.O	0.002	0.002	0.004	0.001	0.001	0.005	0.000	-0.001	0.000
6.O	-0.008	-0.017	-0.019	-0.007	0.024	0.009	0.003	-0.010	-0.006
7.H	0.291	0.162	-0.159	-0.242	-0.226	0.179	0.108	0.090	-0.071
8.H	-0.365	-0.153	0.067	0.490	0.325	-0.234	-0.195	-0.129	0.089
9.H	-0.331	0.302	-0.038	-0.209	0.363	-0.154	0.089	-0.142	0.059
10.H	-0.286	0.366	-0.043	-0.231	0.261	0.008	0.100	-0.118	0.004
11.N	0.007	-0.007	0.014	-0.004	0.001	-0.004	0.000	0.002	-0.004
12.C	0.000	0.001	-0.001	-0.026	0.006	-0.007	-0.068	0.015	-0.017

13.C	-0.010	-0.004	0.013	0.015	0.002	-0.007	0.034	0.006	-0.021
14.C	-0.013	0.010	-0.021	0.001	0.001	-0.002	0.007	0.001	-0.006
15.C	0.018	-0.001	-0.004	0.019	0.000	-0.008	0.042	0.002	-0.022
16.C	-0.003	0.001	-0.001	-0.006	-0.011	0.030	-0.025	-0.025	0.075
17.H	-0.038	-0.030	0.053	-0.086	-0.071	0.164	-0.221	-0.176	0.404
18.H	0.275	-0.020	-0.015	0.156	-0.007	-0.014	0.438	-0.025	-0.040
19.H	-0.158	0.125	-0.263	0.003	-0.001	0.001	0.012	-0.002	-0.001
20.H	-0.146	-0.075	0.207	0.102	0.047	-0.130	0.245	0.120	-0.317
21.H	0.076	-0.013	0.000	-0.175	0.020	-0.016	-0.472	0.055	-0.039

	1283.244			1326.255			1344.741		
1.Re	0.000	0.000	0.001	0.000	-0.001	0.001	0.000	0.000	0.000
2.C	-0.001	0.000	0.003	0.019	0.022	0.011	0.000	0.001	-0.001
3.O	-0.002	0.000	0.000	0.000	0.001	0.003	-0.001	0.000	0.000
4.C	0.000	-0.003	0.003	-0.070	-0.088	0.067	0.002	-0.001	0.002
5.O	-0.002	0.000	0.003	0.000	-0.001	-0.003	0.000	0.000	0.002
6.O	0.003	-0.001	-0.006	-0.027	0.018	-0.026	0.001	-0.001	-0.001
7.H	0.036	0.031	-0.022	0.584	0.461	-0.360	0.012	0.010	-0.005
8.H	-0.004	-0.001	-0.009	0.360	0.237	-0.278	-0.005	-0.002	-0.005
9.H	0.028	-0.015	0.005	0.076	-0.121	0.049	0.008	-0.010	0.002
10.H	-0.001	0.001	-0.009	0.029	0.045	-0.088	0.002	-0.005	0.007
11.N	-0.196	0.161	-0.327	0.001	-0.001	0.002	-0.026	0.019	-0.033
12.C	0.316	-0.054	0.042	-0.002	-0.001	0.002	-0.066	0.003	0.005
13.C	-0.112	-0.047	0.140	0.004	0.001	-0.004	-0.011	-0.007	0.020
14.C	-0.098	0.068	-0.140	-0.001	0.000	0.000	0.035	-0.031	0.065
15.C	0.185	-0.021	-0.011	-0.004	-0.001	0.002	0.032	-0.005	0.000
16.C	-0.102	-0.099	0.280	0.003	0.001	-0.004	0.040	0.019	-0.052
17.H	-0.132	-0.125	0.298	0.006	0.001	-0.008	-0.263	-0.185	0.477
18.H	0.017	0.009	0.008	0.007	-0.001	0.002	-0.328	0.032	0.020
19.H	0.184	-0.156	0.330	0.002	-0.003	0.004	-0.172	0.136	-0.278
20.H	-0.073	-0.045	0.071	-0.004	-0.001	0.009	0.173	0.092	-0.242
21.H	0.460	-0.050	0.051	-0.005	0.000	0.003	0.558	-0.078	0.028

	1426.448			1440.852			1448.147		
1.Re	-0.001	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.001	0.000	0.000
2.C	-0.033	-0.044	0.064	-0.018	-0.010	0.024	0.005	0.005	-0.011
3.O	-0.005	0.000	-0.003	0.000	0.001	0.000	0.000	0.000	0.000
4.C	0.014	-0.007	0.007	-0.053	0.040	-0.042	0.009	-0.004	0.004
5.O	0.000	-0.001	-0.001	0.000	0.000	-0.002	-0.001	0.000	0.000
6.O	0.007	-0.002	0.004	-0.011	-0.001	-0.005	0.002	0.001	0.000
7.H	-0.222	0.202	0.018	0.448	-0.486	-0.036	-0.062	0.039	0.014
8.H	-0.144	-0.004	-0.229	0.293	0.014	0.563	-0.039	-0.010	-0.052
9.H	0.515	0.391	-0.087	0.232	0.145	-0.031	-0.086	-0.067	0.012
10.H	0.130	-0.014	-0.620	0.053	-0.001	-0.261	-0.028	0.003	0.112
11.N	-0.002	0.001	-0.004	-0.006	0.003	-0.006	-0.046	0.048	-0.091
12.C	-0.006	-0.001	0.005	-0.004	-0.003	0.009	-0.105	-0.028	0.089
13.C	0.008	0.002	-0.005	0.012	0.003	-0.011	0.135	0.019	-0.085
14.C	0.000	0.001	-0.001	-0.004	0.001	-0.002	-0.001	0.018	-0.042
15.C	-0.010	0.000	0.003	-0.010	-0.002	0.006	-0.195	0.001	0.055
16.C	0.007	-0.001	-0.002	0.012	0.001	-0.005	0.128	-0.015	-0.004
17.H	-0.002	-0.006	0.015	-0.011	-0.019	0.036	0.011	-0.107	0.243
18.H	0.023	-0.003	0.002	0.017	-0.005	0.006	0.480	-0.071	0.030
19.H	0.011	-0.009	0.017	0.014	-0.014	0.030	0.260	-0.180	0.385
20.H	-0.006	-0.007	0.015	-0.017	-0.008	0.033	-0.101	-0.102	0.291
21.H	0.020	-0.002	0.008	0.011	-0.009	0.009	0.400	-0.106	0.121

	1468.101			1552.201			1598.456		
1.Re	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.001	0.000	0.000
2.C	-0.001	-0.001	0.002	0.000	-0.001	0.000	0.000	0.000	-0.001
3.O	0.000	0.000	0.000	-0.001	0.000	0.000	-0.001	0.000	0.000
4.C	-0.004	0.001	-0.003	-0.001	-0.001	-0.001	0.000	0.000	-0.001
5.O	0.000	0.000	0.001	-0.001	-0.001	-0.001	-0.001	0.000	0.001
6.O	-0.002	0.001	0.000	0.001	0.001	-0.001	0.000	0.000	0.001
7.H	0.030	-0.029	-0.005	0.000	-0.004	-0.001	-0.005	0.002	0.000
8.H	0.030	0.007	0.034	0.011	0.005	0.002	-0.001	-0.002	0.000
9.H	0.025	0.009	-0.003	0.008	-0.001	-0.001	0.001	-0.009	0.000
10.H	0.004	-0.001	-0.022	-0.002	0.001	-0.002	-0.004	0.003	0.006
11.N	0.077	0.001	-0.025	-0.063	0.063	-0.125	0.096	0.004	-0.039
12.C	-0.109	0.028	-0.042	0.106	-0.046	0.078	-0.268	-0.007	0.083
13.C	-0.040	-0.048	0.127	-0.022	0.092	-0.214	0.224	0.053	-0.181
14.C	0.074	0.007	-0.037	0.187	-0.155	0.328	-0.149	0.002	0.037
15.C	-0.080	0.028	-0.044	-0.136	0.075	-0.146	0.291	-0.010	-0.059
16.C	-0.055	-0.041	0.110	-0.028	-0.068	0.166	-0.200	-0.038	0.146
17.H	0.267	0.164	-0.452	0.207	0.085	-0.242	0.049	0.136	-0.342
18.H	0.338	-0.008	-0.076	0.087	0.061	-0.184	-0.375	0.060	-0.029
19.H	0.053	0.034	-0.112	-0.308	0.237	-0.493	-0.112	-0.052	0.150
20.H	0.301	0.130	-0.349	-0.226	-0.007	0.031	-0.126	-0.129	0.358
21.H	0.499	-0.048	-0.031	-0.222	0.011	0.082	0.376	-0.112	0.118

	2952.329			2999.314			3028.099		
1.Re	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000
2.C	0.000	0.001	0.000	-0.029	-0.005	0.063	0.012	0.007	0.000
3.O	0.000	0.000	0.000	-0.001	0.000	-0.001	0.000	0.000	0.000
4.C	-0.043	0.048	-0.020	0.000	-0.006	-0.011	-0.004	-0.057	-0.074

5.O	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000
6.O	-0.002	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	-0.001	0.000	0.000
7.H	0.165	0.171	0.463	0.035	0.033	0.093	0.278	0.247	0.752
8.H	0.361	-0.735	-0.233	-0.028	0.046	0.016	-0.217	0.434	0.121
9.H	0.005	0.000	0.005	-0.016	-0.257	-0.829	0.002	0.012	0.041
10.H	-0.007	0.001	-0.004	0.361	0.292	0.110	-0.143	-0.112	-0.036
11.N	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000
12.C	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000
13.C	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000
14.C	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000
15.C	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000
16.C	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000
17.H	-0.002	0.001	-0.002	-0.003	0.001	-0.001	0.003	-0.001	0.001
18.H	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000
19.H	0.001	0.000	-0.001	0.002	0.000	-0.002	-0.002	0.000	0.002
20.H	0.000	0.000	0.000	-0.001	0.000	-0.001	0.004	-0.001	0.003
21.H	0.000	0.000	-0.001	0.000	0.000	0.001	0.000	0.001	-0.004

	3083.750			3129.438			3139.381		
1.Re	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000
2.C	0.056	0.055	0.052	0.000	0.000	0.001	0.000	0.000	0.000
3.O	-0.001	0.000	-0.001	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000
4.C	0.001	0.008	0.011	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000
5.O	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000
6.O	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000
7.H	-0.040	-0.035	-0.110	-0.001	-0.001	-0.004	0.001	0.001	0.004
8.H	0.031	-0.060	-0.017	0.002	-0.003	-0.001	-0.001	0.001	0.001
9.H	0.007	-0.129	-0.458	0.000	-0.002	-0.007	0.000	0.001	0.003
10.H	-0.666	-0.525	-0.158	-0.003	-0.002	-0.001	0.003	0.002	0.001
11.N	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000
12.C	0.000	0.000	-0.001	0.000	-0.003	0.007	0.000	0.008	-0.019
13.C	0.001	0.000	0.000	-0.033	0.010	-0.016	0.048	-0.017	0.028
14.C	0.000	0.000	0.000	0.060	0.006	-0.033	0.001	0.002	-0.005
15.C	0.000	0.000	0.000	-0.002	-0.013	0.032	0.001	-0.023	0.056
16.C	0.000	0.000	0.000	-0.005	0.002	-0.003	-0.011	0.004	-0.006
17.H	-0.008	0.003	-0.004	0.062	-0.021	0.029	0.137	-0.046	0.064
18.H	0.000	0.000	0.000	-0.002	0.152	-0.372	-0.008	0.261	-0.636
19.H	0.002	0.000	-0.001	-0.688	-0.073	0.378	-0.028	-0.004	0.020
20.H	-0.007	0.001	-0.004	0.370	-0.126	0.209	-0.546	0.187	-0.313
21.H	-0.001	-0.003	0.010	0.007	0.036	-0.084	-0.020	-0.100	0.230

	3145.849			3161.484			3166.181		
1.Re	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000
2.C	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	-0.001	-0.001	-0.001
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.O	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000
6.O	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000
7.H	0.001	0.001	0.003	-0.001	0.000	-0.002	0.001	0.001	0.003
8.H	0.000	0.001	0.001	0.000	0.001	0.000	-0.001	0.003	0.001
9.H	0.000	0.001	0.004	0.000	0.000	0.000	0.001	0.002	0.008
10.H	0.004	0.003	0.001	-0.001	-0.001	0.000	0.005	0.004	0.002
11.N	0.000	0.000	0.000	-0.001	0.001	-0.001	0.000	0.000	0.000
12.C	0.000	0.010	-0.023	-0.008	-0.029	0.067	0.003	0.015	-0.035
13.C	0.034	-0.013	0.023	0.025	-0.007	0.011	-0.017	0.005	-0.009
14.C	0.047	0.005	-0.026	0.005	0.001	-0.004	-0.011	-0.001	0.006
15.C	-0.004	0.019	-0.044	-0.002	-0.003	0.009	-0.003	-0.009	0.022
16.C	0.016	-0.006	0.009	0.036	-0.011	0.014	0.066	-0.021	0.028
17.H	-0.198	0.065	-0.091	-0.407	0.132	-0.182	-0.731	0.237	-0.327
18.H	0.009	-0.203	0.494	0.000	0.040	-0.097	0.000	0.094	-0.230
19.H	-0.515	-0.054	0.284	-0.057	-0.007	0.033	0.108	0.012	-0.058
20.H	-0.392	0.136	-0.227	-0.257	0.086	-0.144	0.178	-0.061	0.101
21.H	-0.023	-0.115	0.262	0.070	0.327	-0.745	-0.036	-0.165	0.378

List of All Frequencies:

Intensities
==========

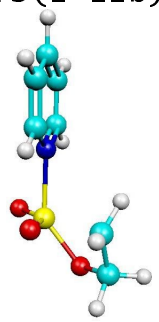
Frequency cm-1	Dipole Strength 1e-40 esu2 cm2	Absorption Intensity (degeneracy not counted) km/mole
-482.537678	248.636572	-30.072831
67.915160	367.825895	6.261626
93.909442	24.712772	0.581713
100.439420	111.209163	2.799773
119.802183	151.658839	4.554184
147.708900	14.924547	0.552568
183.803258	61.886730	2.851207
206.370234	33.145309	1.714538
230.631565	30.006305	1.734640
245.202870	31.078702	1.910146
285.186343	32.177994	2.300201
334.302167	32.743559	2.743741

392.825616	8.459798	0.832986
428.169453	25.251932	2.710119
538.124743	97.796807	13.191243
640.278291	4.439207	0.712447
658.726985	9.828158	1.622765
671.977481	181.507590	30.572262
675.621585	383.443696	64.935650
743.960779	216.182284	40.313287
761.773333	161.059003	30.753096
801.728693	243.201901	48.873390
842.608278	17.047220	3.600455
882.173226	47.390748	10.479137
912.279928	1.774913	0.405867
927.911186	114.709331	26.679840
945.552957	6.061260	1.436570
968.705909	6.099805	1.481105
974.430809	250.623328	61.213973
997.711237	251.517250	62.900009
1011.976967	11.491579	2.914932
1043.363893	2.766927	0.723622
1057.002329	22.954226	6.081583
1076.030561	22.720194	6.127943
1104.508977	188.277135	52.124860
1166.148981	8.097606	2.366948
1167.224634	12.789711	3.741909
1207.316798	28.737260	8.696503
1210.286686	28.349886	8.600380
1283.243669	2.000745	0.643545
1326.255448	16.566069	5.507122
1344.740550	12.702212	4.281500
1426.447981	51.854048	18.540296
1440.852091	7.579978	2.737571
1448.146955	121.581346	44.132411
1468.101304	56.001678	20.607966
1552.201485	5.234180	2.036455
1598.455537	8.565980	3.432066
2952.328588	4.181283	3.094228
2999.313603	21.712079	16.323052
3028.098714	0.831919	0.631435
3083.749817	21.777440	16.833097
3129.437785	0.397602	0.311884
3139.380796	8.761577	6.894525
3145.848841	40.130752	31.644135
3161.484357	24.941078	19.764431
3166.180712	4.552719	3.613139

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

1090.9157	3898.4457	4545.7682
-0.9268	0.3675	-0.0775
-0.0776	-0.3893	-0.9178
0.3674	0.8446	-0.3893

TS(I-IIb)



CCSD=-629.6234531

ATOMS cartesian

C	0.009475	0.000462	0.000135
C	1.384795	0.000280	0.000099
N	2.093034	1.159486	0.000034
C	1.427550	2.344976	-0.008102
C	0.045571	2.396886	-0.012184
C	-0.686862	1.211291	-0.001576
Re	4.221242	1.176383	-0.060984
O	4.160161	2.415734	-1.238422
O	4.224186	-0.608784	0.012955
O	5.717384	1.399658	1.029087
C	5.643417	0.372746	2.081550
C	4.302188	-0.318015	2.006155
H	4.285229	-1.406570	2.080324
H	3.443744	0.181043	2.468027
H	6.481862	-0.307533	1.873874
H	5.789556	0.871625	3.053187
H	1.963948	-0.919812	-0.011045
H	-0.519433	-0.952674	-0.004160
H	-1.777397	1.232358	0.003371
H	-0.446533	3.369313	-0.025914
H	2.037912	3.244846	-0.020484

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)

	-446.797			37.184			61.980		
1.C	-0.002	-0.024	-0.025	0.023	0.015	0.190	-0.092	0.015	-0.115
2.C	-0.005	-0.028	-0.018	0.022	0.056	0.179	-0.091	0.014	0.064
3.N	-0.013	-0.026	-0.016	-0.004	0.074	0.009	-0.087	0.012	0.150
4.C	0.003	-0.026	-0.006	-0.046	0.053	-0.180	-0.086	0.012	0.090
5.C	0.000	-0.022	-0.002	-0.047	0.010	-0.189	-0.085	0.015	-0.086
6.C	0.002	-0.020	-0.017	-0.015	-0.007	0.002	-0.089	0.017	-0.209
7.Re	0.004	-0.068	0.022	-0.001	0.122	0.090	-0.075	0.003	0.124
8.O	0.001	-0.015	0.034	0.008	0.255	0.228	-0.130	-0.019	0.103
9.O	0.018	0.070	-0.449	0.051	0.116	-0.122	-0.086	0.006	0.144
10.O	0.005	-0.029	-0.008	-0.026	0.036	0.141	0.050	-0.024	-0.046
11.C	0.015	-0.030	0.063	0.003	-0.096	0.012	0.193	-0.052	-0.066
12.C	-0.071	0.168	0.284	0.028	-0.131	-0.085	0.153	0.012	0.144
13.H	-0.192	0.135	-0.317	0.063	-0.140	-0.217	0.107	0.014	0.155
14.H	0.090	0.101	0.632	0.007	-0.212	-0.034	0.243	0.065	0.252
15.H	-0.087	-0.121	-0.037	0.028	-0.041	-0.067	0.127	-0.082	-0.237
16.H	0.235	0.047	-0.015	-0.021	-0.213	0.075	0.390	-0.091	-0.075
17.H	-0.007	-0.028	-0.027	0.045	0.070	0.296	-0.093	0.012	0.129
18.H	-0.005	-0.023	-0.035	0.047	0.001	0.326	-0.096	0.018	-0.200
19.H	0.002	-0.017	-0.033	-0.015	-0.032	0.014	-0.089	0.023	-0.358
20.H	0.002	-0.021	-0.001	-0.074	-0.006	-0.350	-0.081	0.016	-0.137
21.H	0.003	-0.024	-0.031	-0.075	0.070	-0.318	-0.085	0.013	0.173

	107.553			141.813			182.493		
1.C	0.089	-0.051	-0.026	0.080	-0.011	0.078	-0.021	0.023	-0.018
2.C	0.087	0.028	-0.050	0.076	0.003	0.280	-0.018	0.041	-0.102
3.N	0.025	0.064	-0.038	0.063	0.012	0.272	-0.010	0.036	-0.093
4.C	-0.034	0.027	-0.017	0.055	0.005	0.225	-0.027	0.028	-0.080
5.C	-0.040	-0.052	0.014	0.055	-0.012	0.021	-0.034	0.015	0.037
6.C	0.022	-0.090	0.023	0.066	-0.020	-0.127	-0.032	0.014	0.099
7.Re	0.057	0.110	0.035	0.029	-0.012	-0.098	0.081	-0.092	0.004
8.O	0.080	0.054	-0.020	-0.165	0.045	-0.026	0.052	0.051	0.154
9.O	-0.094	0.108	0.084	-0.100	-0.022	-0.130	-0.147	-0.107	-0.016
10.O	0.086	-0.061	0.030	0.107	-0.109	-0.183	0.237	-0.254	-0.218
11.C	0.016	-0.135	-0.042	-0.068	0.008	-0.079	0.019	0.037	0.042
12.C	-0.137	0.176	0.071	-0.087	0.029	-0.173	0.054	-0.071	-0.075
13.H	-0.389	0.185	0.145	-0.093	0.029	-0.160	0.149	-0.075	-0.108

14.H	-0.005	0.409	0.066	-0.100	0.022	-0.189	0.010	-0.180	-0.045
15.H	-0.171	-0.309	-0.233	-0.056	-0.037	0.124	0.143	0.056	0.502
16.H	0.279	-0.258	-0.020	-0.202	0.123	-0.119	-0.319	0.364	-0.076
17.H	0.136	0.061	-0.071	0.084	0.009	0.371	-0.020	0.040	-0.149
18.H	0.152	-0.087	-0.005	0.097	-0.020	0.062	-0.007	0.015	-0.025
19.H	0.021	-0.159	0.032	0.065	-0.037	-0.378	-0.032	0.010	0.219
20.H	-0.096	-0.079	0.037	0.047	-0.017	-0.064	-0.041	0.013	0.083
21.H	-0.083	0.061	-0.018	0.046	0.012	0.293	-0.038	0.035	-0.135

	190.786			195.463			231.584		
1.C	0.055	0.017	0.029	0.028	-0.051	-0.032	0.178	-0.003	-0.009
2.C	0.039	0.125	0.090	0.024	-0.066	-0.048	0.153	0.026	-0.126
3.N	-0.031	0.180	0.067	0.019	-0.062	-0.037	0.052	0.066	-0.072
4.C	-0.107	0.148	0.062	0.038	-0.050	-0.020	0.098	0.079	-0.103
5.C	-0.116	0.026	0.001	0.045	-0.044	-0.010	0.115	0.034	-0.006
6.C	-0.028	-0.033	-0.049	0.042	-0.043	-0.001	0.178	-0.006	0.150
7.Re	-0.153	-0.068	-0.115	-0.059	-0.065	-0.026	-0.208	0.018	0.031
8.O	0.582	-0.025	-0.115	-0.021	0.314	0.359	-0.376	-0.054	-0.041
9.O	-0.151	-0.051	-0.055	0.024	-0.105	0.133	-0.316	0.023	-0.025
10.O	-0.069	-0.215	-0.185	-0.106	0.047	0.018	-0.099	-0.107	-0.078
11.C	-0.015	-0.024	-0.027	0.009	-0.041	-0.078	-0.112	0.017	0.021
12.C	0.040	-0.130	0.080	-0.093	0.181	0.016	-0.069	-0.088	0.045
13.H	0.092	-0.134	0.001	-0.283	0.198	0.229	0.012	-0.096	-0.062
14.H	0.031	-0.174	0.110	0.001	0.399	-0.039	-0.086	-0.185	0.113
15.H	0.047	0.010	0.107	-0.145	-0.154	-0.341	-0.042	0.058	0.178
16.H	-0.058	0.151	-0.110	0.284	-0.202	-0.039	-0.232	0.141	-0.024
17.H	0.101	0.167	0.134	0.027	-0.064	-0.059	0.209	0.067	-0.186
18.H	0.134	-0.027	0.047	0.020	-0.046	-0.024	0.193	-0.011	0.051
19.H	-0.030	-0.114	-0.143	0.043	-0.041	0.011	0.179	-0.052	0.302
20.H	-0.200	-0.017	-0.020	0.047	-0.042	0.003	0.060	0.005	0.003
21.H	-0.162	0.189	0.093	0.055	-0.062	-0.013	0.112	0.066	-0.161

	252.597			304.079			320.475		
1.C	0.132	0.048	0.005	0.084	-0.025	0.038	-0.045	0.022	-0.035
2.C	0.120	0.225	0.036	0.076	0.016	0.038	-0.037	0.029	-0.081
3.N	0.014	0.271	-0.002	0.027	0.036	0.086	-0.044	0.032	-0.070
4.C	-0.110	0.219	-0.069	0.011	0.033	0.056	-0.072	0.029	-0.029
5.C	-0.136	0.038	-0.029	0.010	-0.011	0.056	-0.074	0.019	0.013
6.C	-0.014	-0.043	-0.001	0.056	-0.041	0.088	-0.065	0.013	0.012
7.Re	0.052	-0.154	-0.023	-0.023	-0.043	0.168	-0.046	0.080	-0.184
8.O	-0.132	-0.194	-0.054	0.103	-0.147	0.060	-0.297	0.169	-0.106
9.O	0.017	-0.154	0.075	0.500	-0.020	0.048	0.474	0.076	-0.040
10.O	-0.053	0.007	0.109	0.169	-0.047	-0.143	0.070	-0.422	-0.125
11.C	0.025	-0.109	0.014	-0.135	-0.013	-0.092	0.098	-0.116	0.126
12.C	0.000	-0.055	0.042	-0.210	0.127	-0.233	0.105	-0.058	0.168
13.H	-0.041	-0.050	0.118	-0.297	0.140	-0.048	-0.080	-0.056	0.137
14.H	0.015	0.008	0.006	-0.215	0.185	-0.291	0.102	0.104	-0.019
15.H	-0.038	-0.131	-0.170	-0.205	-0.135	0.019	0.123	-0.158	0.345
16.H	0.157	-0.249	0.065	-0.188	0.029	-0.112	0.077	0.132	0.006
17.H	0.195	0.275	0.077	0.102	0.031	0.013	-0.025	0.032	-0.125
18.H	0.276	-0.032	0.042	0.111	-0.040	0.040	-0.037	0.018	-0.053
19.H	-0.015	-0.181	-0.033	0.056	-0.085	0.111	-0.065	0.000	0.049
20.H	-0.258	-0.022	-0.054	-0.031	-0.031	0.045	-0.077	0.019	0.046
21.H	-0.206	0.284	-0.154	0.000	0.041	0.053	-0.085	0.036	-0.034

	381.384			428.855			495.590		
1.C	-0.006	0.001	-0.186	0.015	-0.006	0.166	-0.027	-0.019	0.012
2.C	-0.003	0.003	0.199	0.010	-0.004	0.029	-0.025	-0.023	-0.002
3.N	0.013	-0.004	0.004	-0.013	-0.001	-0.363	-0.009	-0.027	-0.002
4.C	0.007	-0.007	-0.171	-0.001	0.007	0.038	-0.019	-0.028	0.024
5.C	0.005	-0.003	0.234	0.001	0.017	0.139	-0.019	-0.028	0.038
6.C	-0.009	0.003	0.008	0.021	-0.001	-0.275	-0.030	-0.022	0.019
7.Re	-0.008	0.015	0.008	-0.009	-0.009	-0.013	-0.040	-0.036	-0.003
8.O	-0.006	0.026	0.015	-0.025	-0.018	-0.021	-0.007	-0.054	-0.017
9.O	0.002	0.017	-0.005	-0.004	-0.009	-0.005	-0.071	-0.046	-0.105
10.O	-0.006	0.005	0.007	-0.004	-0.015	-0.042	0.007	-0.127	0.156
11.C	-0.001	-0.005	-0.003	-0.008	0.002	-0.027	0.169	-0.066	0.124
12.C	0.001	-0.007	-0.008	-0.005	-0.006	-0.017	0.111	0.141	-0.267
13.H	0.003	-0.007	-0.017	0.002	-0.006	-0.022	-0.263	0.165	-0.078
14.H	0.003	-0.011	0.001	0.003	-0.014	0.006	0.162	0.440	-0.498
15.H	0.001	0.000	-0.009	0.005	0.010	0.000	0.241	-0.026	0.269
16.H	-0.003	-0.012	0.001	-0.029	0.031	-0.040	-0.051	-0.129	0.198
17.H	-0.010	-0.003	0.479	0.018	0.002	0.132	-0.037	-0.029	-0.019
18.H	0.011	-0.007	-0.403	0.000	0.003	0.399	-0.025	-0.020	0.006
19.H	-0.009	0.002	-0.057	0.019	-0.001	-0.624	-0.030	-0.015	0.033
20.H	0.015	0.005	0.419	-0.007	0.016	0.369	-0.011	-0.024	0.066
21.H	0.001	-0.010	-0.517	0.010	0.001	0.171	-0.024	-0.024	0.047

	628.949			647.096			677.130		
1.C	-0.130	0.059	0.066	-0.210	-0.335	-0.083	-0.022	-0.004	0.178
2.C	-0.070	0.287	-0.059	-0.207	0.057	0.018	-0.024	-0.015	0.029
3.N	0.285	0.069	0.030	-0.177	0.105	-0.076	-0.028	0.000	0.082
4.C	0.180	-0.057	-0.040	0.150	0.263	-0.004	-0.023	0.003	-0.057
5.C	0.161	-0.364	0.033	0.191	-0.077	-0.095	-0.021	0.018	0.070

6.C	-0.294	-0.091	-0.057	0.197	-0.139	-0.033	-0.004	0.010	0.033
7.Re	-0.008	0.001	0.008	0.007	-0.005	-0.020	-0.038	-0.020	-0.030
8.O	-0.009	-0.001	-0.002	0.005	-0.004	-0.026	-0.034	-0.026	-0.071
9.O	0.008	0.002	0.007	0.014	0.018	0.005	-0.024	0.115	0.149
10.O	0.013	0.009	0.001	0.000	0.009	-0.002	0.213	0.136	0.019
11.C	-0.013	0.023	-0.002	-0.002	-0.005	0.012	0.035	0.006	0.084
12.C	-0.007	0.003	0.028	-0.009	0.011	-0.026	-0.037	0.102	-0.009
13.H	0.022	0.002	0.028	-0.008	0.006	-0.087	0.109	0.063	-0.555
14.H	-0.032	-0.016	0.002	0.007	-0.022	0.039	0.017	-0.275	0.503
15.H	-0.032	0.001	-0.016	0.009	0.004	0.029	-0.052	-0.093	0.070
16.H	0.013	0.003	0.005	-0.023	0.013	0.005	0.055	-0.037	0.094
17.H	-0.235	0.189	-0.116	0.010	0.194	0.169	-0.030	-0.016	-0.140
18.H	0.208	-0.130	0.080	-0.258	-0.311	-0.062	-0.051	0.012	0.057
19.H	-0.290	0.175	-0.039	0.205	0.224	0.157	-0.005	0.019	-0.134
20.H	0.317	-0.287	0.060	-0.115	-0.235	-0.016	-0.026	0.012	-0.086
21.H	-0.089	0.124	-0.016	0.214	0.227	0.094	-0.011	-0.008	-0.287

	681.645			705.400			745.719		
1.C	-0.035	-0.056	0.306	0.007	-0.022	-0.019	-0.029	0.011	0.208
2.C	-0.032	-0.016	0.000	0.008	-0.007	-0.041	-0.027	0.020	0.272
3.N	-0.045	0.009	0.262	-0.002	0.012	-0.012	-0.007	0.001	-0.028
4.C	-0.006	0.036	0.053	-0.011	0.017	-0.002	-0.017	-0.008	0.278
5.C	0.003	0.023	0.326	-0.010	-0.001	0.033	-0.015	-0.016	0.186
6.C	0.043	-0.010	0.109	0.012	-0.019	-0.002	-0.042	0.004	0.369
7.Re	-0.003	0.005	0.071	-0.013	0.038	-0.039	-0.030	-0.008	0.030
8.O	-0.036	0.013	0.088	-0.015	0.047	0.013	-0.077	-0.006	0.030
9.O	-0.010	-0.041	0.004	0.011	-0.058	-0.150	-0.030	-0.008	0.030
10.O	-0.073	-0.056	0.007	0.244	0.164	-0.002	0.036	0.004	-0.036
11.C	0.034	-0.011	-0.012	-0.006	-0.031	-0.046	0.062	-0.021	-0.031
12.C	0.057	-0.043	0.055	0.040	-0.102	0.052	0.057	-0.017	0.034
13.H	-0.009	-0.028	0.258	-0.070	-0.068	0.598	0.015	-0.014	0.066
14.H	0.047	0.104	-0.129	-0.097	0.255	-0.602	0.090	0.033	0.041
15.H	0.063	0.031	-0.038	-0.016	-0.055	-0.002	0.073	-0.005	-0.036
16.H	0.059	0.007	-0.022	-0.083	-0.136	0.029	0.063	-0.009	-0.037
17.H	0.016	0.018	-0.508	0.032	0.007	-0.039	-0.039	0.017	-0.121
18.H	-0.088	-0.024	-0.098	0.007	-0.023	0.022	-0.019	0.011	-0.535
19.H	0.043	0.038	-0.335	0.012	-0.028	0.038	-0.044	0.033	-0.148
20.H	-0.054	-0.011	0.014	-0.034	-0.011	0.117	0.008	-0.015	-0.494
21.H	0.025	0.010	-0.410	-0.015	0.021	0.055	-0.028	-0.005	-0.077

	787.682			841.858			859.761		
1.C	-0.016	0.006	0.021	-0.023	-0.016	0.174	0.008	-0.014	0.022
2.C	-0.011	0.008	0.034	-0.014	-0.038	0.156	0.006	-0.026	0.027
3.N	-0.009	0.017	-0.001	0.012	-0.042	-0.028	0.019	-0.022	0.012
4.C	-0.015	0.022	-0.018	0.016	-0.039	-0.226	0.017	-0.018	0.012
5.C	-0.015	0.019	-0.030	0.017	-0.001	-0.184	0.013	-0.005	0.002
6.C	-0.007	0.012	-0.008	0.004	0.011	-0.012	0.014	-0.006	0.013
7.Re	-0.013	0.025	0.025	0.000	-0.090	-0.056	0.016	-0.073	0.020
8.O	-0.002	-0.019	0.005	0.009	-0.193	-0.155	0.011	0.017	-0.002
9.O	-0.011	-0.060	0.036	-0.033	-0.090	0.094	-0.016	0.404	0.048
10.O	0.024	-0.038	0.095	0.010	-0.025	-0.097	0.034	-0.126	0.120
11.C	-0.056	0.182	0.057	0.011	0.056	-0.002	-0.068	0.086	-0.145
12.C	-0.017	0.126	0.047	-0.011	0.081	0.072	0.076	-0.066	0.051
13.H	0.518	0.120	0.085	-0.050	0.086	0.135	0.143	-0.041	0.460
14.H	-0.342	-0.298	-0.108	0.011	0.142	0.045	-0.165	0.130	-0.651
15.H	-0.368	-0.128	-0.235	0.007	0.036	0.050	-0.121	-0.022	-0.057
16.H	0.414	-0.071	0.119	0.026	0.149	-0.052	-0.028	-0.120	-0.031
17.H	-0.001	0.013	0.041	-0.014	-0.035	-0.301	-0.024	-0.045	-0.012
18.H	-0.024	0.010	-0.026	-0.037	-0.006	-0.487	-0.002	-0.009	-0.010
19.H	-0.008	0.017	-0.040	0.005	0.039	0.077	0.014	-0.011	0.028
20.H	-0.023	0.014	-0.078	0.033	0.013	0.401	0.017	-0.002	0.053
21.H	-0.018	0.023	-0.024	0.021	-0.036	0.395	0.034	-0.029	0.038

	875.783			933.055			952.363		
1.C	0.014	-0.009	0.012	-0.010	-0.001	0.041	0.012	-0.009	-0.074
2.C	0.012	-0.004	0.040	-0.014	0.002	-0.077	0.004	-0.012	0.132
3.N	0.004	-0.001	0.022	0.000	-0.001	0.012	0.009	-0.008	0.018
4.C	0.000	-0.012	0.013	-0.006	-0.001	-0.110	0.016	-0.005	-0.059
5.C	0.001	-0.015	-0.007	-0.007	0.005	0.083	0.013	-0.011	0.067
6.C	0.004	-0.015	0.001	0.004	0.002	0.100	0.013	-0.011	0.020
7.Re	0.009	0.002	0.054	-0.006	-0.004	-0.041	0.011	-0.008	0.026
8.O	0.010	0.021	0.015	-0.023	-0.014	-0.032	0.017	-0.036	0.037
9.O	-0.001	0.085	0.072	-0.007	0.005	-0.039	0.014	-0.022	0.046
10.O	-0.070	0.097	-0.108	0.006	-0.003	-0.067	0.023	-0.018	0.069
11.C	0.064	-0.003	0.318	0.025	-0.004	-0.055	0.065	0.073	-0.003
12.C	-0.043	-0.028	0.051	0.023	-0.002	-0.041	-0.046	-0.041	0.068
13.H	-0.114	-0.034	-0.025	0.020	-0.001	-0.032	-0.236	-0.055	-0.211
14.H	-0.345	-0.003	-0.564	0.034	0.005	-0.027	-0.084	0.026	-0.068
15.H	-0.133	-0.101	-0.130	0.018	-0.006	-0.074	0.067	0.056	0.038
16.H	0.548	0.089	0.181	0.045	0.001	-0.062	0.086	0.106	-0.024
17.H	0.012	-0.004	0.024	-0.033	-0.012	0.524	-0.004	-0.008	-0.566
18.H	0.020	-0.011	0.058	-0.031	0.012	-0.063	-0.009	0.004	0.519
19.H	0.004	-0.025	-0.006	0.003	0.008	-0.352	0.013	-0.008	-0.057
20.H	0.002	-0.015	-0.020	-0.017	-0.007	-0.331	0.008	-0.018	-0.304
21.H	0.001	-0.013	-0.002	-0.024	0.017	0.645	0.008	0.005	0.327

	957.277			968.380			979.548		
1.C	0.010	-0.020	0.081	-0.020	-0.037	0.016	0.010	0.043	-0.009
2.C	0.020	-0.014	-0.044	0.021	-0.012	-0.012	-0.011	0.058	-0.034
3.N	0.030	-0.013	0.026	0.057	0.005	-0.021	-0.089	0.028	-0.032
4.C	0.012	-0.009	0.063	-0.004	0.006	-0.018	-0.042	-0.030	0.009
5.C	0.011	-0.001	-0.029	-0.020	0.043	0.083	0.006	-0.033	0.011
6.C	0.016	-0.010	0.005	-0.004	0.010	-0.158	-0.001	0.010	-0.072
7.Re	0.015	-0.009	0.033	0.004	0.004	0.010	-0.023	0.076	-0.084
8.O	0.023	-0.035	0.048	0.009	0.026	0.002	-0.004	-0.574	0.607
9.O	0.019	-0.036	0.052	0.003	0.002	-0.003	-0.005	0.214	-0.041
10.O	0.036	-0.034	0.106	-0.007	0.000	0.016	-0.054	0.040	-0.078
11.C	0.130	0.125	-0.025	-0.014	-0.014	0.012	-0.042	-0.016	0.025
12.C	-0.110	-0.095	0.093	-0.012	-0.006	0.003	0.027	0.039	-0.053
13.H	-0.451	-0.121	-0.394	-0.009	-0.007	-0.016	0.103	0.045	0.018
14.H	-0.170	0.049	-0.166	-0.017	-0.003	-0.013	0.036	0.010	-0.015
15.H	0.142	0.108	0.032	-0.001	-0.001	0.018	-0.072	-0.025	-0.055
16.H	0.188	0.178	-0.062	-0.028	-0.022	0.019	0.067	0.013	-0.008
17.H	0.025	-0.014	0.444	0.050	0.002	0.025	0.051	0.099	-0.034
18.H	0.017	-0.024	-0.292	0.009	-0.059	-0.303	0.058	0.019	-0.177
19.H	0.016	-0.014	0.048	0.002	0.008	0.737	0.005	0.030	0.280
20.H	0.008	0.001	0.182	-0.009	0.040	-0.539	0.044	-0.021	-0.102
21.H	0.014	-0.013	-0.201	-0.012	0.014	0.141	-0.065	-0.023	-0.156

	1005.480			1033.072			1035.281		
1.C	-0.128	-0.250	-0.033	-0.007	-0.071	0.055	0.071	0.092	0.086
2.C	0.113	-0.205	0.000	-0.035	0.110	0.066	0.093	-0.176	0.063
3.N	0.364	-0.004	-0.002	0.124	-0.016	0.043	-0.137	-0.013	0.043
4.C	0.095	0.189	0.027	-0.050	-0.141	0.021	0.115	0.152	0.003
5.C	-0.105	0.223	-0.042	0.000	0.040	-0.008	0.065	-0.111	0.025
6.C	-0.180	-0.011	0.075	0.166	-0.014	0.045	-0.154	-0.012	0.024
7.Re	0.017	0.006	0.002	0.030	-0.016	0.050	0.014	-0.015	0.042
8.O	0.010	-0.049	0.055	0.034	-0.051	0.020	0.016	-0.045	0.009
9.O	0.020	0.019	0.004	0.027	-0.052	0.117	0.008	-0.047	0.106
10.O	0.003	0.012	-0.022	0.019	0.019	0.037	0.006	0.015	0.031
11.C	-0.003	-0.018	0.013	-0.095	-0.023	0.033	-0.090	-0.013	0.025
12.C	0.050	0.012	0.007	0.182	0.092	0.189	0.150	0.080	0.166
13.H	0.023	0.010	-0.073	-0.056	0.060	-0.637	-0.074	0.051	-0.567
14.H	0.057	0.016	0.016	-0.060	0.170	-0.400	-0.067	0.159	-0.369
15.H	0.001	-0.006	0.000	-0.126	-0.082	0.139	-0.124	-0.072	0.117
16.H	-0.016	-0.017	0.013	-0.159	0.023	0.020	-0.136	0.040	0.005
17.H	0.144	-0.209	-0.026	-0.088	0.085	0.110	0.174	-0.137	0.143
18.H	-0.218	-0.229	0.225	0.010	-0.081	0.136	0.020	0.122	-0.008
19.H	-0.204	0.054	-0.356	0.172	-0.003	-0.022	-0.161	-0.029	0.103
20.H	-0.134	0.240	0.202	0.032	0.054	0.032	0.003	-0.143	-0.068
21.H	0.092	0.217	-0.086	-0.120	-0.103	-0.044	0.209	0.101	0.021

	1061.983			1079.525			1094.512		
1.C	0.026	0.126	-0.019	0.040	0.147	0.015	-0.006	0.020	0.016
2.C	0.029	-0.085	-0.008	-0.116	0.136	0.006	-0.003	0.012	0.006
3.N	0.176	0.003	-0.011	0.027	-0.061	0.002	0.004	0.010	0.005
4.C	0.028	0.080	-0.001	0.129	0.136	-0.001	0.004	0.015	0.012
5.C	0.033	-0.115	-0.018	-0.028	0.166	0.003	0.004	0.018	0.023
6.C	0.194	0.017	-0.031	0.012	-0.019	-0.001	-0.001	0.023	0.028
7.Re	0.063	-0.005	0.008	0.009	0.018	-0.002	-0.001	0.001	-0.014
8.O	0.072	-0.011	0.013	0.028	0.010	0.003	-0.004	0.002	-0.008
9.O	0.057	-0.003	0.006	-0.019	0.016	0.000	-0.006	0.005	-0.020
10.O	0.054	-0.010	0.012	0.015	-0.005	-0.004	-0.028	0.021	-0.010
11.C	0.047	-0.011	0.019	0.000	-0.004	0.000	0.131	-0.122	-0.094
12.C	0.041	-0.009	0.005	-0.009	0.019	0.001	-0.060	0.071	0.024
13.H	0.037	-0.007	0.024	-0.020	0.020	0.000	0.419	0.062	0.047
14.H	0.060	0.002	0.028	-0.004	0.025	0.004	-0.427	-0.312	-0.255
15.H	0.053	-0.002	0.013	-0.019	-0.029	0.005	0.180	-0.212	0.397
16.H	0.046	-0.021	0.025	0.013	0.011	-0.011	-0.183	0.280	-0.256
17.H	-0.186	-0.226	-0.009	-0.486	-0.085	-0.019	-0.003	0.010	0.002
18.H	-0.409	0.378	-0.040	0.267	0.034	-0.038	-0.025	0.030	0.029
19.H	0.209	0.011	0.024	0.003	-0.515	0.038	-0.001	0.037	0.025
20.H	-0.421	-0.358	-0.009	-0.287	0.048	-0.011	0.000	0.015	0.032
21.H	-0.207	0.244	-0.033	0.444	-0.068	0.008	0.007	0.014	0.009

	1167.440			1205.054			1210.836		
1.C	0.031	-0.014	-0.001	0.023	-0.016	-0.041	-0.046	0.002	-0.019
2.C	-0.003	0.000	0.001	-0.009	-0.024	-0.031	0.059	0.059	-0.012
3.N	0.000	-0.029	0.001	0.006	0.008	0.006	-0.008	-0.006	0.001
4.C	0.005	0.000	-0.001	-0.028	0.016	0.033	0.046	-0.054	0.009
5.C	-0.031	-0.011	0.000	0.006	-0.013	0.022	-0.047	-0.001	0.006
6.C	0.000	0.061	0.002	0.005	-0.015	-0.019	-0.013	-0.006	-0.006
7.Re	0.000	-0.004	0.000	0.001	0.022	0.026	-0.003	0.006	0.008
8.O	0.002	-0.005	-0.001	0.001	0.055	0.056	-0.001	0.020	0.017
9.O	-0.003	-0.005	0.001	0.013	0.019	-0.022	0.000	0.007	-0.010
10.O	0.001	-0.006	-0.001	-0.010	0.022	0.083	-0.004	0.005	0.030
11.C	-0.001	-0.005	0.000	-0.046	-0.029	0.019	-0.021	-0.012	0.006
12.C	-0.001	-0.003	0.001	0.034	-0.067	-0.056	0.008	-0.026	-0.023
13.H	-0.005	-0.003	0.000	-0.097	-0.057	0.026	-0.043	-0.023	0.011
14.H	0.000	0.001	-0.003	0.179	0.041	0.092	0.065	0.016	0.036

15.H	-0.004	-0.008	0.000	-0.331	-0.431	0.187	-0.125	-0.157	0.063
16.H	0.003	-0.003	-0.001	0.278	0.517	-0.328	0.104	0.185	-0.120
17.H	-0.113	-0.069	0.000	-0.128	-0.098	-0.054	0.427	0.293	-0.011
18.H	0.453	-0.248	0.014	0.143	-0.082	-0.083	-0.368	0.179	-0.020
19.H	0.013	0.654	-0.012	0.006	-0.024	-0.016	-0.015	-0.017	-0.012
20.H	-0.458	-0.230	0.002	0.123	0.045	0.042	-0.402	-0.180	0.015
21.H	0.112	-0.073	-0.002	-0.167	0.112	0.057	0.388	-0.290	0.032

	1284.032			1317.458			1351.948		
1.C	0.172	-0.040	0.001	-0.036	0.013	-0.046	0.037	-0.082	-0.033
2.C	-0.255	-0.150	-0.007	-0.041	-0.017	-0.008	0.108	0.002	-0.024
3.N	0.021	0.491	-0.004	-0.012	-0.027	0.031	-0.010	0.063	0.002
4.C	0.272	-0.177	0.016	0.016	-0.019	0.035	-0.126	0.007	0.022
5.C	-0.170	-0.011	0.012	0.012	0.014	0.000	-0.079	-0.094	0.018
6.C	0.004	0.268	0.003	-0.013	0.031	-0.040	-0.007	-0.172	-0.014
7.Re	0.006	0.046	0.000	-0.013	-0.080	0.086	-0.012	0.080	0.014
8.O	0.006	0.049	0.011	0.047	-0.055	0.108	-0.050	0.100	0.041
9.O	0.003	0.037	-0.011	-0.056	-0.082	0.057	0.051	0.075	-0.024
10.O	0.004	0.031	-0.002	0.008	-0.150	0.176	-0.027	0.110	0.026
11.C	0.011	0.029	-0.010	-0.181	-0.254	0.141	0.005	0.087	0.004
12.C	0.007	0.033	-0.009	-0.109	-0.088	0.057	0.028	0.038	-0.015
13.H	-0.024	0.033	-0.005	0.034	-0.087	0.025	0.073	0.035	-0.043
14.H	-0.006	0.010	-0.007	-0.144	-0.081	-0.035	0.019	0.015	-0.007
15.H	-0.017	-0.008	0.001	0.345	0.532	-0.294	0.023	0.105	0.016
16.H	-0.021	0.005	0.006	0.215	0.306	-0.213	-0.010	0.060	0.020
17.H	-0.272	-0.147	0.004	-0.077	-0.041	-0.010	-0.457	-0.356	-0.040
18.H	-0.015	0.059	-0.026	-0.070	0.032	-0.070	-0.216	0.056	-0.066
19.H	-0.009	-0.379	0.014	-0.013	0.061	-0.073	0.004	0.212	0.009
20.H	-0.068	0.040	0.017	0.044	0.030	0.004	0.202	0.047	0.035
21.H	0.349	-0.219	-0.002	0.044	-0.037	0.069	0.446	-0.389	0.058

	1414.501			1430.362			1454.400		
1.C	0.050	-0.001	0.027	0.000	-0.001	0.001	-0.129	0.136	-0.001
2.C	0.064	0.004	0.020	0.000	-0.012	0.017	0.176	0.098	0.003
3.N	0.053	0.010	0.014	0.010	-0.015	0.027	0.009	0.199	-0.002
4.C	0.038	0.006	0.012	0.017	-0.012	0.022	0.011	0.007	-0.003
5.C	0.051	-0.003	0.017	0.018	-0.002	0.007	0.329	0.235	-0.006
6.C	0.053	-0.006	0.023	0.010	0.003	-0.004	0.002	0.224	0.001
7.Re	0.051	0.019	0.005	0.010	-0.031	0.050	0.052	0.014	0.000
8.O	0.041	0.014	0.002	0.032	-0.028	0.053	0.093	0.014	-0.003
9.O	0.059	0.022	0.010	-0.002	-0.030	0.047	-0.006	0.012	0.004
10.O	0.061	0.021	0.010	0.003	-0.053	0.075	0.058	-0.032	0.001
11.C	0.100	0.028	0.029	0.046	-0.041	0.104	0.022	-0.028	0.001
12.C	0.135	0.064	0.007	-0.087	-0.071	0.059	-0.002	0.014	0.005
13.H	-0.416	0.076	0.201	0.432	-0.080	-0.114	-0.002	0.015	-0.007
14.H	-0.154	-0.452	0.055	0.167	0.411	-0.016	0.026	0.070	-0.002
15.H	-0.088	-0.026	-0.491	-0.220	-0.195	-0.409	0.018	-0.044	0.034
16.H	-0.367	0.281	-0.048	-0.499	0.182	0.056	0.063	-0.047	0.005
17.H	0.051	-0.006	0.027	-0.002	-0.013	0.015	-0.418	-0.293	-0.006
18.H	0.070	-0.013	0.025	-0.002	0.000	-0.007	0.135	-0.031	0.013
19.H	0.054	-0.019	0.034	0.011	0.008	-0.016	-0.021	-0.345	-0.028
20.H	0.038	-0.010	0.015	0.025	0.001	0.004	-0.451	-0.174	-0.009
21.H	0.057	-0.008	0.006	0.029	-0.020	0.031	0.035	-0.041	-0.001

	1473.320			1554.374			1603.996		
1.C	0.232	-0.170	-0.020	-0.057	0.145	0.000	0.323	-0.094	-0.010
2.C	0.155	0.076	-0.010	-0.055	-0.190	0.001	-0.237	-0.055	-0.008
3.N	0.003	-0.080	-0.001	-0.006	0.106	-0.003	0.122	-0.006	-0.004
4.C	0.203	-0.109	-0.006	0.089	-0.212	-0.005	-0.237	0.035	-0.005
5.C	0.055	0.015	-0.018	0.041	0.138	-0.011	0.296	0.066	-0.005
6.C	0.003	-0.075	-0.031	0.000	-0.502	-0.005	-0.132	-0.049	-0.017
7.Re	0.081	-0.009	0.015	0.001	-0.033	0.000	0.021	0.000	0.003
8.O	0.079	-0.007	0.016	-0.012	-0.036	-0.006	0.017	0.001	0.004
9.O	0.100	-0.011	0.013	0.020	-0.031	0.007	0.028	0.001	0.000
10.O	0.071	0.005	0.029	-0.004	-0.013	0.001	0.016	0.006	0.007
11.C	0.075	0.005	0.027	0.006	-0.011	0.004	0.017	0.004	0.006
12.C	0.083	-0.011	0.014	0.014	-0.024	0.005	0.020	-0.001	0.001
13.H	0.078	-0.011	0.020	0.015	-0.024	0.014	0.014	-0.001	0.005
14.H	0.065	-0.030	-0.002	0.007	-0.034	0.004	0.021	-0.012	0.014
15.H	0.067	0.001	0.009	0.011	-0.006	0.005	0.016	0.003	0.004
16.H	0.036	0.010	0.031	-0.002	-0.001	0.000	0.010	0.009	0.005
17.H	-0.322	-0.207	-0.006	0.246	-0.006	0.015	0.245	0.275	0.005
18.H	-0.446	0.199	-0.052	0.185	0.037	-0.006	-0.333	0.282	-0.028
19.H	-0.008	0.156	0.006	0.027	0.584	0.014	-0.153	0.082	0.025
20.H	-0.165	-0.080	-0.022	-0.198	0.046	-0.015	-0.289	-0.244	-0.008
21.H	-0.444	0.334	-0.015	-0.327	0.066	-0.018	0.216	-0.302	0.005

	2964.287			3044.125			3051.113		
1.C	-0.029	0.005	-0.010	-0.006	0.005	0.008	-0.028	0.004	-0.007
2.C	-0.029	0.001	-0.021	-0.006	-0.013	-0.009	-0.028	0.002	0.013
3.N	-0.026	0.000	-0.024	0.009	-0.022	-0.011	-0.026	0.001	0.016
4.C	-0.023	0.001	-0.017	0.024	-0.013	0.004	-0.025	0.002	0.000
5.C	-0.023	0.005	-0.006	0.025	0.004	0.022	-0.024	0.004	-0.020
6.C	-0.026	0.007	-0.002	0.010	0.014	0.024	-0.026	0.005	-0.023

7.Re	-0.026	-0.006	-0.040	0.009	-0.048	-0.037	-0.026	-0.003	0.045
8.O	-0.032	-0.003	-0.037	0.010	-0.040	-0.029	-0.007	-0.009	0.037
9.O	-0.030	-0.006	-0.043	-0.013	-0.049	-0.048	-0.029	-0.003	0.056
10.O	-0.018	-0.010	-0.053	0.025	-0.075	-0.054	-0.040	0.002	0.065
11.C	-0.055	-0.021	-0.106	0.074	-0.140	-0.110	-0.073	0.032	0.088
12.C	-0.014	-0.010	-0.044	-0.010	-0.063	-0.035	-0.110	-0.008	0.084
13.H	-0.020	-0.016	-0.050	0.000	0.100	-0.060	-0.064	0.575	0.038
14.H	-0.009	-0.010	-0.031	0.304	-0.225	-0.178	0.549	-0.358	-0.279
15.H	0.380	-0.349	-0.172	-0.618	0.420	0.082	0.189	-0.191	0.025
16.H	0.103	0.391	0.705	0.116	0.138	0.373	-0.099	-0.074	-0.090
17.H	-0.031	0.000	-0.027	-0.016	-0.022	-0.022	-0.026	-0.003	0.026
18.H	-0.029	0.008	-0.007	-0.018	0.012	0.009	-0.029	0.004	-0.008
19.H	-0.026	0.009	0.005	0.008	0.027	0.037	-0.033	0.007	-0.039
20.H	-0.020	0.005	0.000	0.037	0.011	0.034	-0.024	0.008	-0.032
21.H	-0.021	-0.001	-0.019	0.036	-0.020	0.002	-0.021	0.003	0.003

	3128.502			3139.258			3144.225		
1.C	-0.003	-0.024	-0.004	-0.031	-0.122	0.003	0.079	0.037	-0.012
2.C	0.011	0.009	-0.002	-0.008	-0.034	0.003	0.072	-0.021	-0.006
3.N	0.015	0.002	-0.001	-0.009	-0.043	-0.001	0.064	-0.004	-0.003
4.C	0.013	-0.004	-0.002	-0.013	-0.038	-0.004	0.078	0.020	-0.007
5.C	-0.003	0.037	-0.004	0.004	-0.110	-0.003	0.087	-0.049	-0.013
6.C	0.084	0.003	-0.005	-0.012	-0.065	-0.001	0.120	0.000	-0.017
7.Re	0.015	0.001	0.002	-0.010	-0.025	-0.001	0.064	-0.007	0.008
8.O	0.018	0.001	0.002	-0.021	-0.029	-0.005	0.072	-0.007	0.007
9.O	0.013	0.001	0.002	0.006	-0.025	0.004	0.061	-0.007	0.009
10.O	0.014	-0.001	0.004	-0.011	-0.009	-0.002	0.059	-0.008	0.016
11.C	0.012	-0.001	0.004	-0.002	-0.006	0.001	0.052	-0.008	0.016
12.C	0.011	0.000	0.002	0.005	-0.019	0.003	0.051	-0.004	0.010
13.H	0.010	-0.004	0.002	0.014	-0.017	0.006	0.050	-0.019	0.011
14.H	0.009	0.002	0.001	-0.003	-0.023	0.004	0.053	-0.006	0.003
15.H	0.011	-0.002	0.005	0.003	0.001	0.003	0.053	-0.009	0.021
16.H	0.010	-0.002	0.002	-0.006	-0.002	-0.001	0.048	-0.007	0.018
17.H	0.054	-0.065	-0.002	0.130	-0.241	0.004	-0.065	0.200	0.000
18.H	0.201	0.341	-0.004	0.378	0.599	0.007	-0.156	-0.395	-0.016
19.H	-0.781	0.022	-0.001	0.018	-0.081	0.001	-0.543	0.014	-0.020
20.H	0.221	-0.393	0.002	-0.306	0.479	-0.014	-0.199	0.532	-0.024
21.H	0.065	0.076	-0.002	-0.126	-0.190	-0.005	-0.100	-0.251	-0.001

	3157.466			3161.950			3165.309		
1.C	-0.015	0.005	0.016	-0.003	0.132	0.000	0.004	-0.012	-0.006
2.C	-0.004	0.007	0.023	-0.053	0.151	0.000	0.045	-0.042	-0.005
3.N	-0.019	0.024	0.000	0.002	0.083	0.002	0.019	0.002	-0.001
4.C	-0.029	0.018	-0.031	0.056	0.143	0.004	0.057	0.054	0.001
5.C	-0.028	0.011	-0.039	0.010	0.131	0.005	0.007	0.028	-0.001
6.C	-0.022	0.006	-0.015	0.002	0.125	0.003	0.006	0.008	-0.004
7.Re	-0.019	0.037	0.009	0.002	0.052	0.002	0.018	-0.002	0.001
8.O	-0.022	0.009	-0.020	0.021	0.055	0.005	0.022	0.001	0.004
9.O	-0.008	0.038	0.051	-0.025	0.052	-0.002	0.015	-0.002	-0.003
10.O	-0.026	0.072	0.012	0.006	0.027	0.002	0.018	-0.008	0.003
11.C	-0.028	0.101	0.038	-0.010	0.026	0.001	0.015	-0.011	0.001
12.C	-0.056	0.179	0.059	-0.025	0.060	0.001	0.016	-0.016	-0.003
13.H	-0.027	-0.767	0.122	-0.039	-0.076	0.003	0.012	0.074	-0.009
14.H	0.427	-0.167	-0.209	0.050	0.023	-0.032	-0.023	0.013	0.016
15.H	0.028	0.061	0.043	-0.014	0.008	-0.003	0.008	-0.007	0.001
16.H	-0.039	0.102	-0.011	-0.003	0.019	-0.004	0.015	-0.012	0.003
17.H	-0.092	0.159	0.049	0.378	-0.556	-0.008	-0.310	0.513	-0.002
18.H	0.025	0.060	0.037	-0.139	-0.068	-0.002	0.130	0.213	-0.009
19.H	0.002	-0.003	-0.021	0.010	0.143	0.002	0.148	0.008	-0.004
20.H	-0.032	0.003	-0.064	0.128	-0.054	0.010	0.148	-0.234	0.005
21.H	-0.018	0.046	-0.050	-0.352	-0.475	0.013	-0.370	-0.568	0.010

==========
Normal Modes in Z-matrix coordinates
==========

	-446.797			37.184			61.980		
1.C	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000
2.C	-0.006	0.000	0.000	-0.002	0.000	0.000	0.006	0.000	0.000
3.N	-0.006	-0.009	0.000	0.007	0.013	0.000	0.001	0.008	0.000
4.C	-0.015	0.018	0.014	0.012	-0.021	-0.047	0.003	-0.010	0.071
5.C	0.006	-0.009	-0.004	-0.003	0.008	0.025	-0.002	0.005	-0.067
6.C	-0.006	-0.003	-0.008	-0.002	0.007	0.005	0.000	0.001	-0.008
7.Re	0.032	-0.027	-0.017	0.006	0.007	-0.111	0.062	-0.007	0.446
8.O	0.062	-0.031	0.040	0.003	-0.013	0.568	0.001	-0.070	-0.269
9.O	-0.325	0.039	0.297	-0.006	0.023	0.578	-0.010	-0.007	-0.250
10.O	-0.025	0.027	-0.062	-0.001	0.036	0.544	-0.007	0.272	-0.233
11.C	0.106	-0.001	0.046	-0.003	0.013	0.066	-0.006	0.028	0.129
12.C	-0.053	0.003	-0.221	-0.005	-0.003	-0.014	-0.021	-0.014	-0.200
13.H	-0.009	0.036	-0.717	0.001	0.000	0.009	-0.001	0.017	0.123
14.H	-0.019	0.074	-0.334	0.001	-0.005	0.016	-0.003	0.003	0.180
15.H	-0.005	-0.017	-0.179	0.000	0.001	-0.013	0.004	-0.003	-0.208
16.H	-0.009	-0.088	-0.216	0.000	0.002	-0.013	0.002	0.007	-0.213

17.H	-0.002	0.008	-0.033	-0.002	-0.003	-0.128	0.001	-0.002	0.407
18.H	0.000	0.001	-0.011	-0.001	0.009	-0.008	-0.001	0.011	-0.061
19.H	0.001	-0.003	0.021	0.001	-0.006	-0.035	0.001	-0.010	0.029
20.H	0.000	0.001	0.008	0.000	-0.005	0.011	0.000	0.000	0.023
21.H	0.002	0.013	0.058	-0.002	-0.004	0.077	-0.001	0.001	-0.392

	107.553			141.813			182.493		
1.C	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000
2.C	-0.007	0.000	0.000	-0.009	0.000	0.000	0.005	0.000	0.000
3.N	-0.007	0.010	0.000	0.001	-0.002	0.000	0.000	0.016	0.000
4.C	-0.012	0.003	-0.026	-0.003	0.005	0.168	0.002	-0.017	-0.055
5.C	0.013	-0.011	0.036	0.001	-0.005	-0.170	0.010	0.004	0.078
6.C	0.001	0.008	-0.003	0.000	0.003	0.014	0.000	0.007	-0.030
7.Re	0.108	-0.057	-0.117	-0.053	-0.031	0.459	0.135	-0.044	-0.105
8.O	-0.012	0.012	-0.063	-0.001	-0.003	-0.062	0.003	-0.078	0.117
9.O	0.017	-0.200	-0.024	0.020	-0.084	-0.097	0.021	-0.053	0.030
10.O	-0.001	0.117	0.336	0.001	-0.129	-0.005	-0.037	0.158	0.033
11.C	0.011	-0.023	-0.232	0.005	-0.055	-0.335	-0.009	-0.014	-0.280
12.C	-0.037	-0.032	-0.368	0.027	0.011	0.255	0.036	0.019	0.399
13.H	0.000	0.006	0.335	0.001	-0.024	-0.141	0.001	-0.015	-0.291
14.H	0.003	0.008	0.362	0.002	0.000	-0.222	-0.003	-0.009	-0.363
15.H	0.005	-0.002	-0.412	-0.004	0.008	0.271	-0.005	0.012	0.466
16.H	0.000	0.014	-0.405	-0.001	-0.013	0.279	0.000	-0.035	0.462
17.H	-0.005	-0.003	-0.098	-0.004	0.004	0.358	-0.001	-0.004	-0.081
18.H	0.002	-0.018	0.065	0.000	-0.008	-0.038	0.000	-0.001	0.003
19.H	-0.002	0.020	0.030	-0.001	0.005	0.117	0.000	0.002	-0.024
20.H	0.000	0.000	-0.013	0.000	-0.003	0.069	0.000	-0.003	-0.035
21.H	0.002	0.008	0.106	-0.001	0.004	-0.374	0.001	-0.002	0.098

	190.786			195.463			231.584		
1.C	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000
2.C	-0.037	0.000	0.000	-0.008	0.000	0.000	-0.054	0.000	0.000
3.N	0.025	0.016	0.000	0.002	-0.018	0.000	-0.040	-0.066	0.000
4.C	0.022	0.007	0.087	0.002	0.024	-0.009	-0.023	0.128	-0.198
5.C	0.010	-0.036	-0.086	-0.013	-0.013	0.003	-0.042	-0.076	0.178
6.C	0.010	0.016	0.007	0.002	-0.003	0.015	0.006	-0.024	0.022
7.Re	-0.288	-0.235	0.193	-0.165	-0.007	-0.021	-0.569	-0.115	-0.175
8.O	0.017	0.523	-0.009	0.020	0.015	0.344	0.008	-0.165	-0.087
9.O	-0.034	0.145	-0.082	0.098	0.051	-0.106	-0.018	-0.042	0.018
10.O	0.021	-0.051	-0.052	0.003	-0.042	-0.109	0.018	0.149	0.042
11.C	-0.055	0.185	-0.117	-0.027	-0.005	0.238	-0.032	0.055	-0.180
12.C	-0.012	0.009	0.262	-0.033	-0.103	-0.351	0.017	0.031	0.260
13.H	-0.004	0.057	-0.354	0.002	0.001	0.415	-0.001	0.013	-0.284
14.H	-0.004	-0.005	-0.190	0.005	-0.018	0.328	-0.003	0.002	-0.231
15.H	0.003	-0.006	0.286	0.005	0.021	-0.429	-0.003	0.006	0.305
16.H	0.003	0.001	0.258	-0.001	0.051	-0.392	0.002	-0.004	0.296
17.H	-0.009	-0.004	0.162	0.000	0.003	-0.008	-0.009	0.017	-0.082
18.H	0.000	-0.006	-0.005	0.000	-0.002	0.021	-0.001	0.006	0.130
19.H	-0.001	-0.002	0.063	-0.001	0.000	-0.006	-0.003	-0.012	-0.090
20.H	0.001	-0.002	0.027	0.000	0.003	0.001	-0.001	0.028	-0.047
21.H	0.007	0.004	-0.180	-0.002	-0.003	0.014	-0.004	0.019	0.099

	252.597			304.079			320.475		
1.C	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000
2.C	-0.023	0.000	0.000	-0.022	0.000	0.000	0.013	0.000	0.000
3.N	-0.030	0.044	0.000	-0.025	-0.014	0.000	-0.001	-0.001	0.000
4.C	0.032	-0.015	0.002	0.015	0.040	-0.097	0.018	-0.012	-0.011
5.C	0.037	-0.033	0.061	-0.001	-0.030	0.096	0.003	0.011	0.007
6.C	0.010	0.026	-0.070	0.005	-0.013	0.001	0.000	-0.001	0.000
7.Re	0.068	-0.288	0.031	-0.145	-0.112	-0.068	0.004	0.014	0.022
8.O	-0.002	-0.250	0.000	-0.014	0.032	-0.149	0.033	-0.083	0.021
9.O	0.007	0.181	-0.022	-0.072	0.488	0.063	0.019	0.231	-0.114
10.O	0.023	-0.150	-0.337	-0.079	0.330	-0.169	0.113	0.000	0.383
11.C	0.017	-0.016	0.574	0.079	-0.411	-0.129	-0.058	0.315	-0.600
12.C	-0.007	-0.021	-0.254	0.025	0.052	0.318	-0.058	-0.104	0.263
13.H	0.002	-0.007	0.210	0.004	-0.075	0.187	-0.001	0.125	-0.237
14.H	0.003	0.001	0.195	0.016	0.032	-0.154	-0.004	-0.019	0.007
15.H	0.001	-0.003	-0.305	0.002	-0.046	0.269	0.007	0.024	0.274
16.H	-0.001	0.031	-0.289	-0.015	-0.044	0.276	0.006	0.018	0.262
17.H	-0.006	0.001	0.017	0.003	0.017	-0.050	0.006	-0.005	0.023
18.H	0.000	-0.023	0.006	0.000	0.002	0.063	0.000	-0.003	-0.007
19.H	-0.002	0.021	0.069	-0.001	0.000	-0.035	0.000	0.004	-0.005
20.H	0.002	-0.007	-0.034	0.001	0.016	-0.022	0.001	-0.004	-0.001
21.H	0.003	0.009	0.017	0.002	0.003	0.032	-0.002	-0.005	-0.020

	381.384			428.855			495.590		
1.C	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000
2.C	0.005	0.000	0.000	-0.007	0.000	0.000	0.005	0.000	0.000
3.N	0.003	0.011	0.000	-0.013	-0.010	0.000	0.013	0.012	0.000
4.C	0.002	-0.014	0.290	-0.001	0.020	0.408	0.011	-0.024	0.014
5.C	0.002	0.005	0.275	-0.002	-0.003	-0.430	-0.001	0.008	-0.016
6.C	0.001	0.010	-0.571	0.004	-0.018	-0.060	0.002	0.012	-0.005
7.Re	-0.033	0.023	0.270	-0.008	-0.005	-0.228	-0.074	0.010	-0.013
8.O	0.004	0.006	0.148	0.000	-0.091	0.318	-0.012	0.022	-0.018

9.O	-0.003	-0.003	0.148	0.001	0.009	0.318	0.015	-0.015	0.073
10.O	-0.001	0.005	0.158	-0.020	0.128	0.292	0.288	-0.061	0.126
11.C	0.000	0.001	-0.010	-0.002	-0.001	0.025	-0.178	0.228	-0.037
12.C	-0.001	-0.001	0.002	0.000	0.004	0.017	-0.055	-0.503	0.039
13.H	0.000	0.000	0.002	0.000	0.000	-0.018	-0.011	0.203	0.474
14.H	0.000	-0.004	-0.002	0.000	-0.004	-0.027	-0.002	-0.237	0.247
15.H	0.000	0.000	0.003	-0.001	0.001	0.030	0.007	0.185	0.128
16.H	0.000	-0.001	0.003	0.000	-0.009	0.029	0.019	0.168	0.278
17.H	-0.001	-0.004	0.105	-0.002	0.003	-0.299	-0.002	0.000	-0.020
18.H	0.000	-0.013	-0.345	-0.002	0.014	-0.065	0.000	-0.006	-0.007
19.H	-0.001	0.010	0.336	0.001	-0.015	0.327	0.000	0.003	-0.007
20.H	0.000	-0.010	-0.303	0.000	0.011	0.073	0.000	-0.011	-0.009
21.H	-0.002	0.000	0.187	0.000	-0.003	0.262	-0.001	-0.002	-0.005

	628.949			647.096			677.130		
1.C	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000
2.C	0.088	0.000	0.000	0.007	0.000	0.000	-0.002	0.000	0.000
3.N	0.000	0.366	0.000	0.096	0.256	0.000	0.014	-0.012	0.000
4.C	-0.086	-0.327	-0.187	-0.037	0.241	0.204	0.002	0.010	-0.222
5.C	0.012	-0.085	0.150	-0.091	-0.461	-0.198	-0.002	0.004	0.209
6.C	0.011	0.469	-0.149	0.086	0.195	0.174	-0.003	-0.018	-0.199
7.Re	-0.431	0.212	-0.065	0.309	-0.044	0.045	-0.009	-0.015	-0.050
8.O	0.009	-0.010	-0.081	0.009	-0.053	0.088	0.034	0.025	-0.076
9.O	-0.001	0.031	-0.076	-0.039	0.052	0.076	-0.186	0.009	-0.140
10.O	0.020	-0.008	-0.110	0.012	0.007	0.016	0.362	-0.005	-0.154
11.C	-0.015	-0.017	0.027	0.033	0.000	0.093	0.212	-0.158	0.047
12.C	0.003	0.030	0.009	0.002	-0.024	-0.005	0.036	0.018	-0.005
13.H	0.001	-0.008	-0.019	0.000	-0.009	-0.048	0.000	-0.132	-0.430
14.H	0.000	0.024	0.016	0.000	-0.005	-0.085	0.006	0.105	-0.544
15.H	0.001	-0.009	-0.014	-0.001	0.004	0.006	-0.003	-0.011	-0.055
16.H	0.000	0.015	-0.017	-0.002	-0.014	0.007	-0.012	-0.010	-0.037
17.H	-0.006	-0.102	0.030	-0.003	-0.213	0.040	-0.001	0.011	-0.052
18.H	0.003	-0.148	0.076	0.005	0.300	-0.057	0.000	0.017	-0.058
19.H	0.002	0.105	0.027	0.000	-0.325	-0.255	0.001	-0.017	0.218
20.H	-0.003	-0.297	-0.072	-0.005	0.066	-0.016	0.000	0.012	0.030
21.H	-0.002	0.144	-0.077	0.009	0.179	-0.007	0.000	-0.007	0.054

	681.645			705.400			745.719		
1.C	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000
2.C	0.004	0.000	0.000	0.001	0.000	0.000	0.002	0.000	0.000
3.N	0.019	0.007	0.000	0.016	-0.002	0.000	-0.005	0.013	0.000
4.C	0.008	0.033	-0.441	0.013	0.008	-0.028	-0.004	-0.014	0.275
5.C	-0.013	-0.030	0.422	-0.003	-0.007	0.035	-0.002	0.002	-0.287
6.C	0.007	-0.017	-0.394	0.006	-0.006	-0.038	-0.001	0.013	0.238
7.Re	0.059	-0.019	-0.102	-0.014	-0.002	-0.003	-0.023	0.012	0.010
8.O	-0.006	0.027	-0.182	-0.044	0.012	-0.006	0.002	-0.023	0.133
9.O	0.054	-0.003	-0.162	0.136	0.002	0.024	0.000	0.002	0.133
10.O	-0.126	-0.053	-0.148	0.360	0.036	-0.088	0.014	0.036	0.118
11.C	-0.064	0.056	-0.023	0.174	-0.222	0.049	0.018	-0.012	0.018
12.C	-0.011	-0.013	0.000	-0.020	0.222	0.001	-0.001	0.009	-0.003
13.H	0.000	0.049	0.142	0.009	0.091	0.462	0.000	0.017	0.020
14.H	-0.003	-0.033	0.189	-0.007	-0.018	0.684	0.000	-0.014	0.027
15.H	0.001	0.002	0.016	-0.002	-0.014	0.055	-0.001	0.003	0.021
16.H	0.004	0.002	0.010	0.012	-0.014	0.024	0.001	-0.009	0.018
17.H	0.003	-0.024	-0.133	0.001	-0.009	0.033	0.001	-0.007	-0.329
18.H	0.000	0.055	-0.123	0.001	0.009	0.054	0.000	-0.002	-0.502
19.H	0.001	-0.056	0.463	0.000	-0.009	-0.012	0.001	-0.003	0.230
20.H	-0.001	0.031	0.090	0.000	0.009	-0.063	0.000	-0.012	0.473
21.H	0.002	0.000	0.142	0.000	0.000	-0.050	0.001	-0.001	0.304

	787.682			841.858			859.761		
1.C	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000
2.C	0.008	0.000	0.000	0.012	0.000	0.000	-0.003	0.000	0.000
3.N	0.015	0.000	0.000	0.012	0.001	0.000	0.013	-0.002	0.000
4.C	0.014	0.000	0.024	0.003	-0.008	-0.015	0.005	-0.004	0.012
5.C	-0.001	0.000	-0.023	0.001	0.014	0.033	0.006	0.006	-0.014
6.C	0.004	-0.005	0.013	-0.002	-0.010	-0.042	0.001	-0.007	0.011
7.Re	-0.009	0.003	-0.004	-0.014	0.000	-0.001	-0.004	-0.012	0.000
8.O	-0.031	0.001	0.010	-0.008	-0.001	0.044	0.102	-0.014	0.028
9.O	0.149	-0.002	0.031	0.007	0.001	0.044	-0.601	0.004	-0.007
10.O	0.110	0.000	0.097	-0.010	-0.001	0.041	0.084	-0.022	0.031
11.C	-0.309	0.032	-0.156	0.014	0.002	0.005	-0.420	-0.021	-0.020
12.C	-0.014	0.041	0.112	0.005	-0.005	-0.005	-0.086	0.178	0.017
13.H	0.003	-0.414	-0.121	0.000	0.010	-0.015	0.004	0.034	0.226
14.H	-0.004	0.430	-0.110	-0.001	-0.003	0.000	-0.020	0.081	0.564
15.H	0.019	-0.076	-0.427	0.000	-0.001	0.008	0.012	0.053	-0.014
16.H	0.006	0.245	-0.420	0.000	-0.008	0.004	0.017	0.117	-0.057
17.H	0.002	-0.009	-0.033	0.004	-0.015	-0.392	0.000	0.018	-0.038
18.H	0.001	0.009	-0.074	0.003	-0.002	-0.551	0.000	0.001	-0.031
19.H	0.000	-0.012	0.022	0.000	-0.009	-0.037	0.000	0.002	-0.016
20.H	0.000	0.005	0.033	-0.001	0.006	-0.509	0.001	0.004	-0.035
21.H	0.000	0.000	0.007	-0.001	0.001	-0.522	0.001	-0.012	-0.016

	875.783			933.055			952.363		

1.C	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000
2.C	-0.004	0.000	0.000	-0.006	0.000	0.000	-0.011	0.000	0.000
3.N	-0.003	-0.002	0.000	0.007	0.008	0.000	0.009	-0.001	0.000
4.C	-0.010	-0.001	0.026	0.005	-0.010	-0.191	0.000	0.004	0.158
5.C	-0.002	0.004	-0.020	0.000	0.005	0.235	0.004	-0.008	0.058
6.C	-0.003	0.000	0.012	-0.004	-0.007	-0.175	0.000	0.004	-0.161
7.Re	0.006	-0.003	0.004	-0.006	0.004	-0.048	0.003	0.003	0.128
8.O	0.065	-0.007	0.014	-0.017	0.004	-0.064	-0.041	0.000	0.072
9.O	-0.131	-0.006	0.011	-0.012	0.000	-0.065	0.022	0.001	0.068
10.O	-0.233	0.043	-0.071	-0.006	-0.007	-0.064	0.048	-0.008	0.088
11.C	0.584	0.077	0.005	0.010	0.003	-0.002	-0.167	0.032	-0.003
12.C	0.190	-0.251	0.131	0.001	-0.006	0.002	0.211	0.026	-0.012
13.H	0.003	0.030	-0.103	0.000	0.000	0.005	-0.001	0.178	-0.222
14.H	-0.015	0.194	0.332	0.000	-0.005	-0.004	0.004	0.005	0.149
15.H	-0.006	-0.198	-0.365	0.000	-0.002	-0.005	0.006	0.040	0.000
16.H	-0.022	-0.005	-0.341	-0.001	-0.001	-0.002	-0.001	-0.018	-0.013
17.H	0.000	0.004	-0.041	-0.004	0.010	0.492	0.002	-0.002	-0.617
18.H	-0.001	-0.001	0.027	-0.002	0.017	-0.019	-0.003	0.016	0.390
19.H	0.000	0.006	-0.007	0.000	-0.011	0.439	0.000	-0.003	0.141
20.H	-0.001	-0.002	0.005	0.000	0.009	0.219	0.001	0.000	0.240
21.H	0.000	-0.007	0.021	-0.003	0.012	-0.615	-0.001	0.013	-0.342

	957.277			968.380			979.548		
1.C	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000
2.C	0.015	0.000	0.000	0.065	0.000	0.000	-0.020	0.000	0.000
3.N	0.009	0.008	0.000	0.051	0.028	0.000	-0.065	-0.014	0.000
4.C	0.017	-0.012	-0.102	0.047	-0.045	-0.010	-0.072	0.024	0.005
5.C	0.003	0.012	-0.039	0.027	0.054	0.061	-0.048	-0.005	-0.016
6.C	0.008	-0.010	0.105	0.028	-0.038	-0.233	-0.033	0.012	-0.018
7.Re	-0.022	0.004	-0.083	-0.085	0.013	-0.033	0.066	-0.008	0.003
8.O	-0.042	0.002	-0.048	0.034	-0.006	0.018	-0.930	0.012	0.008
9.O	0.039	0.000	-0.052	0.002	0.001	0.019	-0.134	-0.007	-0.022
10.O	0.081	-0.014	-0.019	-0.008	0.007	0.013	-0.025	-0.015	0.026
11.C	-0.301	0.065	-0.006	0.012	-0.003	0.007	0.110	0.023	-0.042
12.C	0.443	0.035	-0.022	-0.009	0.000	-0.006	-0.081	-0.036	0.020
13.H	-0.001	0.317	-0.383	-0.001	-0.005	-0.008	-0.002	-0.048	0.036
14.H	0.006	-0.005	0.289	-0.002	0.005	0.016	-0.004	-0.006	-0.053
15.H	0.012	0.063	0.002	0.000	-0.003	0.012	-0.002	-0.025	-0.035
16.H	-0.001	-0.030	-0.035	0.001	0.001	0.005	-0.001	-0.012	-0.047
17.H	-0.001	-0.005	0.423	0.005	-0.037	0.012	-0.002	-0.016	0.016
18.H	0.003	-0.004	-0.249	0.010	-0.014	-0.282	-0.002	-0.020	-0.090
19.H	0.000	-0.002	-0.093	0.002	-0.015	-0.724	-0.003	0.002	-0.195
20.H	0.000	0.007	-0.141	0.003	0.012	0.540	-0.005	-0.019	0.080
21.H	0.001	-0.010	0.232	0.002	-0.023	-0.120	-0.005	0.016	0.091

	1005.480			1033.072			1035.281		
1.C	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000
2.C	0.309	0.000	0.000	-0.035	0.000	0.000	0.027	0.000	0.000
3.N	0.389	0.077	0.000	-0.031	0.187	0.000	0.024	-0.263	0.000
4.C	0.385	-0.124	0.039	-0.030	-0.204	0.008	0.026	0.281	-0.025
5.C	0.260	0.083	-0.059	-0.055	0.193	-0.017	0.050	-0.271	0.024
6.C	0.308	-0.043	0.122	-0.051	-0.170	0.032	0.038	0.238	-0.033
7.Re	-0.445	0.059	0.023	-0.118	0.100	0.006	0.188	-0.136	-0.017
8.O	-0.098	0.000	-0.002	-0.006	0.001	-0.008	0.001	0.000	0.000
9.O	-0.016	-0.003	-0.003	0.049	-0.002	-0.014	0.044	-0.002	-0.006
10.O	-0.031	0.002	-0.003	-0.016	0.001	-0.011	-0.011	0.001	-0.002
11.C	0.060	-0.006	-0.004	0.041	-0.062	0.005	0.025	-0.052	0.004
12.C	-0.077	-0.003	0.003	-0.389	0.108	-0.034	-0.326	0.094	-0.027
13.H	-0.004	0.019	-0.055	-0.023	0.208	-0.585	-0.020	0.192	-0.510
14.H	-0.001	-0.007	-0.010	-0.027	0.174	0.445	-0.023	0.147	0.397
15.H	-0.003	-0.014	0.002	-0.009	0.043	0.015	-0.008	0.040	0.007
16.H	-0.002	0.001	0.010	0.001	-0.047	0.025	0.000	-0.048	0.017
17.H	0.027	-0.070	-0.015	-0.009	-0.063	0.018	0.011	0.082	0.039
18.H	0.032	0.078	0.182	-0.001	0.076	0.043	-0.002	-0.092	-0.075
19.H	0.030	-0.071	0.275	-0.008	-0.088	0.034	0.008	0.123	-0.046
20.H	0.032	0.025	-0.154	-0.002	0.067	-0.039	0.001	-0.084	0.041
21.H	0.028	-0.058	0.091	-0.010	-0.055	0.033	0.013	0.081	-0.027

	1061.983			1079.525			1094.512		
1.C	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000
2.C	0.007	0.000	0.000	-0.328	0.000	0.000	0.005	0.000	0.000
3.N	0.350	-0.115	0.000	-0.197	0.176	0.000	0.003	0.000	0.000
4.C	0.322	-0.153	0.027	0.257	-0.034	-0.009	0.006	-0.002	0.000
5.C	-0.029	-0.090	-0.034	0.332	-0.131	0.003	0.000	0.000	0.001
6.C	-0.454	0.113	0.019	0.288	-0.125	-0.013	-0.002	0.003	0.001
7.Re	-0.262	0.068	0.002	-0.037	0.226	-0.002	-0.007	0.000	0.002
8.O	-0.018	-0.003	0.006	-0.021	0.044	-0.007	-0.004	0.001	-0.001
9.O	-0.006	0.000	0.007	0.004	-0.059	-0.007	-0.007	0.001	-0.001
10.O	-0.014	0.003	0.005	0.001	0.010	0.067	-0.024	-0.016	-0.018
11.C	0.014	0.003	-0.002	0.007	0.001	-0.095	0.045	0.025	0.133
12.C	0.010	-0.007	0.006	-0.006	-0.002	0.000	0.105	-0.078	-0.227
13.H	0.000	-0.001	0.023	-0.001	-0.007	-0.004	0.005	-0.445	0.105
14.H	0.001	-0.031	-0.037	0.000	0.009	-0.006	-0.004	0.535	0.254
15.H	0.000	-0.020	0.005	0.000	0.013	-0.008	0.002	0.400	0.143
16.H	0.000	0.016	-0.003	-0.001	-0.019	-0.002	-0.002	-0.337	0.235
17.H	0.012	0.218	-0.016	-0.018	0.256	-0.024	0.002	-0.003	0.003

18.H	-0.016	0.377	-0.033	-0.022	-0.268	-0.065	0.000	0.010	0.009
19.H	-0.035	-0.052	-0.090	0.001	0.401	-0.037	0.000	-0.006	0.009
20.H	-0.023	0.405	0.002	0.024	0.310	0.015	0.000	0.004	-0.002
21.H	0.011	0.239	0.058	0.018	-0.233	-0.011	0.001	0.000	-0.001

	1167.440			1205.054			1210.836		
1.C	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000
2.C	-0.076	0.000	0.000	-0.062	0.000	0.000	0.218	0.000	0.000
3.N	-0.050	0.027	0.000	0.065	-0.008	0.000	-0.188	0.026	0.000
4.C	0.050	0.001	0.000	0.044	-0.016	-0.001	-0.140	0.038	0.001
5.C	0.078	-0.027	0.001	-0.065	-0.002	-0.001	0.196	0.020	0.002
6.C	-0.172	0.020	0.001	0.003	0.020	-0.001	-0.027	-0.064	-0.001
7.Re	0.001	0.029	0.003	-0.010	0.003	-0.002	0.009	-0.013	0.002
8.O	-0.001	0.012	-0.002	0.007	-0.002	-0.001	0.007	0.004	0.001
9.O	0.002	-0.016	-0.002	0.002	0.001	0.000	-0.003	-0.004	0.001
10.O	0.001	0.003	0.018	0.047	-0.017	-0.011	0.026	-0.006	0.002
11.C	0.000	0.000	-0.026	-0.016	-0.031	0.027	-0.010	-0.015	0.002
12.C	-0.002	0.001	0.001	-0.095	0.034	0.026	-0.038	0.016	0.014
13.H	0.000	0.003	-0.003	-0.003	0.153	0.147	0.000	0.066	0.062
14.H	-0.001	-0.002	0.004	-0.003	-0.256	-0.099	0.000	-0.109	-0.046
15.H	0.000	0.001	-0.002	0.001	0.402	-0.292	0.001	0.155	-0.117
16.H	0.000	-0.002	-0.003	-0.026	-0.667	-0.289	-0.010	-0.265	-0.123
17.H	0.000	0.125	0.000	0.000	0.131	-0.004	-0.004	-0.421	0.011
18.H	0.002	-0.510	0.020	0.000	-0.131	-0.012	0.003	0.414	0.009
19.H	0.001	-0.631	0.012	-0.001	0.008	-0.013	0.003	-0.013	0.004
20.H	-0.002	0.508	-0.002	-0.001	-0.140	0.003	0.002	0.440	-0.002
21.H	0.000	-0.124	0.001	0.002	0.137	0.006	-0.006	-0.400	-0.014

	1284.032			1317.458			1351.948		
1.C	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000
2.C	-0.328	0.000	0.000	-0.007	0.000	0.000	0.109	0.000	0.000
3.N	0.532	-0.062	0.000	0.009	0.000	0.000	-0.013	-0.031	0.000
4.C	-0.543	-0.003	0.002	-0.009	-0.001	0.000	0.012	0.003	0.001
5.C	0.345	0.076	-0.005	0.007	0.002	0.000	-0.078	0.018	0.002
6.C	-0.253	-0.044	0.004	-0.002	-0.001	0.000	0.045	-0.001	-0.005
7.Re	-0.014	-0.115	-0.006	-0.004	-0.003	0.001	-0.003	-0.074	-0.001
8.O	-0.005	-0.062	0.003	0.001	-0.001	0.000	-0.004	-0.017	0.003
9.O	0.007	0.084	0.004	0.001	0.002	-0.002	0.006	0.023	0.004
10.O	-0.003	-0.014	-0.100	0.084	-0.004	0.013	-0.002	-0.004	-0.025
11.C	-0.004	0.003	0.134	0.080	-0.067	-0.014	-0.003	0.001	0.036
12.C	0.001	-0.001	-0.001	-0.189	0.036	-0.017	0.005	0.001	0.000
13.H	0.000	0.010	0.006	-0.008	-0.154	0.003	0.000	-0.004	-0.006
14.H	0.000	0.010	-0.001	-0.011	0.053	0.049	-0.001	-0.015	0.005
15.H	0.000	0.016	-0.010	0.000	-0.658	0.370	0.001	0.021	-0.001
16.H	0.000	0.010	0.013	-0.005	-0.527	-0.258	0.001	0.009	-0.007
17.H	-0.010	0.035	0.002	0.000	0.014	0.001	0.006	0.580	-0.006
18.H	0.003	0.046	-0.011	0.000	0.011	0.005	0.004	0.264	-0.010
19.H	0.001	0.241	-0.003	0.000	-0.004	0.004	-0.004	-0.346	-0.026
20.H	0.000	0.001	0.004	0.000	-0.007	0.000	-0.003	-0.293	-0.002
21.H	0.006	-0.065	0.011	0.000	-0.007	-0.002	-0.009	-0.597	-0.014

	1414.501			1430.362			1454.400		
1.C	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000
2.C	0.026	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.317	0.000	0.000
3.N	-0.001	-0.006	0.000	0.005	-0.001	0.000	-0.001	-0.094	0.000
4.C	0.005	-0.001	-0.001	-0.001	-0.001	0.001	-0.175	0.042	0.003
5.C	-0.022	0.005	-0.001	-0.002	0.001	-0.001	-0.322	0.133	-0.002
6.C	0.002	0.003	0.000	-0.001	0.000	0.000	0.190	0.012	0.003
7.Re	-0.001	-0.006	-0.001	-0.002	-0.001	0.000	0.043	-0.127	-0.002
8.O	-0.002	-0.001	0.001	-0.001	0.000	0.001	0.001	-0.022	0.006
9.O	-0.005	0.000	0.001	-0.003	0.001	0.000	0.002	0.030	0.006
10.O	0.019	-0.002	0.008	0.011	-0.001	0.008	0.000	-0.005	-0.032
11.C	0.011	0.026	-0.003	0.017	0.048	-0.003	-0.001	-0.001	0.048
12.C	-0.082	-0.045	0.002	0.228	-0.062	-0.001	0.002	0.002	-0.001
13.H	0.021	0.444	0.242	-0.016	-0.435	-0.200	-0.001	-0.017	-0.010
14.H	0.024	0.469	-0.231	-0.018	-0.398	0.201	0.000	-0.012	0.010
15.H	-0.018	-0.270	-0.398	-0.017	-0.195	-0.468	0.000	0.007	0.018
16.H	-0.025	-0.166	0.444	-0.021	-0.114	0.492	0.000	0.006	-0.015
17.H	0.002	0.023	0.005	0.000	-0.005	-0.006	0.017	0.439	-0.014
18.H	0.002	-0.017	-0.007	0.000	-0.005	0.000	0.019	-0.172	0.006
19.H	-0.001	0.009	-0.007	0.000	0.002	0.000	0.014	0.395	0.018
20.H	-0.001	0.007	0.001	0.000	0.000	0.000	-0.011	0.541	0.003
21.H	-0.002	-0.030	0.000	0.000	-0.007	0.000	-0.027	-0.061	-0.003

	1473.320			1554.374			1603.996		
1.C	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000
2.C	-0.095	0.000	0.000	0.002	0.000	0.000	-0.459	0.000	0.000
3.N	-0.261	0.092	0.000	0.249	-0.154	0.000	0.187	0.102	0.000
4.C	-0.151	0.100	-0.003	-0.290	0.014	0.001	0.174	-0.183	0.000
5.C	0.187	-0.022	0.002	0.055	0.145	-0.001	-0.436	0.109	0.000
6.C	0.127	-0.057	-0.005	0.507	-0.222	-0.001	0.265	0.079	-0.003
7.Re	0.097	-0.002	-0.001	0.005	-0.070	-0.002	-0.082	0.091	0.002
8.O	0.001	0.011	0.000	0.002	-0.026	0.002	0.000	-0.001	-0.004
9.O	0.003	-0.014	0.000	-0.001	0.036	0.002	-0.001	0.000	-0.004

10.O	0.002	0.003	0.018	-0.001	-0.006	-0.042	-0.001	-0.001	-0.005
11.C	-0.002	0.002	-0.024	0.000	0.000	0.057	0.000	0.000	0.000
12.C	0.001	-0.001	0.001	0.000	0.000	-0.001	0.000	0.000	0.000
13.H	0.000	0.010	0.005	0.000	0.004	0.003	0.000	0.004	0.003
14.H	-0.002	0.008	0.003	0.000	0.001	-0.001	0.000	0.000	-0.008
15.H	0.000	-0.004	-0.020	0.000	0.000	-0.002	0.000	0.000	-0.004
16.H	0.000	0.001	0.017	0.000	-0.003	0.001	0.000	-0.002	0.001
17.H	-0.017	0.355	-0.001	0.004	-0.115	0.003	-0.018	-0.323	0.010
18.H	0.009	0.575	-0.019	-0.020	-0.230	-0.004	-0.008	0.313	-0.008
19.H	0.020	-0.139	-0.033	-0.003	-0.575	-0.013	0.019	0.043	-0.021
20.H	0.018	0.198	0.001	0.023	0.230	0.001	-0.009	0.280	0.002
21.H	0.007	0.545	0.011	-0.002	0.193	0.004	-0.020	-0.319	-0.005

	2964.287			3044.125			3051.113		
1.C	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000
2.C	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000
3.N	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.C	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000
6.C	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000
7.Re	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000
8.O	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000
9.O	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.001	0.000	0.000
10.O	-0.001	0.000	-0.001	0.001	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000
11.C	-0.026	-0.020	0.005	0.003	0.001	0.030	-0.002	0.000	-0.012
12.C	-0.041	0.034	-0.012	0.031	-0.007	-0.054	0.047	0.009	0.010
13.H	0.005	0.008	0.000	-0.143	-0.033	0.026	-0.534	-0.010	-0.023
14.H	0.001	0.004	0.016	-0.331	0.030	0.042	-0.756	-0.016	-0.006
15.H	0.509	0.007	0.025	-0.790	0.035	0.007	0.319	-0.013	-0.004
16.H	0.858	-0.017	-0.018	0.484	-0.034	0.021	-0.190	0.016	-0.006
17.H	-0.001	0.000	0.000	0.002	0.000	0.000	0.006	0.000	0.000
18.H	-0.002	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000
19.H	0.000	0.000	0.000	0.002	0.000	0.000	0.006	0.000	0.000
20.H	-0.001	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.004	0.000	0.000
21.H	-0.001	0.000	0.000	0.001	0.000	0.000	0.002	0.000	0.000

	3128.502			3139.258			3144.225		
1.C	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000
2.C	0.013	0.000	0.000	0.021	0.000	0.000	-0.007	0.000	0.000
3.N	-0.003	0.014	0.000	-0.008	0.032	0.000	0.009	-0.025	0.000
4.C	-0.004	-0.005	0.000	0.006	-0.002	0.000	0.012	0.014	0.000
5.C	0.016	0.016	0.000	-0.017	-0.024	0.000	-0.010	-0.031	0.000
6.C	-0.015	-0.046	0.000	-0.027	0.037	0.000	-0.052	0.023	0.000
7.Re	0.000	0.002	0.000	0.000	0.005	0.000	0.000	-0.006	0.000
8.O	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000
9.O	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000
10.O	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000
11.C	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000
12.C	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000
13.H	0.004	0.000	0.000	-0.001	0.000	0.000	0.013	-0.001	0.000
14.H	0.002	0.000	0.000	0.004	0.000	0.000	-0.004	0.001	0.000
15.H	0.000	0.000	0.000	-0.001	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000
16.H	-0.002	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.001	0.000	0.000
17.H	0.079	-0.001	0.000	0.224	-0.004	0.001	-0.229	0.005	-0.001
18.H	-0.385	0.011	0.000	-0.745	0.027	-0.001	0.435	-0.021	0.000
19.H	0.796	-0.034	-0.001	-0.028	0.020	-0.001	0.585	-0.001	0.000
20.H	-0.447	0.012	0.000	0.599	-0.020	0.000	0.572	-0.026	0.000
21.H	0.088	-0.002	0.000	-0.170	0.003	0.000	-0.287	0.006	0.000

	3157.466			3161.950			3165.309		
1.C	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000
2.C	0.010	0.000	0.000	-0.043	0.000	0.000	0.038	0.000	0.000
3.N	0.005	-0.007	0.000	-0.025	0.033	0.000	0.022	-0.027	0.000
4.C	-0.001	0.004	0.000	0.022	-0.002	0.000	0.025	0.037	0.000
5.C	-0.001	0.002	0.000	0.039	-0.030	0.000	0.044	-0.031	0.000
6.C	0.001	0.000	0.000	0.007	0.006	0.000	0.016	0.007	0.000
7.Re	0.000	-0.004	0.000	0.000	0.021	0.001	-0.001	-0.017	-0.001
8.O	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	-0.001	0.000	0.000	0.001
9.O	0.001	0.000	0.000	0.000	0.000	-0.001	0.000	0.000	0.001
10.O	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.001
11.C	-0.001	0.000	-0.002	0.000	0.000	-0.001	0.000	0.000	0.000
12.C	-0.010	-0.015	-0.024	-0.002	-0.002	-0.003	0.001	0.001	0.002
13.H	0.810	-0.042	-0.011	0.116	-0.006	-0.002	-0.082	0.004	0.001
14.H	-0.554	0.046	-0.019	-0.076	0.006	-0.003	0.047	-0.004	0.002
15.H	0.056	-0.003	0.000	0.008	0.000	0.000	-0.006	0.000	0.000
16.H	-0.038	0.003	-0.001	-0.005	0.000	0.000	0.002	0.000	0.000
17.H	-0.150	0.005	0.000	0.705	-0.023	0.002	-0.601	0.018	-0.002
18.H	-0.057	-0.003	0.000	0.206	0.015	0.000	-0.236	-0.011	0.000
19.H	-0.021	0.001	0.000	-0.006	-0.007	0.001	-0.130	-0.004	-0.001
20.H	-0.004	0.001	0.000	-0.186	-0.014	0.000	-0.271	-0.013	0.000
21.H	0.025	-0.001	0.000	-0.631	0.022	0.001	-0.688	0.023	0.001

List of All Frequencies:

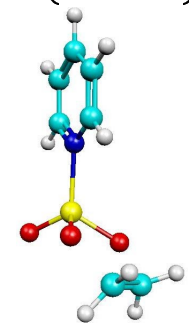
Intensities
==========

Frequency cm-1	Dipole Strength 1e-40 esu2 cm2	Absorption Intensity (degeneracy not counted) km/mole
-446.797289	347.400028	-38.906167
37.183986	128.579670	1.198412
61.980016	217.984259	3.386530
107.553147	29.940766	0.807168
141.813105	30.511162	1.084559
182.492895	52.503363	2.401658
190.786371	233.096726	11.147092
195.462964	50.127411	2.455940
231.584159	21.008568	1.219504
252.596904	27.920732	1.767799
304.079252	190.230180	14.499208
320.474641	52.219075	4.194700
381.383644	2.803393	0.267993
428.855369	51.799849	5.568233
495.590279	5.663964	0.703593
628.948535	8.768945	1.382422
647.095691	7.953808	1.290095
677.130118	630.707067	107.047837
681.644897	173.316202	29.612524
705.400151	109.831399	19.419593
745.719243	240.814578	45.012817
787.681907	59.744039	11.795695
841.857955	3.315963	0.699724
859.761102	178.951885	38.564894
875.783434	210.301646	46.165492
933.054656	1.006506	0.235397
952.363020	46.836824	11.180675
957.276561	65.767482	15.780716
968.379638	6.397189	1.552791
979.547966	276.775572	67.956583
1005.479632	53.177844	13.402385
1033.072246	1.556250	0.402984
1035.281348	2.845025	0.738282
1061.982986	55.343259	14.731954
1079.524670	24.456882	6.617771
1094.511731	36.638942	10.051744
1167.440401	5.316509	1.555748
1205.053918	105.492011	31.864281
1210.835623	8.693786	2.638592
1284.031781	2.825033	0.909238
1317.457539	52.053112	17.189427
1351.947956	22.646990	7.674472
1414.500721	42.277882	14.989753
1430.362166	8.302461	2.976672
1454.399791	114.289806	41.664806
1473.319511	38.572982	14.244861
1554.374405	6.154145	2.397736
1603.995917	40.196525	16.161060
2964.287244	3.681700	2.735563
3044.125143	6.755583	5.154700
3051.112639	16.201431	12.390524
3128.502400	0.220283	0.172741
3139.258358	9.797587	7.709465
3144.224554	42.984370	33.876785
3157.465890	12.791639	10.123786
3161.949561	29.846957	23.655551
3165.308761	4.393380	3.485723

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

1237.7709	3833.6772	4423.2362
0.9893	0.1303	-0.0654
-0.0676	0.8074	0.5861
0.1291	-0.5755	0.8076

TS(I-IIIa)



CCSD=-629.6485379

ATOMS cartesian

Re	2.624878	0.025809	-0.176402
C	-0.426807	-0.246768	-0.303285
C	-0.164626	-0.050988	1.082692
H	-0.660177	-1.257828	-0.642229
H	-0.953555	0.538714	-0.848864
H	-0.231002	-0.919658	1.740795
H	-0.489323	0.883481	1.545427
O	1.142541	-0.117164	-1.177861
O	1.597075	0.220581	1.282832
O	3.437770	-1.465216	-0.094378
N	3.759998	1.756441	-0.512426
C	3.205284	2.846427	-1.106494
C	3.972427	3.947070	-1.436807
C	5.335434	3.938751	-1.155390
C	5.900383	2.819407	-0.545571
C	5.094425	1.740765	-0.236989
H	2.137975	2.803427	-1.316161
H	3.498030	4.798200	-1.925986
H	5.955472	4.796873	-1.419192
H	6.963941	2.775924	-0.312794
H	5.489887	0.842398	0.234094

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)

	-418.796			-54.954			47.316		
1.Re	0.004	-0.002	-0.008	0.000	-0.016	-0.018	-0.003	0.029	0.065
2.C	0.506	0.034	-0.224	-0.017	0.102	0.104	0.021	-0.001	-0.130
3.C	0.557	0.060	0.017	0.052	0.043	0.099	-0.057	-0.247	-0.078
4.H	-0.013	0.040	0.079	-0.076	0.125	0.077	0.054	0.055	-0.322
5.H	0.028	-0.054	0.083	-0.003	0.148	0.155	0.028	0.085	-0.013
6.H	-0.042	0.012	-0.087	0.053	0.021	0.070	-0.083	-0.369	-0.242
7.H	0.025	-0.075	-0.048	0.106	0.038	0.147	-0.110	-0.340	0.074
8.O	-0.386	-0.030	0.160	-0.046	0.062	0.039	0.040	0.219	-0.030
9.O	-0.394	-0.024	0.010	0.067	-0.024	0.030	-0.084	-0.288	0.055
10.O	-0.044	0.013	0.023	-0.051	-0.046	-0.090	-0.018	0.004	-0.257
11.N	-0.018	0.007	0.051	0.028	-0.025	-0.037	0.004	0.036	0.024
12.C	-0.001	-0.002	0.011	0.043	-0.107	-0.201	0.024	0.000	-0.060
13.C	0.003	-0.007	-0.012	0.013	-0.071	-0.154	0.048	-0.047	-0.158
14.C	-0.002	-0.001	-0.003	-0.032	0.053	0.066	0.050	-0.059	-0.167
15.C	-0.004	-0.007	-0.004	-0.044	0.131	0.222	0.027	-0.018	-0.073
16.C	-0.004	0.001	0.012	-0.013	0.092	0.166	0.002	0.028	0.025
17.H	-0.005	0.014	0.035	0.079	-0.196	-0.362	0.025	-0.003	-0.065
18.H	0.004	-0.013	-0.021	0.025	-0.139	-0.284	0.068	-0.079	-0.233
19.H	-0.003	0.001	0.004	-0.057	0.089	0.124	0.071	-0.099	-0.251
20.H	-0.003	-0.008	-0.007	-0.078	0.225	0.394	0.028	-0.024	-0.080
21.H	-0.007	0.010	0.030	-0.018	0.155	0.290	-0.014	0.056	0.091

	52.537			81.915			111.058		
1.Re	0.035	-0.047	0.042	0.009	-0.012	-0.026	0.003	-0.002	-0.003
2.C	0.030	0.255	-0.126	-0.034	0.201	-0.024	0.029	-0.152	0.014
3.C	-0.031	0.225	-0.108	0.017	-0.027	-0.003	-0.029	0.196	-0.025
4.H	-0.056	0.278	-0.138	-0.186	0.286	-0.169	0.223	-0.274	0.239
5.H	0.133	0.303	-0.155	0.088	0.365	0.094	-0.112	-0.377	-0.172
6.H	-0.186	0.232	-0.114	0.056	-0.140	-0.148	-0.155	0.392	0.219
7.H	0.038	0.260	-0.130	0.042	-0.105	0.171	0.056	0.366	-0.307
8.O	0.071	0.142	-0.043	0.012	0.008	-0.022	-0.007	0.046	0.002
9.O	-0.030	-0.017	-0.003	0.034	0.044	-0.021	0.020	-0.035	0.010
10.O	-0.104	-0.127	-0.037	0.019	-0.001	0.075	-0.023	-0.023	-0.118
11.N	0.003	-0.045	-0.108	-0.006	0.023	0.253	0.001	0.018	0.105
12.C	-0.075	-0.032	-0.008	-0.055	-0.036	0.181	-0.014	-0.006	0.074

13.C	-0.150	0.045	0.074	-0.080	-0.085	-0.035	-0.019	-0.029	-0.013
14.C	-0.141	0.098	0.038	-0.055	-0.063	-0.166	-0.009	-0.026	-0.065
15.C	-0.059	0.078	-0.081	-0.014	0.019	-0.046	0.001	0.011	-0.005
16.C	0.007	0.007	-0.149	0.016	0.060	0.163	0.006	0.032	0.081
17.H	-0.074	-0.090	0.000	-0.078	-0.044	0.296	-0.021	-0.011	0.110
18.H	-0.211	0.058	0.157	-0.123	-0.142	-0.094	-0.030	-0.053	-0.046
19.H	-0.198	0.157	0.096	-0.068	-0.109	-0.347	-0.009	-0.051	-0.148
20.H	-0.048	0.113	-0.123	0.003	0.056	-0.115	0.007	0.023	-0.030
21.H	0.075	-0.013	-0.242	0.046	0.126	0.262	0.015	0.058	0.123

	166.028			204.120			220.723		
1.Re	0.011	-0.003	0.005	0.017	-0.047	0.002	-0.041	-0.046	0.007
2.C	-0.011	0.166	-0.010	0.021	0.006	0.025	-0.086	0.086	-0.010
3.C	-0.011	0.166	-0.007	0.046	-0.011	0.022	-0.095	0.081	-0.004
4.H	-0.213	0.202	0.024	0.034	0.010	0.007	-0.326	0.129	0.027
5.H	0.142	0.248	-0.043	0.022	0.016	0.039	0.100	0.184	-0.052
6.H	-0.220	0.209	0.027	0.088	-0.025	0.007	-0.291	0.119	0.024
7.H	0.151	0.248	-0.055	0.019	-0.031	0.044	0.071	0.161	-0.048
8.O	-0.001	-0.088	0.025	0.043	0.019	-0.022	-0.075	-0.224	0.058
9.O	0.006	-0.118	0.026	0.036	0.037	-0.004	-0.065	-0.174	0.015
10.O	0.352	0.170	-0.105	-0.169	-0.147	0.046	0.120	0.047	-0.021
11.N	-0.179	0.025	-0.031	-0.186	0.219	-0.013	0.138	0.075	0.009
12.C	-0.094	0.051	-0.059	-0.038	0.300	-0.026	0.146	0.101	0.029
13.C	0.008	-0.008	-0.020	0.131	0.190	-0.057	0.105	0.135	-0.002
14.C	-0.003	-0.117	0.040	0.138	0.002	-0.082	0.122	0.188	-0.086
15.C	-0.100	-0.155	0.059	-0.041	-0.028	0.025	0.135	0.202	-0.071
16.C	-0.192	-0.089	0.028	-0.206	0.102	0.056	0.158	0.181	-0.022
17.H	-0.087	0.112	-0.107	-0.040	0.439	-0.044	0.144	0.114	0.035
18.H	0.102	0.033	-0.040	0.254	0.243	-0.087	0.040	0.109	0.014
19.H	0.071	-0.165	0.058	0.271	-0.120	-0.167	0.095	0.192	-0.136
20.H	-0.113	-0.231	0.103	-0.058	-0.162	0.072	0.143	0.208	-0.101
21.H	-0.292	-0.122	0.050	-0.322	0.086	0.126	0.227	0.216	-0.016

	303.828			329.908			334.372		
1.Re	0.010	0.016	0.021	0.016	0.077	-0.015	0.007	0.007	0.036
2.C	0.137	0.030	-0.213	0.027	0.047	0.023	-0.162	0.016	0.188
3.C	-0.192	-0.072	-0.138	0.085	0.055	0.007	0.215	0.026	0.118
4.H	-0.194	0.104	-0.221	-0.270	0.103	0.069	-0.224	0.045	0.168
5.H	0.302	0.146	-0.221	0.313	0.196	-0.036	0.052	0.137	0.170
6.H	0.036	-0.149	-0.228	-0.261	0.135	0.075	0.289	-0.019	0.080
7.H	-0.259	-0.134	-0.077	0.380	0.204	-0.084	-0.042	-0.103	0.217
8.O	-0.140	-0.305	0.241	0.121	-0.348	-0.064	0.273	-0.263	-0.203
9.O	0.241	0.272	0.102	0.070	-0.390	0.067	-0.378	0.234	-0.172
10.O	-0.114	-0.067	-0.318	-0.319	-0.085	0.109	-0.039	-0.040	-0.383
11.N	-0.008	-0.003	-0.003	-0.010	-0.004	0.004	0.022	-0.016	-0.007
12.C	-0.018	0.001	0.022	-0.036	-0.036	-0.013	-0.002	-0.014	0.036
13.C	-0.009	-0.016	-0.007	-0.046	-0.031	0.016	-0.018	-0.010	0.029
14.C	-0.010	-0.025	-0.004	-0.047	-0.059	0.026	-0.003	-0.029	-0.038
15.C	-0.013	-0.011	0.028	-0.021	-0.062	0.000	0.005	0.008	0.022
16.C	-0.014	-0.013	0.008	-0.023	-0.044	0.019	0.012	0.006	0.038
17.H	-0.028	0.023	0.068	-0.032	-0.069	-0.035	-0.003	-0.029	0.045
18.H	-0.001	-0.012	-0.008	-0.027	-0.017	0.023	-0.029	-0.008	0.044
19.H	-0.006	-0.030	-0.011	-0.047	-0.056	0.038	-0.001	-0.053	-0.110
20.H	-0.019	0.001	0.056	-0.016	-0.053	-0.025	0.004	0.030	0.027
21.H	-0.022	-0.017	0.008	-0.053	-0.052	0.032	0.016	0.013	0.049

	363.970			394.549			409.342		
1.Re	-0.004	-0.001	0.001	-0.015	-0.008	0.005	0.104	0.016	-0.022
2.C	0.007	0.004	0.002	0.025	0.004	-0.006	-0.308	-0.029	0.064
3.C	0.016	0.007	0.000	0.051	0.008	-0.011	-0.305	-0.025	0.064
4.H	0.005	0.004	0.005	0.037	0.002	-0.007	-0.354	-0.016	0.052
5.H	0.013	0.006	-0.001	0.028	0.006	-0.004	-0.241	0.001	0.035
6.H	-0.002	0.011	0.004	0.053	0.006	-0.013	-0.337	-0.004	0.092
7.H	0.026	0.012	-0.003	0.050	0.006	-0.009	-0.237	0.005	0.057
8.O	0.017	-0.005	-0.019	0.050	-0.018	-0.049	-0.212	0.008	0.266
9.O	0.006	-0.012	0.007	0.042	0.032	0.022	-0.295	-0.056	-0.167
10.O	0.000	0.000	0.003	0.003	-0.003	-0.030	-0.082	-0.068	0.026
11.N	-0.007	0.008	0.018	-0.066	0.110	0.267	-0.038	0.067	0.099
12.C	-0.033	0.073	0.159	0.032	-0.029	-0.101	-0.032	0.009	-0.019
13.C	0.042	-0.081	-0.186	0.047	-0.042	-0.130	0.002	-0.038	-0.081
14.C	0.001	0.012	0.017	-0.027	0.128	0.219	-0.033	0.006	0.101
15.C	-0.030	0.078	0.164	0.031	-0.062	-0.181	-0.001	-0.050	-0.034
16.C	0.034	-0.069	-0.178	0.007	-0.012	-0.062	-0.018	-0.030	-0.041
17.H	-0.092	0.202	0.440	0.058	-0.060	-0.227	-0.031	-0.008	-0.025
18.H	0.082	-0.170	-0.380	0.071	-0.114	-0.281	0.053	-0.066	-0.179
19.H	-0.003	0.024	0.043	-0.092	0.279	0.561	-0.052	0.062	0.239
20.H	-0.064	0.144	0.329	0.071	-0.169	-0.385	0.009	-0.078	-0.091
21.H	0.096	-0.206	-0.490	0.029	-0.027	-0.110	-0.033	-0.066	-0.096

	522.245			638.648			659.876		
1.Re	-0.004	-0.002	-0.017	-0.006	-0.006	0.002	0.009	0.010	-0.004
2.C	0.380	0.065	0.094	0.010	0.001	0.000	-0.006	-0.004	0.000
3.C	-0.315	-0.018	0.234	0.007	0.001	-0.001	-0.008	-0.006	0.005
4.H	0.382	0.080	0.051	-0.009	0.006	-0.002	-0.006	0.002	-0.017

5.H	0.426	0.037	0.013	0.005	0.003	0.005	0.001	0.009	0.011
6.H	-0.337	-0.051	0.189	0.021	0.001	-0.001	-0.053	0.007	0.018
7.H	-0.378	-0.012	0.181	-0.006	-0.001	-0.005	0.005	0.010	-0.016
8.O	0.075	-0.012	-0.062	-0.010	0.001	-0.012	0.010	-0.002	0.002
9.O	-0.092	-0.001	-0.031	0.009	0.002	-0.008	-0.010	-0.001	0.019
10.O	0.002	0.002	0.002	0.007	0.006	0.002	-0.016	0.000	-0.002
11.N	0.002	0.005	0.011	-0.006	0.179	-0.079	-0.220	-0.173	0.063
12.C	0.002	-0.002	0.002	-0.329	0.009	-0.056	-0.036	-0.181	0.026
13.C	-0.002	-0.002	-0.002	-0.049	-0.210	0.071	0.188	-0.262	0.200
14.C	-0.004	0.001	0.007	0.007	-0.191	0.102	0.252	0.196	-0.087
15.C	0.001	-0.001	-0.003	0.408	0.021	0.057	-0.049	0.138	-0.031
16.C	0.002	-0.001	0.004	0.055	0.235	-0.069	-0.198	0.155	-0.153
17.H	0.006	-0.011	-0.015	-0.330	-0.049	-0.072	-0.017	0.108	-0.127
18.H	0.001	-0.012	-0.024	0.260	-0.066	0.030	-0.011	-0.343	0.259
19.H	-0.003	-0.002	-0.004	-0.307	-0.005	-0.030	0.088	0.285	-0.194
20.H	0.006	-0.006	-0.029	0.424	0.003	-0.002	-0.107	-0.230	0.169
21.H	0.005	-0.010	-0.015	-0.164	0.126	-0.100	-0.014	0.257	-0.130

	673.441			735.015			749.391		
1.Re	0.000	0.001	0.000	0.000	-0.001	-0.002	-0.012	0.000	0.004
2.C	0.002	0.000	0.001	-0.003	-0.003	-0.002	0.039	-0.067	0.027
3.C	-0.001	0.002	0.001	-0.004	-0.004	0.004	0.028	-0.073	-0.017
4.H	0.005	-0.001	0.003	-0.006	0.002	-0.015	-0.296	0.110	-0.266
5.H	-0.001	-0.004	-0.003	0.001	0.007	0.009	0.449	0.296	0.160
6.H	-0.003	-0.001	-0.003	-0.046	0.006	0.014	-0.157	0.202	0.323
7.H	-0.006	0.000	0.001	0.005	0.010	-0.017	0.340	0.209	-0.374
8.O	0.005	0.001	-0.001	0.010	0.002	0.001	0.048	0.047	0.092
9.O	-0.005	-0.003	0.005	-0.009	0.004	0.021	0.020	0.014	-0.134
10.O	0.000	0.002	0.000	-0.001	0.001	-0.001	0.005	-0.008	0.001
11.N	0.015	-0.062	-0.117	-0.017	0.055	0.104	0.000	-0.001	-0.001
12.C	-0.017	0.028	0.091	0.014	-0.034	-0.110	0.003	-0.003	0.002
13.C	0.036	-0.068	-0.111	-0.014	0.022	0.010	0.000	-0.003	-0.001
14.C	0.003	0.038	0.050	0.009	-0.060	-0.098	0.000	0.001	0.000
15.C	0.016	-0.046	-0.123	0.012	0.004	0.026	-0.001	0.000	-0.001
16.C	-0.030	0.042	0.076	0.036	-0.048	-0.102	-0.002	0.000	0.001
17.H	-0.099	0.218	0.478	-0.051	0.088	0.196	0.001	0.004	0.010
18.H	-0.038	0.053	0.173	-0.100	0.272	0.529	-0.006	-0.001	0.008
19.H	-0.093	0.236	0.469	-0.078	0.133	0.330	-0.003	0.004	0.004
20.H	-0.042	0.052	0.164	-0.087	0.250	0.525	-0.001	0.000	0.002
21.H	-0.098	0.223	0.479	-0.037	0.078	0.201	-0.001	-0.001	-0.001

	762.987			789.725			843.158		
1.Re	0.018	-0.004	-0.005	0.016	0.008	0.058	0.000	0.000	0.000
2.C	-0.037	-0.074	-0.027	0.070	-0.001	0.009	-0.001	0.000	-0.001
3.C	-0.016	-0.065	0.052	-0.069	0.004	0.047	-0.001	0.001	0.001
4.H	-0.490	0.085	-0.198	-0.404	0.020	0.254	-0.005	-0.001	0.005
5.H	0.107	0.231	0.268	-0.152	-0.008	0.206	-0.001	-0.002	-0.004
6.H	-0.442	0.166	0.319	0.369	0.023	0.109	0.002	-0.001	-0.001
7.H	-0.014	0.139	-0.350	0.123	0.040	0.103	0.000	-0.001	0.006
8.O	-0.079	0.017	-0.169	-0.378	-0.047	-0.374	-0.002	0.000	-0.003
9.O	-0.038	0.070	0.217	0.199	-0.047	-0.376	0.000	-0.001	-0.001
10.O	-0.007	0.018	-0.002	-0.002	-0.001	-0.016	0.001	-0.002	0.000
11.N	0.003	-0.007	-0.012	-0.001	0.008	0.018	0.000	0.000	-0.001
12.C	-0.001	0.008	0.005	0.010	-0.011	0.003	0.017	-0.037	-0.080
13.C	-0.004	0.010	-0.004	0.009	-0.008	0.001	0.012	-0.024	-0.050
14.C	-0.006	0.001	0.009	0.013	0.002	-0.022	0.001	0.001	-0.003
15.C	0.005	-0.003	0.001	-0.018	0.000	-0.010	-0.012	0.021	0.050
16.C	0.006	0.001	0.010	-0.015	-0.008	-0.016	-0.019	0.038	0.085
17.H	0.003	-0.010	-0.011	0.011	-0.026	0.001	-0.095	0.200	0.446
18.H	0.009	-0.009	-0.050	-0.030	0.025	0.097	-0.089	0.196	0.431
19.H	0.006	-0.019	-0.030	-0.003	0.052	0.101	0.000	0.005	0.008
20.H	0.015	-0.012	-0.045	-0.046	0.036	0.122	0.083	-0.191	-0.427
21.H	0.009	-0.008	-0.009	-0.012	0.016	0.026	0.089	-0.205	-0.469

	917.510			938.706			945.274		
1.Re	0.000	0.000	-0.001	0.000	0.002	0.000	0.000	0.000	0.000
2.C	0.000	-0.002	0.001	0.005	0.025	-0.001	0.000	-0.001	0.000
3.C	0.002	0.003	-0.002	-0.004	0.006	-0.007	0.000	0.004	0.000
4.H	-0.006	0.004	-0.015	0.296	0.099	-0.402	0.004	0.007	-0.027
5.H	0.011	0.011	0.010	-0.355	0.090	0.428	-0.011	0.011	0.026
6.H	0.026	0.006	0.004	0.329	0.184	0.251	0.042	0.014	0.016
7.H	-0.041	-0.006	-0.013	-0.357	0.031	-0.290	-0.046	-0.003	-0.017
8.O	0.002	0.000	0.004	0.003	-0.031	0.010	0.000	-0.001	0.000
9.O	-0.002	0.000	0.007	0.001	-0.026	-0.004	0.000	-0.003	0.000
10.O	0.003	-0.004	0.002	0.004	-0.010	0.000	0.003	-0.005	0.001
11.N	0.004	-0.002	-0.010	0.000	-0.001	0.002	0.001	0.003	0.000
12.C	-0.015	0.037	0.088	-0.001	0.001	0.001	0.016	-0.036	-0.077
13.C	0.009	-0.021	-0.038	0.000	0.000	-0.006	-0.018	0.038	0.092
14.C	0.014	-0.023	-0.063	0.000	0.002	0.002	0.002	0.003	-0.003
15.C	0.005	-0.015	-0.037	-0.001	0.002	0.006	0.020	-0.042	-0.095
16.C	-0.020	0.031	0.080	0.001	-0.003	-0.007	-0.019	0.035	0.083
17.H	0.118	-0.246	-0.541	-0.001	-0.002	-0.001	-0.082	0.172	0.383
18.H	-0.060	0.101	0.242	-0.005	0.013	0.021	0.091	-0.216	-0.458
19.H	-0.076	0.172	0.359	0.006	-0.006	-0.011	-0.008	0.014	0.011
20.H	-0.049	0.095	0.228	0.007	-0.016	-0.031	-0.098	0.213	0.495
21.H	0.087	-0.224	-0.496	-0.006	0.014	0.033	0.072	-0.183	-0.411

	959.355			972.885			991.311		
1.Re	0.001	0.000	0.003	0.000	0.001	0.000	-0.028	0.068	-0.005
2.C	-0.004	0.078	-0.014	0.000	0.001	0.000	0.001	-0.006	-0.013
3.C	0.002	-0.082	0.011	0.000	-0.001	0.000	0.005	-0.004	0.013
4.H	0.423	-0.011	-0.034	0.007	0.000	-0.002	-0.085	-0.019	0.073
5.H	-0.444	-0.150	0.075	-0.009	-0.002	0.003	0.024	-0.019	-0.056
6.H	-0.517	-0.012	0.060	-0.009	0.001	0.002	-0.117	-0.034	-0.031
7.H	0.533	0.131	-0.058	0.006	0.002	-0.003	0.051	-0.004	0.047
8.O	-0.005	-0.028	-0.004	0.000	-0.001	0.000	-0.043	-0.009	-0.034
9.O	0.005	0.031	-0.020	0.000	0.000	0.000	-0.028	0.004	0.047
10.O	-0.005	0.003	-0.011	0.002	-0.004	0.000	0.403	-0.775	0.043
11.N	-0.003	-0.010	-0.003	-0.003	-0.011	-0.011	-0.078	-0.082	0.017
12.C	-0.009	0.004	-0.001	0.002	-0.002	-0.004	-0.110	0.017	-0.028
13.C	-0.002	0.007	-0.003	-0.018	0.038	0.069	-0.027	0.051	-0.036
14.C	0.002	0.002	-0.001	0.025	-0.052	-0.123	0.053	0.107	-0.020
15.C	0.006	-0.003	-0.004	-0.008	0.030	0.072	0.101	0.009	0.016
16.C	0.003	0.001	0.010	0.000	-0.006	-0.003	0.078	-0.111	0.055
17.H	-0.006	-0.002	-0.017	-0.014	0.037	0.074	-0.116	0.047	-0.056
18.H	0.006	0.010	-0.006	0.072	-0.180	-0.400	-0.048	0.074	0.004
19.H	0.005	0.001	0.001	-0.141	0.311	0.669	0.026	0.105	-0.137
20.H	0.001	0.011	0.026	0.085	-0.178	-0.392	0.118	0.067	0.005
21.H	0.016	-0.018	-0.036	-0.021	0.027	0.078	-0.002	-0.125	0.127

	1006.953			1047.508			1060.651		
1.Re	0.008	-0.009	0.002	-0.001	-0.004	0.000	-0.002	-0.002	0.000
2.C	0.002	-0.011	0.006	0.002	0.000	0.000	0.000	0.003	-0.001
3.C	-0.006	0.012	-0.004	0.000	-0.001	-0.003	0.002	-0.004	-0.001
4.H	-0.036	0.003	-0.003	-0.013	0.003	0.001	0.008	-0.001	0.006
5.H	0.067	0.020	-0.011	-0.004	0.005	0.016	-0.015	-0.005	0.002
6.H	0.108	0.000	-0.013	-0.003	0.006	0.007	-0.021	0.001	0.003
7.H	-0.055	-0.017	0.022	0.004	0.003	-0.010	0.012	0.003	-0.009
8.O	0.008	0.005	0.007	0.001	-0.001	0.001	0.000	0.000	0.000
9.O	0.008	-0.009	-0.021	-0.003	0.001	0.004	-0.003	0.003	0.007
10.O	-0.083	0.144	-0.009	-0.006	0.014	-0.001	0.005	-0.004	0.001
11.N	-0.176	-0.237	0.052	0.116	0.149	-0.037	0.114	0.164	-0.038
12.C	-0.272	0.013	-0.055	-0.262	0.037	-0.072	-0.005	-0.062	0.022
13.C	-0.107	0.196	-0.114	0.140	-0.153	0.102	-0.081	-0.025	-0.006
14.C	0.160	0.249	-0.066	0.077	0.083	-0.029	0.090	0.133	-0.039
15.C	0.255	-0.022	0.057	-0.241	0.058	-0.067	0.011	-0.074	0.039
16.C	0.129	-0.223	0.133	0.153	-0.181	0.104	-0.058	-0.042	-0.003
17.H	-0.296	-0.038	-0.061	-0.280	0.001	-0.047	-0.016	-0.331	0.152
18.H	-0.158	0.211	-0.105	0.516	0.026	0.074	-0.499	-0.241	0.011
19.H	0.165	0.260	-0.142	0.126	0.062	0.035	0.092	0.146	-0.053
20.H	0.279	-0.022	0.083	-0.206	0.370	-0.223	-0.035	-0.492	0.201
21.H	0.081	-0.289	0.107	0.200	-0.167	0.126	-0.354	-0.153	0.028

	1076.365			1096.405			1104.833		
1.Re	0.001	-0.001	0.000	-0.003	0.000	-0.001	-0.001	0.001	0.003
2.C	-0.002	0.003	0.000	0.075	0.001	-0.009	-0.035	0.002	0.058
3.C	0.002	-0.001	0.001	-0.021	0.000	-0.043	0.088	0.012	-0.006
4.H	0.008	0.000	0.002	-0.560	-0.005	0.422	0.145	-0.003	-0.037
5.H	-0.017	-0.004	0.005	-0.494	-0.062	0.436	0.112	0.037	-0.025
6.H	-0.025	0.000	-0.001	-0.146	-0.052	-0.125	-0.673	-0.075	-0.184
7.H	-0.020	-0.004	-0.009	-0.118	-0.030	-0.054	-0.635	-0.151	-0.165
8.O	-0.001	0.000	0.000	0.065	0.012	0.027	-0.011	-0.002	-0.002
9.O	0.003	0.000	-0.003	0.012	-0.001	-0.015	0.051	-0.001	-0.048
10.O	-0.008	0.011	0.000	0.000	-0.001	0.000	0.000	0.000	0.000
11.N	-0.083	0.060	-0.042	0.000	-0.003	0.000	0.001	-0.002	0.002
12.C	0.112	0.043	0.003	0.000	0.000	0.000	-0.003	-0.001	-0.001
13.C	0.040	-0.092	0.046	-0.001	0.001	-0.001	-0.001	0.002	-0.001
14.C	-0.087	0.048	-0.035	0.000	0.000	0.001	0.003	0.000	0.001
15.C	0.075	0.014	0.011	0.001	0.000	0.000	-0.002	0.000	0.000
16.C	0.014	-0.116	0.051	0.000	0.001	0.000	0.000	0.001	-0.001
17.H	0.135	0.376	-0.136	0.000	-0.001	-0.003	-0.005	-0.006	0.008
18.H	-0.204	-0.229	0.068	-0.002	0.001	-0.001	0.002	0.005	0.001
19.H	-0.476	0.267	-0.235	0.004	-0.004	-0.002	0.012	-0.006	0.004
20.H	0.125	0.325	-0.121	0.001	-0.004	0.000	-0.003	-0.005	0.003
21.H	-0.299	-0.258	0.065	0.006	0.002	-0.003	0.008	0.006	0.003

	1170.275			1182.974			1184.650		
1.Re	0.000	0.000	0.000	-0.005	0.000	0.001	0.000	0.000	-0.001
2.C	-0.001	-0.003	-0.005	-0.052	-0.009	-0.259	-0.010	0.125	0.017
3.C	0.001	0.003	0.005	0.053	0.013	0.261	0.015	-0.124	-0.018
4.H	-0.006	0.001	-0.011	-0.329	0.011	-0.208	-0.021	-0.046	0.532
5.H	-0.004	0.000	0.001	-0.285	-0.211	-0.374	0.049	-0.143	-0.415
6.H	-0.006	0.000	0.001	-0.138	0.163	0.477	0.200	0.153	0.356
7.H	-0.003	-0.002	0.014	-0.250	-0.077	0.294	-0.220	0.031	-0.495
8.O	0.001	0.000	0.000	0.068	0.008	0.029	-0.003	0.004	-0.001
9.O	0.001	0.000	-0.002	0.055	-0.008	-0.055	-0.005	-0.003	0.008
10.O	0.001	-0.001	0.000	0.000	0.001	0.000	0.000	0.000	0.002
11.N	0.025	-0.012	0.010	0.000	0.000	-0.004	-0.001	-0.002	0.002
12.C	0.001	0.002	0.000	-0.002	-0.003	0.002	0.000	-0.002	0.000
13.C	0.029	0.015	-0.001	-0.001	0.000	0.000	0.001	0.002	-0.001

14.C	-0.047	0.027	-0.021	0.002	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000
15.C	-0.008	-0.032	0.013	-0.001	0.000	0.000	0.001	0.001	0.000
16.C	0.000	-0.001	0.000	0.001	0.001	0.000	-0.002	-0.001	0.000
17.H	-0.002	-0.097	0.039	0.000	-0.012	-0.006	-0.001	-0.011	0.007
18.H	0.452	0.240	-0.015	-0.012	-0.006	0.002	0.022	0.014	-0.001
19.H	-0.536	0.309	-0.252	0.030	-0.016	0.013	-0.010	0.006	-0.005
20.H	-0.063	-0.469	0.193	0.002	0.022	-0.008	0.001	0.001	0.001
21.H	0.104	0.045	0.000	-0.007	-0.003	0.000	-0.002	0.000	0.002

	1213.388			1297.547			1351.799		
1.Re	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000
2.C	0.000	-0.002	0.001	0.000	-0.001	-0.004	0.000	0.000	0.000
3.C	0.000	0.002	-0.001	0.003	0.000	0.003	0.000	0.000	0.000
4.H	0.004	0.000	-0.008	-0.007	0.000	-0.005	0.000	0.001	-0.004
5.H	-0.004	0.003	0.012	0.002	-0.002	-0.005	-0.002	-0.002	-0.001
6.H	-0.009	-0.005	-0.010	-0.006	0.007	0.014	-0.001	0.001	0.001
7.H	0.008	0.000	0.008	0.001	-0.004	0.009	0.003	-0.001	0.003
8.O	0.001	0.000	0.001	0.000	-0.001	0.000	0.000	-0.001	0.001
9.O	0.000	0.001	0.001	0.000	0.001	0.002	0.000	0.000	0.000
10.O	0.001	0.000	0.000	0.002	0.002	-0.001	0.001	-0.001	0.000
11.N	0.005	0.003	0.001	0.327	-0.198	0.154	-0.037	0.022	-0.016
12.C	0.016	-0.077	0.037	-0.039	0.293	-0.141	0.006	0.050	-0.022
13.C	0.024	0.038	-0.012	-0.151	-0.085	0.007	0.031	0.020	-0.002
14.C	0.008	0.010	-0.003	0.152	-0.085	0.069	0.067	-0.039	0.031
15.C	0.030	0.038	-0.010	0.027	0.163	-0.063	-0.007	-0.033	0.013
16.C	-0.086	-0.019	-0.010	-0.300	-0.100	-0.019	-0.050	-0.026	0.002
17.H	0.002	-0.473	0.211	-0.034	0.368	-0.161	-0.015	-0.518	0.230
18.H	0.402	0.242	-0.027	-0.109	-0.058	0.006	-0.283	-0.147	0.008
19.H	0.004	0.014	-0.009	-0.358	0.207	-0.176	-0.300	0.173	-0.140
20.H	0.082	0.420	-0.169	0.018	0.094	-0.043	0.035	0.295	-0.123
21.H	-0.491	-0.191	-0.009	-0.344	-0.124	-0.009	0.517	0.219	0.004

	1423.695			1447.910			1471.937		
1.Re	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000
2.C	-0.024	-0.008	-0.060	0.001	0.000	0.003	-0.002	-0.001	-0.004
3.C	0.001	-0.009	-0.066	0.000	0.000	0.004	0.000	0.001	0.005
4.H	0.258	-0.209	0.379	-0.014	0.008	-0.012	0.008	-0.007	0.008
5.H	0.165	0.347	0.292	-0.004	-0.014	-0.013	0.001	0.010	0.009
6.H	-0.116	0.321	0.375	0.009	-0.017	-0.020	0.003	-0.016	-0.016
7.H	-0.039	-0.253	0.426	-0.002	0.014	-0.026	0.003	0.013	-0.018
8.O	-0.002	0.000	0.001	0.001	0.000	-0.001	0.000	0.000	0.000
9.O	0.003	0.000	0.001	0.000	0.000	-0.001	0.000	0.001	0.001
10.O	0.000	0.000	0.000	0.001	-0.001	-0.001	0.002	-0.001	0.000
11.N	0.002	0.000	0.000	0.094	-0.051	0.039	0.044	0.061	-0.016
12.C	-0.002	-0.003	0.001	-0.112	-0.085	0.016	0.024	-0.097	0.048
13.C	0.002	0.003	-0.001	0.131	0.129	-0.030	-0.124	-0.026	-0.014
14.C	0.001	0.000	0.000	0.023	-0.010	0.009	0.044	0.073	-0.024
15.C	-0.001	-0.004	0.001	-0.081	-0.169	0.059	0.031	-0.110	0.055
16.C	0.001	0.003	-0.001	0.038	0.125	-0.048	-0.117	-0.027	-0.013
17.H	-0.002	0.011	-0.005	-0.117	0.347	-0.185	0.054	0.477	-0.204
18.H	-0.007	-0.001	0.000	-0.368	-0.122	-0.020	0.344	0.231	-0.035
19.H	-0.008	0.006	-0.002	-0.379	0.224	-0.176	0.082	0.075	-0.013
20.H	0.000	0.011	-0.003	-0.024	0.384	-0.175	0.103	0.369	-0.141
21.H	-0.005	0.002	-0.001	-0.379	-0.031	-0.062	0.492	0.244	-0.009

	1476.228			1556.667			1601.426		
1.Re	-0.001	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000
2.C	-0.048	-0.018	-0.110	0.000	0.000	0.001	-0.001	-0.001	-0.002
3.C	-0.004	0.013	0.119	0.000	0.000	-0.001	0.001	0.000	0.002
4.H	0.259	-0.243	0.360	0.001	-0.001	0.004	0.003	-0.002	-0.002
5.H	0.152	0.376	0.274	0.007	0.003	-0.002	-0.003	0.002	0.002
6.H	0.121	-0.336	-0.333	0.003	0.001	0.001	-0.005	-0.005	-0.005
7.H	0.029	0.276	-0.399	-0.001	-0.001	0.000	0.003	0.003	-0.003
8.O	0.006	0.001	0.006	0.001	-0.001	0.000	0.000	0.000	0.000
9.O	0.004	-0.002	-0.008	0.000	0.000	0.000	-0.001	0.001	0.002
10.O	0.000	0.000	0.000	0.002	-0.001	0.000	0.001	0.000	0.001
11.N	-0.001	-0.002	0.000	0.111	-0.076	0.054	0.068	0.083	-0.019
12.C	-0.001	0.004	-0.002	-0.055	0.148	-0.077	-0.109	-0.229	0.078
13.C	0.002	0.000	0.001	0.200	-0.058	0.068	0.226	0.184	-0.036
14.C	0.000	-0.002	0.001	-0.320	0.189	-0.150	-0.101	-0.100	0.025
15.C	-0.001	0.003	-0.002	0.122	-0.156	0.094	0.111	0.240	-0.084
16.C	0.003	0.000	0.001	-0.140	0.008	-0.033	-0.200	-0.180	0.037
17.H	-0.001	-0.017	0.008	-0.076	-0.323	0.126	-0.109	0.359	-0.184
18.H	-0.008	-0.007	0.001	-0.010	-0.199	0.088	-0.351	-0.111	-0.019
19.H	-0.002	-0.002	0.000	0.498	-0.285	0.232	-0.075	-0.145	0.045
20.H	-0.003	-0.009	0.003	0.179	0.103	-0.012	0.053	-0.324	0.153
21.H	-0.010	-0.006	-0.001	0.207	0.166	-0.031	0.427	0.072	0.056

	3059.744			3063.445			3128.547		
1.Re	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000
2.C	0.017	0.002	0.020	0.037	0.006	0.048	0.000	0.000	0.000
3.C	-0.017	0.006	0.055	0.008	-0.002	-0.030	0.000	0.000	0.000
4.H	-0.054	-0.267	-0.086	-0.115	-0.558	-0.179	0.000	-0.001	0.000
5.H	-0.152	0.239	-0.160	-0.313	0.494	-0.333	0.000	0.000	0.000

6.H	0.027	0.501	-0.365	-0.013	-0.244	0.179	0.000	-0.001	0.001
7.H	0.185	-0.565	-0.266	-0.087	0.265	0.124	0.000	-0.001	-0.001
8.O	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	-0.001	0.000	0.000	0.000
9.O	-0.001	0.000	-0.001	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000
10.O	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000
11.N	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000
12.C	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	-0.009	0.001	-0.002
13.C	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.018	-0.037	0.020
14.C	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.040	0.057	-0.018
15.C	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	-0.014	-0.002	-0.002
16.C	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.002	-0.003	0.002
17.H	0.000	0.000	0.000	0.002	0.000	0.000	0.105	0.003	0.021
18.H	0.000	-0.001	0.000	0.001	-0.002	0.001	-0.228	0.417	-0.238
19.H	0.000	0.000	0.000	-0.001	-0.001	0.000	-0.463	-0.642	0.197
20.H	0.000	0.000	0.000	-0.002	0.000	0.000	0.174	-0.004	0.037
21.H	0.001	-0.002	0.001	0.000	0.000	0.000	-0.017	0.039	-0.020

	3140.374			3143.569			3144.889		
1.Re	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000
2.C	0.000	-0.002	0.000	-0.008	0.063	-0.005	0.001	-0.005	0.000
3.C	0.000	0.003	0.000	0.010	-0.074	0.009	-0.001	0.007	-0.001
4.H	0.003	0.015	0.005	-0.100	-0.448	-0.153	0.008	0.037	0.013
5.H	-0.006	0.010	-0.007	0.198	-0.300	0.211	-0.018	0.026	-0.019
6.H	-0.001	-0.015	0.012	0.029	0.434	-0.333	-0.003	-0.041	0.031
7.H	0.005	-0.016	-0.008	-0.151	0.448	0.223	0.015	-0.044	-0.022
8.O	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000
9.O	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000
10.O	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000
11.N	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	-0.001	0.001	-0.001
12.C	0.025	0.000	0.005	0.001	0.000	0.000	-0.003	0.001	-0.001
13.C	-0.031	0.052	-0.030	0.000	0.001	0.000	0.007	-0.012	0.007
14.C	0.027	0.032	-0.009	0.000	-0.001	0.000	-0.013	-0.018	0.006
15.C	-0.022	0.000	-0.004	-0.004	0.000	-0.001	-0.034	0.005	-0.009
16.C	0.005	-0.013	0.007	0.003	-0.006	0.003	0.027	-0.063	0.033
17.H	-0.299	-0.012	-0.058	-0.011	-0.001	-0.002	0.034	0.001	0.007
18.H	0.331	-0.595	0.340	0.004	-0.008	0.004	-0.074	0.133	-0.076
19.H	-0.268	-0.366	0.111	0.003	0.005	-0.001	0.143	0.198	-0.061
20.H	0.257	-0.009	0.055	0.043	-0.002	0.009	0.396	-0.019	0.088
21.H	-0.063	0.145	-0.076	-0.031	0.072	-0.038	-0.304	0.706	-0.368

	3159.690			3164.136			3164.227		
1.Re	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000
2.C	0.000	0.001	0.000	0.000	-0.002	0.000	-0.010	0.075	-0.006
3.C	0.000	0.000	0.000	0.000	-0.001	0.000	-0.009	0.063	-0.008
4.H	-0.002	-0.007	-0.002	0.002	0.010	0.004	-0.118	-0.525	-0.182
5.H	0.003	-0.005	0.004	-0.006	0.010	-0.007	0.241	-0.363	0.258
6.H	0.000	-0.002	0.002	0.000	0.007	-0.006	-0.024	-0.365	0.282
7.H	0.000	-0.001	0.000	-0.003	0.010	0.005	0.127	-0.381	-0.191
8.O	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	-0.001	0.000
9.O	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	-0.001	0.000
10.O	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000
11.N	0.002	-0.001	0.001	0.000	0.001	0.000	0.000	0.000	0.000
12.C	-0.058	-0.004	-0.010	0.060	0.004	0.011	0.002	0.000	0.000
13.C	-0.004	0.014	-0.007	0.009	-0.021	0.011	0.000	0.000	0.000
14.C	-0.003	-0.009	0.003	-0.010	-0.014	0.005	0.000	0.000	0.000
15.C	-0.057	0.001	-0.012	-0.049	0.001	-0.010	0.000	0.000	0.000
16.C	-0.008	0.026	-0.013	-0.010	0.027	-0.014	0.000	0.001	0.000
17.H	0.644	0.031	0.123	-0.663	-0.032	-0.126	-0.022	-0.001	-0.004
18.H	0.072	-0.136	0.077	-0.113	0.209	-0.119	-0.003	0.006	-0.003
19.H	0.051	0.075	-0.024	0.104	0.146	-0.045	0.002	0.003	-0.001
20.H	0.630	-0.023	0.136	0.544	-0.020	0.118	0.004	0.000	0.001
21.H	0.114	-0.271	0.141	0.121	-0.286	0.149	0.003	-0.008	0.004

List of All Frequencies:

Intensities
==========

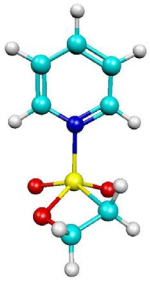
Frequency cm-1	Dipole Strength 1e-40 esu2 cm2	Absorption Intensity (degeneracy not counted) km/mole
-418.796145	1472.588748	-154.583175
-54.953835	81.758312	-1.126180
47.316224	68.295761	0.809994
52.537056	401.036422	5.281139
81.915316	254.479778	5.225122
111.058489	6.522560	0.181572
166.028236	142.372832	5.924984
204.120019	2.761986	0.141314
220.722863	29.839553	1.650888
303.828433	131.005553	9.976913
329.908437	166.665770	13.782180
334.372289	193.935059	16.254165
363.970472	0.162156	0.014794

394.548965	93.937730	9.290071
409.341828	33.862736	3.474451
522.245053	15.494961	2.028350
638.647568	6.883823	1.101968
659.876095	2.144546	0.354712
673.440773	330.866484	55.850910
735.014684	275.059976	50.675902
749.391030	34.980602	6.570733
762.986579	77.645755	14.849529
789.724512	352.695093	69.815701
843.157811	4.077274	0.861701
917.510062	6.163162	1.417400
938.705595	33.712866	7.932373
945.273755	1.430234	0.338878
959.355167	35.627357	8.567243
972.884786	0.614541	0.149862
991.311370	384.107650	95.442348
1006.953178	103.112417	26.025454
1047.508078	3.365461	0.883649
1060.651074	87.849113	23.355436
1076.364569	14.431492	3.893576
1096.404722	67.006063	18.414633
1104.833057	25.282582	7.001582
1170.274785	12.290705	3.605311
1182.974177	230.040808	68.211597
1184.650449	17.267176	5.127311
1213.388188	16.677597	5.072374
1297.547233	2.497789	0.812376
1351.799266	9.170506	3.107303
1423.695484	49.728143	17.745875
1447.909856	160.649780	58.304185
1471.936845	13.470431	4.969913
1476.227877	5.299518	1.960956
1556.666963	4.609936	1.798741
1601.426448	85.422256	34.289101
3059.744423	2.425187	1.859981
3063.444922	7.129857	5.474809
3128.546760	3.788092	2.970580
3140.374497	18.659355	14.687779
3143.568830	0.655038	0.516140
3144.888579	25.143025	19.819873
3159.690169	41.525423	32.887937
3164.135761	6.309414	5.004056
3164.226648	3.934160	3.120309

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

1186.5406	4206.3178	4822.7591
-0.7095	0.7040	0.0310
-0.6757	-0.6921	0.2538
0.2002	0.1591	0.9667

TS(IIa-IIb)



CCSD=-629.64433143

ATOMS cartesian

Re	0.143318	0.036356	-0.033124
N	2.208622	-0.052949	-0.068899
C	2.914047	0.940077	-0.677081
C	2.853767	-1.085625	0.540437
C	4.294958	0.932616	-0.662758
C	4.966591	-0.109978	-0.027227
C	4.233710	-1.131338	0.574619
H	2.338054	1.719339	-1.172996
H	4.834724	1.737171	-1.162631
H	6.057459	-0.134534	-0.014747
H	4.725370	-1.972538	1.063174
H	2.233525	-1.862886	0.982763
O	-0.580416	1.748903	0.586923
C	-0.274065	0.140490	2.112704
C	-0.794527	1.539974	2.002590
O	-0.491387	-1.550536	-0.084531
O	-0.304352	0.746208	-1.544552
H	-0.228781	2.314440	2.544709
H	-1.865442	1.658919	2.217812
H	0.707442	0.048975	2.620108
H	-0.967187	-0.615987	2.501135

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)

	-189.597			18.944			44.827		
1.Re	0.000	-0.013	-0.007	-0.019	-0.020	-0.036	-0.002	-0.016	0.014
2.N	0.006	-0.014	0.029	-0.036	-0.019	-0.035	0.003	-0.043	0.114
3.C	-0.002	-0.015	0.013	-0.040	0.050	0.073	-0.072	0.065	0.195
4.C	0.013	-0.006	0.032	-0.044	-0.018	-0.024	0.083	-0.117	-0.091
5.C	-0.003	-0.003	0.011	-0.040	0.097	0.158	-0.075	0.114	0.108
6.C	0.004	-0.001	0.005	-0.048	0.076	0.135	0.010	0.043	-0.096
7.C	0.014	-0.006	0.010	-0.041	0.026	0.066	0.096	-0.088	-0.209
8.H	-0.011	-0.031	-0.002	-0.038	0.059	0.084	-0.130	0.117	0.344
9.H	-0.009	0.000	0.008	-0.034	0.149	0.245	-0.138	0.215	0.201
10.H	0.005	0.004	-0.002	-0.048	0.099	0.172	0.012	0.117	-0.169
11.H	0.024	-0.002	0.007	-0.043	0.027	0.075	0.169	-0.147	-0.394
12.H	0.021	0.007	0.065	-0.050	-0.055	-0.097	0.136	-0.196	-0.156
13.O	-0.346	-0.155	-0.076	0.127	0.022	0.016	0.037	0.041	-0.090
14.C	0.354	0.111	0.083	0.195	0.019	0.009	-0.096	0.089	-0.012
15.C	0.026	-0.008	0.014	0.321	0.071	0.053	-0.007	0.117	-0.085
16.O	-0.204	0.087	-0.013	-0.035	-0.017	0.052	-0.077	0.015	0.028
17.O	0.193	0.166	0.004	-0.128	-0.031	-0.009	0.118	-0.034	-0.032
18.H	0.006	0.188	-0.249	0.499	0.018	-0.055	0.034	0.105	-0.109
19.H	0.054	-0.190	0.248	0.370	0.203	0.220	-0.003	0.198	-0.110
20.H	0.255	0.288	0.277	0.211	-0.097	-0.047	-0.134	0.029	0.050
21.H	0.397	0.016	-0.012	0.135	0.097	0.055	-0.172	0.150	-0.030

	93.378			154.731			191.859		
1.Re	-0.008	-0.033	0.011	-0.005	-0.008	-0.001	0.000	-0.002	0.022
2.N	-0.002	-0.062	-0.030	-0.018	0.128	0.118	0.030	0.001	-0.167
3.C	-0.059	-0.081	-0.132	-0.002	0.079	0.058	0.093	0.003	-0.103
4.C	0.061	0.050	0.084	-0.053	0.102	0.112	-0.002	-0.026	-0.183
5.C	-0.057	0.018	-0.115	-0.003	-0.030	-0.056	0.099	0.015	0.036
6.C	0.009	0.134	0.007	-0.035	-0.082	-0.108	0.055	0.029	0.112
7.C	0.064	0.145	0.100	-0.058	-0.003	-0.004	-0.006	-0.006	-0.030
8.H	-0.109	-0.178	-0.226	0.012	0.106	0.086	0.137	0.015	-0.134
9.H	-0.116	-0.003	-0.214	0.026	-0.086	-0.112	0.136	0.034	0.106
10.H	0.009	0.202	0.031	-0.036	-0.187	-0.229	0.053	0.066	0.274
11.H	0.111	0.237	0.214	-0.076	-0.027	-0.028	-0.060	-0.026	-0.009
12.H	0.111	0.061	0.176	-0.077	0.160	0.177	-0.027	-0.063	-0.281
13.O	0.179	0.042	0.037	-0.079	-0.035	-0.022	-0.141	-0.043	-0.041

14.C	-0.133	-0.061	-0.014	-0.062	-0.039	-0.016	-0.129	0.001	0.005
15.C	0.094	0.028	0.021	0.151	0.051	0.028	0.048	0.075	0.011
16.O	-0.254	0.073	-0.126	0.117	-0.057	-0.058	-0.002	0.000	0.027
17.O	0.201	0.134	0.024	0.081	0.018	-0.016	0.003	-0.012	0.017
18.H	0.202	-0.084	0.068	0.432	-0.050	-0.121	0.287	-0.003	-0.129
19.H	0.106	0.196	-0.011	0.223	0.282	0.245	0.107	0.273	0.188
20.H	-0.197	-0.252	0.074	-0.169	-0.298	0.134	-0.272	-0.251	0.228
21.H	-0.297	0.034	-0.120	-0.278	0.074	-0.175	-0.366	0.099	-0.220

	202.969			207.834			261.114		
1.Re	-0.011	0.042	-0.021	0.033	0.012	0.023	-0.073	-0.031	0.022
2.N	0.032	-0.210	0.107	-0.142	-0.150	-0.106	0.055	0.019	-0.007
3.C	-0.062	-0.199	0.028	-0.233	-0.096	-0.108	0.117	-0.014	-0.005
4.C	0.172	-0.139	0.110	-0.155	-0.141	-0.090	0.096	0.016	-0.037
5.C	-0.067	-0.045	-0.027	-0.244	0.028	-0.007	0.130	-0.029	0.007
6.C	0.077	0.069	-0.002	-0.228	0.085	0.080	0.147	-0.001	0.031
7.C	0.194	0.002	0.041	-0.159	-0.016	0.011	0.106	0.007	-0.011
8.H	-0.133	-0.274	-0.010	-0.298	-0.171	-0.149	0.157	0.010	-0.012
9.H	-0.190	-0.014	-0.112	-0.266	0.069	0.035	0.121	-0.026	0.002
10.H	0.080	0.210	-0.023	-0.227	0.187	0.176	0.147	0.018	0.078
11.H	0.304	0.072	0.047	-0.109	0.031	0.047	0.072	-0.013	-0.012
12.H	0.266	-0.175	0.173	-0.158	-0.177	-0.160	0.117	-0.010	-0.051
13.O	-0.150	-0.030	0.014	-0.013	0.029	-0.008	0.045	0.094	-0.007
14.C	-0.041	-0.041	-0.023	0.040	0.062	0.018	0.074	0.167	0.013
15.C	0.065	0.007	0.055	-0.005	0.047	-0.009	0.001	0.135	-0.034
16.O	0.109	-0.004	-0.019	0.316	-0.104	-0.083	0.179	-0.127	-0.299
17.O	-0.146	0.011	0.004	0.237	0.081	-0.009	0.006	0.126	0.083
18.H	0.263	-0.059	-0.057	-0.029	0.072	-0.017	-0.082	0.190	-0.018
19.H	0.119	0.143	0.245	-0.006	0.016	0.006	-0.014	0.062	-0.056
20.H	-0.105	-0.214	0.062	0.059	0.122	-0.004	0.262	0.359	-0.295
21.H	-0.170	0.007	-0.159	0.090	0.054	0.095	0.296	0.155	0.391

	298.413			341.253			362.924		
1.Re	-0.104	0.040	-0.018	0.006	0.039	0.051	0.001	0.000	-0.001
2.N	0.030	-0.003	-0.014	0.003	-0.006	-0.014	-0.002	-0.001	0.022
3.C	0.087	-0.036	-0.024	-0.016	-0.004	-0.020	-0.005	0.091	0.167
4.C	0.084	-0.002	-0.052	-0.011	-0.003	-0.005	-0.002	-0.107	-0.157
5.C	0.102	-0.023	-0.003	-0.016	0.013	0.007	0.000	-0.100	-0.179
6.C	0.133	0.023	0.039	-0.025	0.007	0.010	0.002	0.012	0.002
7.C	0.096	0.013	-0.026	-0.012	-0.012	-0.001	-0.003	0.101	0.156
8.H	0.122	-0.031	-0.055	-0.026	-0.021	-0.039	-0.014	0.263	0.450
9.H	0.073	-0.016	-0.025	-0.010	0.018	0.021	-0.010	-0.207	-0.359
10.H	0.132	0.054	0.110	-0.025	0.008	0.010	0.002	-0.003	0.024
11.H	0.065	0.002	-0.012	-0.010	-0.011	0.002	0.002	0.202	0.329
12.H	0.114	-0.029	-0.060	-0.019	-0.001	-0.010	0.006	-0.269	-0.429
13.O	0.065	0.020	0.107	-0.075	-0.015	-0.016	-0.003	-0.002	0.001
14.C	0.058	-0.152	0.008	0.049	-0.061	-0.045	0.004	0.004	0.010
15.C	0.063	-0.155	0.116	0.079	-0.040	0.040	-0.001	0.002	0.003
16.O	0.134	-0.072	0.339	-0.116	0.109	-0.379	-0.009	0.004	-0.006
17.O	0.460	-0.119	-0.276	0.040	-0.458	-0.182	0.004	-0.008	-0.004
18.H	0.018	-0.160	0.172	0.191	-0.083	-0.019	-0.004	0.006	0.000
19.H	0.055	-0.199	0.104	0.115	-0.019	0.180	-0.001	-0.001	0.004
20.H	0.197	-0.112	-0.233	0.290	0.009	-0.464	0.000	-0.001	0.017
21.H	0.192	-0.167	0.210	0.248	-0.055	0.312	-0.001	0.007	0.009

	402.568			417.036			506.057		
1.Re	0.006	-0.005	-0.021	0.003	-0.003	-0.034	-0.024	0.027	0.024
2.N	-0.003	0.152	0.241	-0.003	-0.074	-0.107	-0.007	-0.007	-0.009
3.C	-0.002	-0.037	-0.078	0.011	0.005	0.036	0.002	-0.008	0.003
4.C	-0.021	-0.029	-0.039	0.004	0.015	0.029	0.005	0.000	-0.006
5.C	-0.001	-0.069	-0.132	0.009	0.037	0.066	0.003	-0.004	0.003
6.C	-0.012	0.120	0.202	0.014	-0.057	-0.106	0.016	0.001	0.000
7.C	-0.019	-0.087	-0.144	0.001	0.053	0.049	0.011	0.004	-0.002
8.H	-0.009	-0.092	-0.158	0.020	0.036	0.075	0.011	-0.004	-0.002
9.H	-0.001	-0.157	-0.275	0.003	0.089	0.147	-0.008	0.001	-0.001
10.H	-0.013	0.312	0.544	0.014	-0.147	-0.238	0.016	0.007	-0.001
11.H	-0.022	-0.168	-0.281	0.008	0.090	0.104	0.004	0.006	0.008
12.H	-0.038	-0.028	-0.061	0.019	0.034	0.083	0.011	0.005	0.008
13.O	0.035	-0.022	0.064	0.024	-0.046	0.135	0.140	-0.155	-0.161
14.C	0.001	0.037	0.153	-0.049	0.103	0.338	0.109	-0.087	0.130
15.C	-0.015	0.027	0.060	-0.073	0.090	0.141	0.058	-0.106	-0.184
16.O	-0.013	0.008	-0.027	0.017	0.003	-0.060	0.046	0.005	-0.053
17.O	-0.020	-0.039	-0.027	0.019	-0.081	-0.067	-0.026	0.005	-0.004
18.H	-0.055	0.075	0.038	-0.125	0.174	0.079	-0.107	0.038	-0.228
19.H	-0.027	0.042	0.008	-0.092	0.121	0.038	0.015	-0.170	-0.372
20.H	-0.075	0.060	0.287	-0.209	0.121	0.624	-0.198	-0.154	0.671
21.H	-0.067	0.068	0.097	-0.190	0.145	0.181	-0.187	-0.009	-0.235

	559.484			623.908			652.582		
1.Re	-0.004	-0.008	0.005	0.001	0.000	-0.002	-0.010	0.000	0.000
2.N	-0.008	0.000	-0.002	-0.002	0.123	-0.063	0.168	0.045	0.095
3.C	0.000	-0.003	0.004	-0.193	0.163	-0.097	0.057	0.045	-0.120
4.C	0.001	0.005	-0.001	0.206	0.177	-0.110	0.030	-0.147	-0.008
5.C	0.001	-0.008	0.001	-0.239	-0.194	0.123	0.041	0.180	0.013

6.C	0.011	0.000	0.001	-0.003	-0.114	0.081	-0.180	-0.008	-0.039
7.C	0.003	0.003	-0.006	0.220	-0.168	0.148	0.011	-0.054	0.158
8.H	0.009	0.008	0.011	-0.091	0.141	-0.261	-0.079	-0.225	-0.391
9.H	-0.007	-0.002	0.001	-0.097	-0.354	0.021	0.201	-0.032	-0.162
10.H	0.011	0.009	0.012	0.008	0.177	-0.290	-0.181	-0.259	-0.414
11.H	-0.004	0.003	0.000	0.068	-0.325	0.029	0.187	-0.103	-0.094
12.H	0.008	0.011	0.017	0.125	0.131	-0.315	-0.094	-0.256	-0.366
13.O	-0.008	0.135	0.045	0.002	-0.012	0.013	0.007	-0.001	0.008
14.C	0.129	0.047	-0.106	-0.003	0.008	0.020	0.008	0.008	0.002
15.C	-0.026	0.008	0.043	-0.006	0.006	0.013	-0.005	0.004	0.005
16.O	0.010	-0.006	-0.027	0.002	0.003	0.000	0.001	-0.006	-0.001
17.O	0.003	-0.050	-0.022	0.000	0.003	-0.010	0.000	0.002	-0.005
18.H	-0.187	0.042	0.157	-0.012	0.021	-0.005	-0.030	0.021	0.006
19.H	-0.060	-0.194	0.006	-0.010	0.003	-0.009	-0.012	-0.020	-0.018
20.H	-0.213	-0.163	0.488	0.000	-0.018	0.003	-0.017	-0.026	0.039
21.H	-0.153	-0.015	-0.711	-0.011	-0.006	-0.025	-0.023	0.003	-0.062

	683.299			724.581			728.888		
1.Re	0.008	-0.001	0.000	0.004	-0.008	-0.007	-0.002	0.004	0.003
2.N	-0.140	0.066	0.120	0.013	0.052	0.075	0.003	0.065	0.099
3.C	-0.023	-0.136	-0.021	-0.007	-0.028	-0.090	-0.008	-0.048	-0.097
4.C	-0.056	0.014	-0.115	0.020	-0.043	-0.076	0.011	-0.047	-0.099
5.C	-0.002	-0.010	0.147	-0.014	0.002	0.021	-0.014	-0.002	0.025
6.C	0.161	-0.015	-0.047	-0.015	-0.060	-0.078	-0.004	-0.070	-0.098
7.C	-0.031	0.161	0.036	0.013	0.000	0.029	0.007	0.012	0.027
8.H	0.073	-0.303	-0.390	-0.007	0.110	0.125	-0.004	0.112	0.149
9.H	-0.170	-0.076	-0.143	0.016	0.220	0.409	0.003	0.281	0.505
10.H	0.161	-0.266	-0.410	-0.015	0.157	0.237	-0.003	0.196	0.299
11.H	-0.169	-0.028	-0.151	0.024	0.220	0.393	0.009	0.282	0.484
12.H	0.050	-0.236	-0.408	0.009	0.097	0.153	0.006	0.112	0.172
13.O	-0.002	0.008	-0.004	-0.095	0.275	-0.092	0.048	-0.134	0.047
14.C	0.002	-0.005	0.000	-0.009	-0.107	0.178	0.006	0.048	-0.093
15.C	0.003	-0.006	-0.007	0.058	-0.110	-0.072	-0.027	0.049	0.033
16.O	-0.007	0.004	0.000	-0.001	0.017	0.004	0.000	-0.005	-0.001
17.O	-0.004	-0.002	0.001	0.002	-0.007	0.048	-0.004	0.004	-0.022
18.H	0.011	-0.014	0.000	0.024	-0.152	0.028	-0.008	0.070	-0.017
19.H	0.007	0.003	0.008	0.068	-0.168	0.002	-0.030	0.089	0.001
20.H	0.006	0.005	-0.007	0.015	-0.107	0.136	-0.009	0.063	-0.061
21.H	0.008	0.002	0.024	-0.076	0.053	0.382	0.038	-0.022	-0.177

	828.025			847.173			914.335		
1.Re	-0.002	0.000	0.001	0.000	-0.001	0.001	-0.007	0.015	-0.024
2.N	0.000	0.000	-0.001	-0.001	-0.003	-0.002	0.006	0.001	-0.001
3.C	0.001	0.007	0.002	0.000	0.055	0.077	0.001	-0.018	-0.027
4.C	0.001	-0.006	-0.006	-0.001	-0.044	-0.083	0.001	-0.017	-0.032
5.C	0.001	0.003	0.001	0.000	0.030	0.048	-0.010	0.004	0.019
6.C	0.000	0.000	0.003	0.001	-0.002	0.003	-0.005	0.013	0.020
7.C	0.004	-0.004	0.001	0.001	-0.031	-0.049	0.003	0.009	0.016
8.H	0.001	-0.009	-0.024	-0.004	-0.265	-0.423	0.024	0.121	0.168
9.H	0.006	-0.016	-0.024	0.010	-0.248	-0.388	-0.009	-0.067	-0.094
10.H	0.000	-0.006	-0.013	0.001	-0.007	-0.014	-0.005	-0.059	-0.138
11.H	0.006	0.003	0.012	-0.003	0.234	0.410	0.008	-0.058	-0.105
12.H	-0.002	0.018	0.032	0.001	0.267	0.464	-0.015	0.127	0.196
13.O	0.020	0.027	-0.001	-0.002	0.000	0.001	-0.047	-0.038	0.274
14.C	0.008	-0.019	-0.007	-0.003	0.002	-0.001	0.025	0.018	-0.111
15.C	-0.068	-0.036	-0.023	0.004	0.004	0.000	0.056	-0.033	-0.294
16.O	0.003	0.003	-0.001	0.003	0.003	0.000	-0.015	-0.015	0.008
17.O	-0.001	-0.003	-0.003	-0.003	0.002	-0.005	0.097	-0.145	0.278
18.H	0.387	-0.324	-0.079	-0.025	0.021	0.006	0.020	-0.050	-0.190
19.H	0.026	0.447	0.153	-0.001	-0.034	-0.008	0.082	-0.011	-0.098
20.H	-0.089	0.504	0.277	0.005	-0.026	-0.019	-0.165	0.156	0.292
21.H	0.257	-0.295	-0.102	-0.014	0.021	0.016	-0.182	0.443	0.366

	923.273			925.171			951.644		
1.Re	-0.007	0.036	-0.036	0.001	-0.002	0.003	0.001	0.000	0.001
2.N	0.006	0.007	0.005	-0.002	0.006	0.012	-0.002	0.005	-0.001
3.C	0.000	-0.021	-0.011	-0.002	-0.044	-0.081	0.004	-0.049	-0.076
4.C	-0.002	0.003	-0.004	0.000	-0.047	-0.079	-0.001	0.040	0.072
5.C	-0.011	0.008	0.023	-0.001	0.019	0.029	-0.001	0.051	0.091
6.C	0.000	0.007	0.004	0.005	0.035	0.060	-0.002	0.004	0.000
7.C	0.004	-0.011	-0.015	0.001	0.019	0.038	0.002	-0.056	-0.088
8.H	0.026	0.041	0.061	-0.003	0.318	0.490	0.016	0.253	0.386
9.H	-0.029	-0.062	-0.107	-0.002	-0.110	-0.183	0.003	-0.282	-0.442
10.H	0.001	-0.001	-0.047	0.005	-0.210	-0.347	-0.001	0.014	-0.036
11.H	0.001	0.049	0.093	-0.008	-0.144	-0.230	0.010	0.278	0.475
12.H	-0.023	0.027	0.011	0.001	0.289	0.510	-0.005	-0.203	-0.357
13.O	0.064	-0.033	-0.277	0.004	0.000	-0.027	-0.003	0.002	0.012
14.C	-0.008	0.021	0.053	-0.004	-0.003	0.003	0.002	0.001	0.006
15.C	-0.052	0.008	0.327	-0.002	0.004	0.031	-0.002	0.001	-0.016
16.O	-0.073	-0.193	-0.004	0.006	0.012	0.000	-0.003	-0.007	0.000
17.O	0.134	-0.190	0.442	-0.011	0.016	-0.032	-0.004	0.006	-0.015
18.H	-0.021	0.062	0.170	-0.013	0.014	0.025	0.009	-0.006	-0.015
19.H	-0.092	0.041	0.029	-0.007	-0.013	0.009	0.002	0.012	-0.003
20.H	0.103	-0.081	-0.192	0.009	-0.007	-0.023	0.006	-0.010	-0.007
21.H	0.172	-0.385	-0.443	0.010	-0.022	-0.009	0.003	-0.010	-0.013

	973.248			974.971			997.649		
1.Re	-0.031	-0.049	-0.016	0.002	0.004	0.001	0.001	0.002	0.002
2.N	0.026	-0.001	0.011	0.000	0.005	0.013	0.018	-0.001	0.001
3.C	0.008	-0.031	0.018	0.005	-0.002	0.010	0.002	0.002	0.000
4.C	0.019	0.051	-0.003	0.012	0.009	-0.002	0.007	0.006	0.006
5.C	-0.004	-0.031	-0.025	-0.001	-0.056	-0.067	-0.009	-0.021	0.003
6.C	-0.036	0.032	0.064	-0.015	0.065	0.116	-0.012	0.006	0.016
7.C	-0.018	-0.011	-0.065	0.001	-0.027	-0.076	-0.005	0.009	-0.025
8.H	-0.004	-0.062	-0.009	0.019	-0.042	-0.067	0.005	-0.004	-0.014
9.H	0.001	0.096	0.189	0.011	0.237	0.418	0.016	-0.006	0.061
10.H	-0.040	-0.231	-0.319	-0.016	-0.379	-0.615	-0.014	-0.057	-0.085
11.H	-0.038	0.179	0.275	0.012	0.233	0.358	0.012	0.071	0.060
12.H	0.069	-0.076	-0.167	0.035	-0.032	-0.045	0.011	-0.029	-0.052
13.O	0.047	-0.041	-0.076	-0.006	0.006	0.019	0.012	-0.018	-0.067
14.C	-0.014	0.016	-0.031	0.002	-0.004	0.022	-0.027	0.068	-0.117
15.C	-0.024	0.009	0.099	-0.004	0.009	-0.026	0.041	-0.099	0.107
16.O	0.286	0.670	0.030	-0.022	-0.050	-0.002	-0.006	-0.018	-0.001
17.O	0.053	-0.076	0.187	-0.003	0.004	-0.011	-0.010	0.012	-0.018
18.H	-0.010	0.035	0.033	0.003	0.015	-0.038	0.012	-0.172	0.225
19.H	-0.026	-0.030	0.087	-0.001	0.026	-0.019	0.025	-0.214	0.057
20.H	0.009	-0.023	-0.083	0.032	-0.048	-0.047	-0.247	0.352	0.374
21.H	0.042	-0.050	-0.063	0.010	-0.056	-0.070	-0.142	0.468	0.478

	1024.131			1047.463			1053.679		
1.Re	0.000	-0.001	-0.001	-0.001	0.000	0.000	-0.006	0.001	0.001
2.N	-0.136	-0.003	-0.004	0.125	-0.006	0.001	0.390	-0.032	0.014
3.C	-0.149	0.310	-0.185	-0.016	0.029	-0.017	-0.084	0.063	-0.041
4.C	-0.144	-0.274	0.182	-0.016	-0.026	0.019	-0.045	-0.041	0.019
5.C	0.050	0.020	-0.029	-0.050	-0.076	0.050	-0.131	-0.150	0.105
6.C	0.292	-0.015	0.025	0.014	-0.001	0.003	0.101	-0.020	0.010
7.C	0.051	-0.038	0.005	-0.042	0.081	-0.051	-0.144	0.195	-0.110
8.H	-0.195	0.313	-0.204	-0.043	0.007	-0.018	-0.323	-0.063	0.040
9.H	0.270	-0.008	0.127	-0.004	-0.118	0.049	-0.147	-0.191	0.052
10.H	0.315	-0.066	-0.070	0.010	-0.013	-0.009	0.095	-0.110	0.099
11.H	0.250	0.091	0.055	-0.004	0.108	-0.059	-0.275	0.122	-0.135
12.H	-0.165	-0.315	0.154	-0.041	-0.027	-0.022	-0.131	0.017	-0.007
13.O	-0.001	-0.009	-0.004	-0.009	0.016	-0.017	0.007	-0.002	0.018
14.C	-0.008	0.008	-0.008	0.081	-0.281	-0.096	-0.035	0.152	0.074
15.C	0.007	-0.006	0.011	-0.054	0.214	0.056	0.019	-0.108	-0.053
16.O	0.011	0.032	0.000	-0.004	-0.007	0.005	0.001	-0.008	-0.002
17.O	0.004	-0.009	0.019	-0.003	0.002	0.003	-0.001	0.003	-0.009
18.H	-0.016	-0.002	0.028	-0.192	0.419	-0.078	0.123	-0.225	-0.001
19.H	0.000	-0.044	-0.012	-0.104	0.255	-0.160	0.058	-0.093	0.118
20.H	-0.010	0.032	-0.002	-0.120	-0.017	0.395	0.111	-0.069	-0.276
21.H	-0.019	0.026	0.003	0.126	-0.046	0.517	-0.044	-0.047	-0.369

	1073.305			1074.787			1106.672		
1.Re	-0.001	-0.002	0.001	-0.001	0.000	0.000	0.000	-0.001	0.000
2.N	0.028	0.087	-0.056	0.081	0.005	-0.006	0.005	0.000	0.002
3.C	0.093	-0.050	0.037	-0.038	-0.039	0.026	0.002	-0.001	0.001
4.C	-0.109	-0.077	0.038	-0.045	0.039	-0.017	0.002	0.002	-0.001
5.C	-0.058	-0.087	0.043	-0.018	0.112	-0.077	-0.002	-0.003	0.003
6.C	0.003	0.094	-0.052	0.148	0.003	0.006	-0.003	-0.001	0.000
7.C	0.038	-0.039	0.027	-0.016	-0.134	0.066	-0.002	0.005	-0.003
8.H	0.396	0.089	-0.077	-0.236	-0.141	0.102	0.002	-0.001	0.001
9.H	-0.281	0.032	0.013	-0.442	0.371	-0.145	-0.001	-0.006	0.002
10.H	0.014	0.513	-0.318	0.169	0.019	-0.071	-0.004	0.001	0.005
11.H	0.345	0.090	-0.050	-0.403	-0.266	0.251	-0.005	0.004	-0.003
12.H	-0.411	0.111	-0.031	-0.295	0.188	-0.109	0.005	-0.006	-0.011
13.O	0.001	0.001	0.000	-0.003	0.002	-0.002	-0.053	-0.012	0.016
14.C	-0.006	0.012	0.006	0.002	-0.020	-0.014	-0.098	-0.019	0.010
15.C	0.002	-0.011	0.000	-0.001	0.013	0.012	0.171	0.043	-0.010
16.O	0.002	0.009	0.000	0.000	-0.001	0.001	0.003	0.005	-0.001
17.O	0.001	0.003	-0.005	-0.002	0.001	-0.001	0.001	-0.003	0.000
18.H	0.007	-0.013	-0.003	-0.014	0.028	0.002	-0.245	0.080	0.369
19.H	0.005	-0.013	0.008	-0.010	0.002	-0.031	0.063	-0.194	-0.427
20.H	0.009	0.004	-0.027	-0.034	0.032	0.074	-0.081	0.520	0.074
21.H	-0.007	-0.001	-0.026	0.001	0.027	0.082	0.204	-0.400	-0.211

	1150.261			1173.027			1213.764		
1.Re	-0.001	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000
2.N	0.000	0.002	0.000	-0.001	-0.027	0.017	-0.005	0.003	-0.002
3.C	0.000	0.000	0.000	0.002	0.002	-0.001	0.063	0.050	-0.028
4.C	0.000	-0.001	0.000	0.000	0.000	0.000	0.058	-0.053	0.032
5.C	-0.001	0.000	0.000	0.031	-0.014	0.005	-0.049	-0.003	0.003
6.C	0.000	0.000	0.000	0.002	0.050	-0.029	-0.014	0.000	-0.002
7.C	0.000	0.000	0.000	-0.033	-0.010	0.008	-0.046	0.003	-0.002
8.H	0.004	0.001	-0.002	-0.092	-0.048	0.028	0.440	0.248	-0.162
9.H	-0.011	0.005	-0.002	0.440	-0.206	0.140	-0.430	0.177	-0.114
10.H	0.000	-0.007	0.004	0.017	0.560	-0.337	-0.016	-0.005	0.012
11.H	0.009	0.002	-0.002	-0.475	-0.207	0.116	-0.406	-0.154	0.088
12.H	-0.003	0.004	0.006	0.106	-0.063	0.037	0.417	-0.275	0.158
13.O	-0.028	-0.022	-0.008	-0.001	0.000	0.000	0.001	-0.001	-0.001
14.C	0.060	0.012	0.012	0.001	0.000	0.000	0.000	0.000	-0.001

15.C	-0.022	0.034	-0.015	0.000	-0.001	0.001	-0.001	0.002	-0.001
16.O	0.002	0.005	0.001	0.000	-0.001	0.000	0.000	0.000	0.000
17.O	0.002	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000
18.H	0.068	-0.464	0.604	0.000	-0.004	0.006	0.001	-0.003	0.004
19.H	-0.069	0.341	-0.439	-0.002	0.013	-0.014	0.000	-0.009	0.013
20.H	0.070	-0.253	-0.048	0.002	-0.002	-0.001	-0.001	-0.001	0.000
21.H	-0.046	0.132	0.060	-0.005	0.006	0.000	0.001	0.000	0.002

	1287.088			1292.829			1351.358		
1.Re	-0.001	0.002	-0.001	0.000	0.001	0.000	0.000	0.000	0.000
2.N	0.001	0.040	-0.021	-0.009	-0.316	0.191	-0.002	-0.038	0.023
3.C	-0.029	-0.021	0.013	0.221	0.155	-0.097	-0.053	-0.022	0.014
4.C	0.028	-0.022	0.013	-0.206	0.172	-0.095	0.051	-0.025	0.015
5.C	0.016	-0.007	0.003	-0.137	0.059	-0.041	-0.033	0.015	-0.009
6.C	0.002	0.020	-0.012	-0.007	-0.140	0.083	0.003	0.066	-0.040
7.C	-0.014	-0.009	0.005	0.141	0.060	-0.030	0.034	0.013	-0.009
8.H	-0.029	-0.020	0.013	0.265	0.181	-0.099	0.476	0.259	-0.167
9.H	0.028	-0.009	0.013	-0.081	0.035	-0.024	0.275	-0.134	0.087
10.H	0.000	-0.036	0.018	0.006	0.317	-0.190	-0.007	-0.317	0.187
11.H	-0.018	-0.012	0.008	0.067	0.024	-0.027	-0.289	-0.129	0.077
12.H	0.004	-0.005	0.005	-0.259	0.184	-0.140	-0.457	0.283	-0.164
13.O	0.024	-0.028	-0.022	0.012	-0.014	-0.011	-0.001	0.001	0.001
14.C	-0.008	-0.028	0.017	0.000	-0.018	0.011	-0.002	0.005	-0.001
15.C	-0.029	0.127	-0.084	-0.015	0.061	-0.041	0.001	-0.004	0.002
16.O	-0.002	-0.005	0.002	0.001	-0.002	0.000	0.000	0.002	0.000
17.O	0.003	-0.002	0.006	-0.001	0.000	0.002	-0.001	0.001	-0.002
18.H	0.053	-0.296	0.429	0.020	-0.149	0.221	0.001	0.009	-0.016
19.H	0.042	-0.507	0.637	0.022	-0.242	0.321	-0.002	0.011	-0.023
20.H	-0.026	-0.024	0.072	0.005	-0.001	0.005	-0.006	-0.021	0.004
21.H	0.071	-0.099	0.038	0.006	-0.033	-0.002	0.018	-0.010	0.006

	1376.067			1444.441			1451.988		
1.Re	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000
2.N	0.001	0.002	-0.002	0.001	0.013	-0.007	-0.005	-0.096	0.059
3.C	-0.002	-0.002	0.002	0.017	-0.007	0.003	-0.125	0.042	-0.025
4.C	0.006	-0.003	0.002	-0.021	-0.005	0.002	0.134	0.035	-0.021
5.C	-0.001	0.000	0.001	-0.024	0.002	-0.001	0.182	-0.037	0.023
6.C	-0.001	0.002	-0.001	-0.001	0.005	-0.003	-0.006	-0.024	0.014
7.C	0.000	0.001	-0.001	0.028	0.005	-0.003	-0.182	-0.018	0.013
8.H	0.006	0.002	-0.001	-0.031	-0.034	0.025	0.219	0.249	-0.160
9.H	0.004	-0.004	0.000	0.043	-0.032	0.020	-0.304	0.208	-0.140
10.H	-0.001	-0.019	0.009	-0.003	-0.057	0.041	0.004	0.392	-0.231
11.H	-0.017	-0.003	0.006	-0.044	-0.031	0.015	0.294	0.203	-0.125
12.H	-0.019	0.010	-0.009	0.036	-0.042	0.026	-0.217	0.274	-0.160
13.O	0.002	-0.002	-0.007	-0.004	0.006	0.016	-0.001	0.001	0.004
14.C	0.043	-0.092	0.032	0.006	-0.019	0.008	0.003	-0.007	0.003
15.C	-0.010	0.011	0.000	-0.031	0.065	0.040	-0.009	0.020	0.012
16.O	0.002	0.000	0.000	0.001	0.000	0.000	0.001	-0.001	0.000
17.O	0.001	0.000	0.001	0.001	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000
18.H	-0.101	0.018	0.098	0.584	-0.196	-0.278	0.180	-0.060	-0.085
19.H	0.018	0.102	0.122	-0.169	-0.523	-0.431	-0.051	-0.158	-0.130
20.H	0.232	0.543	-0.264	0.039	0.102	-0.040	0.014	0.034	-0.014
21.H	-0.575	0.335	-0.282	-0.097	0.051	-0.044	-0.030	0.014	-0.018

	1469.642			1557.525			1600.990		
1.Re	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000
2.N	-0.077	0.005	-0.003	0.007	0.122	-0.074	-0.109	0.005	-0.004
3.C	0.084	0.070	-0.042	-0.085	-0.113	0.072	0.267	0.038	-0.021
4.C	0.075	-0.076	0.045	0.070	-0.115	0.067	0.265	-0.057	0.033
5.C	0.077	-0.083	0.052	-0.052	0.176	-0.107	-0.279	0.066	-0.040
6.C	-0.088	0.002	-0.003	-0.018	-0.344	0.206	0.136	-0.008	0.008
7.C	0.090	0.081	-0.048	0.073	0.183	-0.105	-0.279	-0.044	0.027
8.H	-0.473	-0.221	0.142	0.291	0.076	-0.057	-0.266	-0.275	0.167
9.H	-0.382	0.128	-0.085	0.168	0.081	-0.070	0.274	-0.220	0.133
10.H	-0.107	-0.010	0.004	0.006	0.558	-0.332	0.159	0.003	-0.012
11.H	-0.399	-0.125	0.073	-0.177	0.090	-0.067	0.271	0.209	-0.132
12.H	-0.447	0.234	-0.134	-0.261	0.079	-0.045	-0.263	0.286	-0.170
13.O	0.000	0.000	0.000	0.000	0.001	0.000	0.001	0.000	0.000
14.C	0.000	0.002	-0.001	0.000	0.002	0.000	0.001	0.001	-0.001
15.C	0.000	-0.002	0.000	0.000	0.000	0.001	0.000	0.000	0.001
16.O	0.000	0.002	0.000	-0.001	0.002	-0.001	0.000	0.001	-0.001
17.O	0.000	-0.001	0.001	0.001	0.001	-0.001	0.000	-0.001	0.001
18.H	-0.003	0.004	-0.004	0.013	-0.003	-0.009	0.023	-0.003	-0.017
19.H	0.000	0.005	-0.003	-0.004	-0.006	-0.014	-0.006	-0.013	-0.019
20.H	-0.003	-0.012	-0.001	0.003	-0.009	-0.010	0.002	-0.006	-0.010
21.H	0.010	-0.005	0.003	0.005	-0.006	-0.003	0.007	-0.006	-0.004

	2923.779			2967.341			3036.869		
1.Re	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000
2.N	-0.001	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000
3.C	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.C	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000
6.C	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000

7.C	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	-0.001	0.000
8.H	0.001	-0.001	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000
9.H	-0.002	-0.003	0.001	-0.003	-0.003	0.002	0.000	0.000	0.000
10.H	-0.001	0.001	-0.001	-0.001	0.000	-0.001	0.000	-0.001	0.000
11.H	0.002	-0.003	0.001	-0.002	0.003	-0.001	-0.004	0.005	-0.003
12.H	0.001	0.001	-0.001	0.000	0.000	0.000	-0.001	-0.001	0.000
13.O	0.000	-0.001	0.000	0.000	0.000	-0.003	0.000	0.000	0.000
14.C	-0.056	0.023	-0.041	-0.003	0.003	-0.002	-0.012	-0.012	0.006
15.C	0.004	0.001	0.002	0.004	-0.055	-0.040	0.090	0.020	0.006
16.O	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000
17.O	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000
18.H	-0.034	-0.044	-0.035	0.460	0.596	0.418	-0.237	-0.339	-0.235
19.H	-0.006	0.002	0.000	-0.492	0.035	0.085	-0.829	0.092	0.162
20.H	0.852	-0.070	0.436	0.043	-0.005	0.023	0.009	-0.001	0.007
21.H	-0.183	-0.177	0.069	-0.011	-0.013	0.002	0.134	0.142	-0.071

	3067.404			3131.072			3135.013		
1.Re	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000
2.N	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000
3.C	0.000	0.000	0.000	0.007	-0.011	0.007	0.004	-0.006	0.004
4.C	0.000	0.000	0.000	0.004	0.006	-0.004	-0.014	-0.020	0.012
5.C	0.000	0.000	0.000	0.023	0.031	-0.019	0.020	0.029	-0.018
6.C	0.000	0.000	0.000	-0.066	0.001	0.000	-0.010	-0.003	0.002
7.C	0.000	0.001	0.000	0.016	-0.023	0.014	-0.031	0.054	-0.032
8.H	0.000	0.001	0.000	-0.088	0.119	-0.076	-0.050	0.068	-0.043
9.H	0.001	0.001	-0.001	-0.251	-0.371	0.229	-0.230	-0.339	0.210
10.H	0.001	0.000	0.000	0.750	-0.016	0.009	0.114	0.003	-0.001
11.H	0.003	-0.005	0.002	-0.170	0.286	-0.167	0.366	-0.622	0.361
12.H	0.002	0.003	-0.002	-0.056	-0.071	0.040	0.186	0.234	-0.134
13.O	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000
14.C	-0.067	-0.054	0.018	0.000	0.000	0.000	0.001	0.000	0.000
15.C	-0.019	-0.003	-0.001	0.000	0.000	0.000	0.001	0.000	0.000
16.O	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000
17.O	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000
18.H	0.050	0.074	0.050	0.000	-0.001	-0.001	-0.002	-0.001	-0.001
19.H	0.170	-0.021	-0.032	0.004	-0.001	-0.001	-0.006	0.001	0.001
20.H	0.210	-0.029	0.126	0.001	-0.001	0.000	-0.006	0.001	-0.003
21.H	0.597	0.652	-0.329	0.001	0.000	-0.001	-0.002	-0.001	0.001

	3140.862			3152.756			3160.222		
1.Re	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000
2.N	0.000	0.000	0.000	0.000	-0.002	0.002	0.001	0.000	0.000
3.C	0.020	-0.029	0.018	-0.031	0.038	-0.024	0.032	-0.040	0.025
4.C	0.008	0.013	-0.007	0.038	0.044	-0.025	0.032	0.037	-0.021
5.C	0.022	0.039	-0.024	0.015	0.017	-0.011	-0.018	-0.024	0.015
6.C	0.055	-0.002	0.001	0.004	-0.002	0.001	-0.018	0.000	0.000
7.C	0.007	-0.017	0.010	-0.011	0.013	-0.008	-0.016	0.024	-0.014
8.H	-0.241	0.324	-0.206	0.325	-0.432	0.274	-0.333	0.442	-0.280
9.H	-0.281	-0.423	0.262	-0.138	-0.200	0.124	0.177	0.260	-0.161
10.H	-0.614	0.013	-0.009	-0.040	0.004	-0.002	0.189	-0.004	0.003
11.H	-0.095	0.165	-0.096	0.097	-0.158	0.092	0.154	-0.258	0.150
12.H	-0.110	-0.138	0.078	-0.410	-0.505	0.288	-0.334	-0.409	0.234
13.O	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000
14.C	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000
15.C	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000
16.O	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000
17.O	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000
18.H	-0.001	-0.002	-0.001	0.000	0.000	0.000	0.001	0.002	0.001
19.H	0.004	-0.001	-0.001	0.000	0.000	0.000	-0.004	0.001	0.001
20.H	0.000	0.000	0.000	-0.001	0.000	0.000	0.001	0.000	0.001
21.H	0.002	0.002	-0.001	0.002	0.002	-0.001	-0.001	-0.001	0.001

List of All Frequencies:

Intensities
==========

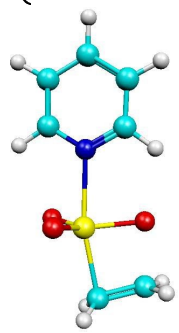
Frequency cm-1	Dipole Strength 1e-40 esu2 cm2	Absorption Intensity (degeneracy not counted) km/mole
-189.596859	93.321329	-4.434964
18.943854	0.000000	0.000000
44.826596	16.954326	0.190500
93.377641	36.199110	0.847264
154.731134	13.248457	0.513832
191.858555	35.369342	1.700929
202.968990	26.369724	1.341570
207.834346	5.877008	0.306162
261.113692	89.492360	5.857249
298.412734	83.767625	6.265729
341.252885	33.665869	2.879680
362.924435	0.956540	0.087016
402.568055	33.321284	3.362320
417.036377	53.939413	5.638430

506.057078	78.311927	9.933573
559.484427	78.831888	11.055236
623.907866	20.558113	3.215006
652.582319	158.933503	25.997335
683.299287	186.288868	31.906263
724.580762	50.945559	9.252758
728.888271	486.031047	88.797971
828.025134	7.531563	1.563172
847.172975	1.401300	0.297565
914.335231	227.332134	52.100795
923.272528	168.139009	38.911365
925.171329	13.128523	3.044501
951.643530	1.384699	0.330299
973.247572	277.341192	67.657473
974.971091	13.767189	3.364458
997.648891	69.838407	17.464257
1024.130875	141.563933	36.340103
1047.462850	46.213594	12.133510
1053.679431	101.576776	26.827549
1073.305233	14.911666	4.011691
1074.787027	50.820033	13.691008
1106.672041	37.115245	10.295545
1150.261282	4.717508	1.360151
1173.027421	5.673266	1.668090
1213.763968	37.821782	11.506793
1287.088147	31.103051	10.034352
1292.829004	4.974413	1.611985
1351.357565	10.233168	3.466239
1376.067327	55.050280	18.987915
1444.441449	44.839552	16.234513
1451.987831	153.894442	56.009795
1469.642027	7.256447	2.673091
1557.525270	2.841256	1.109235
1600.989893	152.711306	61.282694
2923.779324	30.830636	22.594625
2967.340796	4.072929	3.029370
3036.868822	3.641282	2.771778
3067.403740	6.112824	4.699924
3131.071822	0.128090	0.100528
3135.013345	16.638936	13.075040
3140.861735	49.922283	39.302604
3152.756034	49.395324	39.035008
3160.221850	0.401861	0.318326

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

1315.9415	3945.0401	3950.7556
0.9894	0.0624	0.1314
-0.1091	0.9157	0.3867
-0.0962	-0.3969	0.9128

TS(IIa-IIIa)



CCSD=-629.6648422

ATOMS cartesian

C	2.109490	-0.185376	-0.524732
C	2.147509	-0.114498	0.909505
H	2.554766	0.807861	1.340137
H	2.433855	-1.032512	1.435223
H	2.317625	0.704157	-1.122408
H	2.198515	-1.150883	-1.026659
O	0.207105	-0.090545	-0.967508
Re	-0.023011	0.026788	0.823672
O	-0.453339	-1.306407	1.813500
O	-0.311184	1.545523	1.553619
N	-2.267886	0.003796	0.241370
C	-2.621516	0.222092	-1.034857
C	-3.953104	0.248134	-1.425996
C	-4.939474	0.040696	-0.466137
C	-4.562150	-0.191009	0.854608
C	-3.213580	-0.203309	1.178233
H	-2.869293	-0.389168	2.194569
H	-5.303447	-0.366656	1.633794
H	-5.993621	0.053532	-0.745790
H	-4.204668	0.426273	-2.471122
H	-1.807101	0.367249	-1.747023

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)

	-329.846			-64.946			61.395		
1.C	-0.426	0.013	-0.356	-0.014	0.147	-0.051	-0.024	-0.341	0.012
2.C	-0.281	0.003	-0.153	0.013	0.025	-0.048	0.000	0.008	-0.005
3.H	0.067	-0.077	-0.302	-0.008	0.000	0.024	0.053	0.096	-0.241
4.H	0.079	0.015	-0.322	0.043	-0.013	-0.130	-0.034	0.126	0.217
5.H	0.029	-0.018	-0.244	-0.070	0.209	0.022	0.135	-0.525	-0.207
6.H	0.030	0.001	-0.251	0.004	0.195	-0.139	-0.201	-0.479	0.248
7.O	0.432	-0.032	-0.028	-0.044	0.088	-0.004	0.010	0.142	-0.007
8.Re	0.017	0.002	0.054	0.005	-0.017	0.008	0.002	0.031	0.000
9.O	-0.056	0.056	0.049	0.009	-0.090	-0.094	0.057	-0.071	-0.114
10.O	-0.047	-0.029	0.041	0.020	-0.073	0.134	-0.077	-0.044	0.124
11.N	0.011	-0.030	-0.095	-0.015	0.092	0.023	0.001	0.006	-0.004
12.C	-0.023	-0.007	-0.075	0.009	-0.124	-0.019	-0.003	-0.021	-0.006
13.C	-0.031	0.006	-0.035	0.017	-0.224	-0.062	-0.004	-0.043	-0.004
14.C	-0.008	0.002	-0.011	-0.002	-0.062	-0.048	0.001	-0.044	0.001
15.C	0.017	0.007	-0.016	-0.028	0.202	0.009	0.006	-0.019	0.004
16.C	0.025	-0.010	-0.057	-0.035	0.260	0.041	0.006	0.010	0.002
17.H	0.046	-0.010	-0.064	-0.059	0.446	0.083	0.009	0.038	0.006
18.H	0.033	0.021	0.002	-0.045	0.356	0.027	0.010	-0.016	0.008
19.H	-0.012	0.002	0.004	0.004	-0.133	-0.072	0.001	-0.061	0.001
20.H	-0.063	0.016	-0.025	0.041	-0.428	-0.102	-0.008	-0.056	-0.005
21.H	-0.047	0.000	-0.099	0.021	-0.201	-0.021	-0.005	-0.025	-0.009

	68.961			110.987			141.538		
1.C	-0.031	-0.054	-0.050	0.070	0.035	0.132	-0.057	0.003	-0.111
2.C	-0.006	-0.286	-0.046	-0.058	-0.193	0.159	0.001	-0.136	-0.125
3.H	0.109	-0.404	0.098	0.010	-0.305	0.336	0.069	-0.204	-0.044
4.H	-0.129	-0.406	-0.190	-0.180	-0.302	0.033	-0.073	-0.207	-0.211
5.H	0.013	0.027	0.085	0.200	0.118	0.300	-0.078	0.052	-0.046
6.H	-0.129	0.020	-0.211	0.106	0.109	-0.005	-0.173	0.050	-0.221
7.O	-0.066	0.081	-0.003	0.175	0.126	-0.017	-0.148	0.137	-0.012
8.Re	0.001	0.023	0.007	-0.013	0.015	-0.025	-0.035	0.019	0.010
9.O	-0.121	0.068	0.021	-0.100	0.009	-0.064	0.134	0.025	0.108
10.O	0.219	0.051	0.031	-0.026	0.004	-0.014	0.035	0.019	0.033
11.N	-0.009	0.122	0.033	0.038	-0.085	-0.075	0.064	-0.224	0.037
12.C	0.003	0.098	0.025	-0.039	-0.127	-0.060	0.147	-0.195	0.021

13.C	0.013	-0.062	-0.021	-0.069	-0.073	0.048	0.171	-0.016	-0.026
14.C	0.008	-0.209	-0.057	-0.008	0.044	0.134	0.112	0.167	-0.045
15.C	-0.005	-0.159	-0.044	0.077	0.053	0.112	0.032	0.075	-0.039
16.C	-0.014	0.011	0.002	0.100	-0.023	0.001	0.018	-0.147	0.006
17.H	-0.025	0.046	0.012	0.171	-0.022	-0.022	-0.029	-0.224	0.008
18.H	-0.009	-0.252	-0.069	0.128	0.124	0.177	-0.023	0.182	-0.068
19.H	0.017	-0.353	-0.097	-0.029	0.109	0.217	0.122	0.367	-0.070
20.H	0.026	-0.061	-0.025	-0.145	-0.124	0.057	0.232	-0.010	-0.039
21.H	0.007	0.191	0.049	-0.081	-0.189	-0.122	0.200	-0.284	0.062

	165.769			210.484			236.476		
1.C	0.053	-0.004	0.000	-0.046	0.011	-0.080	-0.016	-0.010	-0.035
2.C	0.071	-0.109	0.003	0.076	-0.202	-0.090	0.080	0.213	-0.067
3.H	0.124	-0.165	0.074	0.188	-0.304	0.030	-0.062	0.346	-0.220
4.H	-0.011	-0.168	-0.055	-0.044	-0.318	-0.224	0.217	0.328	0.065
5.H	0.069	0.036	0.065	-0.133	0.109	0.035	-0.100	-0.112	-0.215
6.H	-0.005	0.029	-0.073	-0.151	0.090	-0.250	-0.119	-0.096	0.112
7.O	-0.001	0.083	0.014	-0.204	-0.007	0.024	-0.156	0.100	0.016
8.Re	0.084	0.014	0.018	0.062	0.008	0.030	0.024	-0.013	0.027
9.O	0.064	0.023	0.018	-0.215	0.006	-0.102	-0.426	0.051	-0.076
10.O	0.015	0.013	-0.021	-0.573	-0.005	-0.200	0.176	0.020	0.012
11.N	-0.208	-0.136	-0.006	0.028	0.033	0.019	0.027	-0.077	-0.098
12.C	-0.201	-0.117	-0.008	0.056	0.038	0.027	-0.015	-0.102	-0.088
13.C	-0.197	-0.009	-0.042	0.062	0.014	0.008	-0.036	-0.041	-0.019
14.C	-0.253	0.103	-0.077	0.065	-0.028	0.003	0.000	0.088	0.047
15.C	-0.280	0.035	-0.082	0.050	-0.004	0.010	0.056	0.000	0.014
16.C	-0.273	-0.104	-0.056	0.046	0.042	0.023	0.072	-0.113	-0.070
17.H	-0.328	-0.161	-0.047	0.052	0.071	0.026	0.119	-0.189	-0.101
18.H	-0.300	0.094	-0.087	0.042	-0.014	0.000	0.090	0.027	0.052
19.H	-0.247	0.242	-0.091	0.069	-0.070	-0.014	-0.016	0.218	0.112
20.H	-0.143	-0.004	-0.055	0.063	0.028	0.010	-0.086	-0.063	-0.011
21.H	-0.192	-0.148	-0.007	0.067	0.052	0.041	-0.038	-0.125	-0.121

	252.305			269.647			315.074		
1.C	0.012	0.004	-0.018	0.039	-0.023	0.001	-0.328	0.022	0.099
2.C	0.063	-0.081	-0.044	0.027	0.102	-0.013	-0.142	0.008	0.124
3.H	0.071	-0.111	0.012	-0.040	0.166	-0.088	-0.075	0.000	0.069
4.H	-0.009	-0.126	-0.086	0.073	0.165	0.074	-0.108	-0.009	0.069
5.H	-0.126	0.053	0.009	0.164	-0.113	-0.090	-0.267	0.020	0.119
6.H	-0.063	0.043	-0.107	-0.134	-0.083	0.088	-0.314	0.016	0.114
7.O	-0.187	-0.114	0.041	0.019	0.562	-0.035	-0.092	0.070	0.067
8.Re	-0.003	0.011	0.034	-0.005	-0.085	0.007	0.005	-0.002	0.050
9.O	0.191	-0.015	0.082	0.094	0.120	0.375	0.190	-0.357	-0.321
10.O	-0.013	-0.022	0.119	-0.068	0.008	-0.275	0.190	0.284	-0.445
11.N	0.047	0.038	-0.275	0.008	0.057	-0.073	0.016	0.004	-0.031
12.C	-0.111	0.020	-0.254	-0.044	0.130	-0.053	-0.004	0.011	-0.028
13.C	-0.178	0.023	-0.065	-0.062	0.031	-0.017	-0.007	-0.019	-0.016
14.C	-0.054	-0.010	0.061	-0.019	-0.108	0.000	0.007	0.003	0.006
15.C	0.124	-0.011	0.006	0.032	0.047	0.013	0.025	0.019	0.001
16.C	0.162	0.042	-0.181	0.040	0.122	-0.032	0.030	-0.011	-0.027
17.H	0.280	0.069	-0.217	0.078	0.173	-0.035	0.039	-0.042	-0.036
18.H	0.242	-0.038	0.111	0.067	0.064	0.050	0.037	0.034	0.016
19.H	-0.091	-0.023	0.196	-0.025	-0.279	0.014	0.003	0.005	0.022
20.H	-0.331	0.053	-0.024	-0.107	0.042	-0.004	-0.026	-0.032	-0.014
21.H	-0.195	0.004	-0.354	-0.069	0.209	-0.069	-0.021	0.046	-0.039

	340.192			376.476			422.765		
1.C	-0.412	0.035	0.210	-0.013	-0.007	0.010	0.005	0.000	0.003
2.C	-0.234	0.028	0.235	-0.006	-0.005	0.011	0.009	0.001	0.001
3.H	-0.241	0.042	0.209	-0.005	-0.001	0.002	0.002	0.003	0.003
4.H	-0.233	0.022	0.218	-0.001	-0.002	0.012	0.005	0.001	0.004
5.H	-0.331	0.028	0.234	-0.013	-0.005	0.011	-0.009	0.001	0.000
6.H	-0.335	0.028	0.243	-0.008	-0.004	0.007	0.002	0.000	0.004
7.O	-0.193	0.007	-0.105	-0.009	-0.020	-0.003	-0.017	-0.024	0.003
8.Re	0.059	-0.006	-0.045	0.002	0.001	-0.003	0.001	0.008	0.001
9.O	0.008	0.135	0.102	0.010	0.010	0.012	-0.034	-0.004	-0.033
10.O	-0.007	-0.117	0.127	-0.014	-0.011	0.015	0.030	0.007	0.022
11.N	0.009	-0.007	0.011	0.008	0.011	-0.002	0.006	-0.317	-0.053
12.C	0.013	-0.027	0.010	-0.009	0.202	0.037	-0.003	0.064	0.012
13.C	0.020	0.025	0.000	0.001	-0.187	-0.030	-0.005	0.168	0.022
14.C	0.019	0.001	-0.006	-0.004	-0.008	-0.002	0.013	-0.246	-0.044
15.C	0.010	-0.021	-0.006	0.001	0.183	0.031	-0.009	0.172	0.036
16.C	0.006	0.017	0.010	0.015	-0.182	-0.040	-0.005	0.063	0.019
17.H	0.002	0.053	0.019	0.030	-0.502	-0.104	-0.010	0.189	0.044
18.H	0.001	-0.044	-0.020	-0.003	0.376	0.071	-0.022	0.404	0.076
19.H	0.020	0.002	-0.006	-0.004	-0.020	0.000	0.025	-0.577	-0.105
20.H	0.026	0.062	0.005	0.013	-0.375	-0.065	-0.015	0.413	0.067
21.H	0.013	-0.068	0.001	-0.031	0.535	0.082	-0.001	0.177	0.037

	531.044			631.762			649.227		
1.C	0.255	-0.020	-0.082	0.002	0.000	0.004	-0.003	0.003	0.003
2.C	-0.429	0.026	-0.054	0.021	-0.002	0.003	0.001	0.003	0.001
3.H	-0.512	0.015	0.063	-0.010	0.007	0.012	0.009	-0.005	0.008
4.H	-0.484	0.067	0.057	-0.003	-0.001	0.015	-0.014	-0.006	-0.005

5.H	0.325	-0.018	-0.059	0.000	0.002	0.008	0.003	-0.004	-0.004
6.H	0.324	-0.035	-0.049	0.006	0.001	0.004	-0.013	-0.001	0.008
7.O	-0.104	0.000	-0.041	0.005	0.000	-0.001	-0.007	0.000	-0.011
8.Re	0.020	0.000	0.014	0.004	0.000	0.002	0.000	0.000	0.000
9.O	0.001	-0.017	-0.009	0.015	0.006	-0.001	0.002	0.003	-0.003
10.O	0.004	0.013	-0.010	0.011	-0.007	-0.001	0.001	-0.003	-0.001
11.N	-0.003	0.001	-0.005	-0.358	0.039	-0.092	0.045	0.027	-0.122
12.C	0.001	0.003	-0.001	0.007	0.036	-0.211	0.276	0.036	-0.146
13.C	0.002	0.000	-0.004	0.070	0.039	-0.235	0.179	-0.039	0.293
14.C	0.008	-0.001	0.004	0.369	-0.016	0.103	-0.043	-0.028	0.143
15.C	0.004	0.002	0.005	-0.070	-0.024	0.247	-0.299	-0.026	0.159
16.C	0.004	-0.002	-0.003	-0.104	-0.065	0.174	-0.161	0.046	-0.268
17.H	0.008	-0.009	-0.006	0.211	-0.108	0.061	-0.070	0.002	-0.311
18.H	0.003	0.001	0.003	-0.334	0.014	0.005	-0.148	-0.103	0.290
19.H	0.008	-0.005	0.004	0.375	-0.021	0.084	0.071	-0.051	-0.290
20.H	-0.006	0.002	-0.002	-0.286	0.072	-0.145	-0.004	-0.099	0.331
21.H	0.011	-0.001	0.008	0.240	-0.091	0.021	0.201	0.014	-0.236

	682.725			709.258			745.435		
1.C	-0.001	-0.001	-0.001	-0.004	-0.043	0.003	0.000	0.000	0.000
2.C	0.001	-0.004	-0.002	-0.004	-0.084	0.004	-0.002	-0.001	-0.001
3.H	-0.026	0.010	-0.006	-0.495	0.219	-0.167	-0.015	0.004	0.000
4.H	0.023	0.007	0.005	0.515	0.168	0.150	0.009	0.003	-0.001
5.H	-0.023	0.007	0.005	-0.369	0.135	0.151	-0.006	0.001	-0.001
6.H	0.016	0.003	-0.006	0.381	0.071	-0.159	0.002	0.000	0.001
7.O	0.002	0.003	0.000	0.002	0.017	-0.001	0.003	0.002	0.007
8.Re	0.000	0.000	0.000	0.000	0.003	0.000	0.000	-0.001	-0.001
9.O	0.002	-0.002	0.002	0.004	0.000	-0.001	0.002	0.001	0.001
10.O	-0.004	-0.002	-0.002	-0.004	0.005	0.000	-0.003	0.001	-0.002
11.N	0.006	0.130	0.030	0.000	-0.005	-0.001	0.005	0.120	0.023
12.C	-0.005	-0.098	-0.006	0.002	0.003	0.000	0.010	-0.105	-0.020
13.C	-0.010	0.135	0.025	0.001	-0.002	0.001	0.002	0.016	0.009
14.C	-0.011	-0.067	-0.018	-0.001	0.003	0.001	-0.005	-0.109	-0.020
15.C	0.005	0.140	0.011	-0.002	-0.005	0.000	-0.005	0.011	0.004
16.C	0.011	-0.096	-0.018	-0.001	0.005	0.000	0.004	-0.108	-0.025
17.H	0.014	-0.519	-0.096	0.001	0.016	0.002	-0.014	0.207	0.038
18.H	0.023	-0.148	-0.036	-0.002	0.000	0.001	-0.019	0.600	0.123
19.H	0.004	-0.531	-0.097	-0.001	0.009	0.000	-0.023	0.390	0.071
20.H	0.017	-0.168	-0.033	0.001	-0.006	0.001	-0.015	0.568	0.108
21.H	0.009	-0.536	-0.081	0.000	0.012	0.001	-0.007	0.186	0.022

	794.994			847.145			852.161		
1.C	-0.030	0.001	0.000	0.002	0.053	-0.002	-0.001	-0.008	0.000
2.C	-0.114	0.003	-0.099	0.001	-0.028	0.000	-0.001	0.005	0.000
3.H	-0.292	0.031	-0.006	-0.377	-0.034	0.367	0.061	0.002	-0.051
4.H	-0.308	0.007	0.001	0.354	-0.120	-0.350	-0.054	0.014	0.045
5.H	-0.299	0.022	-0.066	0.063	-0.231	-0.404	-0.014	0.032	0.054
6.H	-0.285	0.015	-0.078	-0.090	-0.178	0.426	0.017	0.024	-0.057
7.O	0.029	0.045	0.768	0.000	-0.003	0.001	-0.001	0.001	0.002
8.Re	0.015	-0.005	-0.066	0.000	0.001	0.000	0.000	-0.001	0.000
9.O	-0.018	-0.006	0.053	0.005	0.002	-0.002	0.000	0.003	-0.002
10.O	-0.013	0.011	0.045	-0.005	0.007	0.003	0.001	0.001	0.000
11.N	0.005	-0.013	0.004	-0.002	-0.001	0.000	-0.001	-0.003	-0.002
12.C	-0.001	0.002	-0.006	-0.001	0.013	0.003	-0.003	0.085	0.013
13.C	0.010	0.000	-0.001	0.000	0.005	0.001	-0.001	0.061	0.011
14.C	0.014	0.008	0.007	-0.001	0.001	0.000	0.000	0.005	0.003
15.C	-0.009	-0.001	0.007	0.000	-0.008	-0.002	0.002	-0.066	-0.011
16.C	-0.003	0.012	-0.012	0.001	-0.007	-0.001	0.003	-0.078	-0.016
17.H	0.022	-0.018	-0.025	-0.001	0.046	0.009	-0.020	0.458	0.089
18.H	-0.015	-0.045	-0.009	-0.002	0.061	0.011	-0.017	0.498	0.097
19.H	0.020	-0.032	-0.015	0.000	-0.001	-0.002	0.001	-0.025	-0.004
20.H	-0.005	-0.030	-0.003	0.004	-0.057	-0.010	0.017	-0.509	-0.091
21.H	-0.039	0.005	-0.037	0.004	-0.066	-0.008	0.021	-0.456	-0.072

	904.132			921.951			950.191		
1.C	0.002	0.035	-0.001	0.002	-0.003	0.000	0.016	-0.003	-0.004
2.C	-0.002	-0.046	0.002	-0.005	0.004	0.006	-0.049	0.007	0.047
3.H	-0.238	0.152	-0.199	0.047	-0.020	0.010	0.302	-0.062	-0.125
4.H	0.248	0.138	0.188	0.016	-0.016	-0.039	0.295	-0.003	-0.147
5.H	0.592	0.013	0.156	-0.042	-0.009	-0.024	0.039	-0.012	-0.013
6.H	-0.591	0.073	-0.161	0.056	-0.010	0.019	0.073	-0.003	-0.001
7.O	-0.001	-0.019	0.002	-0.003	0.002	0.001	-0.021	0.005	0.020
8.Re	0.000	-0.001	0.000	0.000	-0.002	0.000	-0.002	-0.006	0.000
9.O	0.004	0.006	-0.004	0.006	0.016	-0.009	0.022	0.062	-0.044
10.O	-0.004	0.009	0.004	-0.002	0.012	0.005	0.000	0.008	0.003
11.N	0.000	0.001	0.000	-0.006	0.019	0.000	-0.004	0.001	-0.004
12.C	0.000	-0.008	-0.002	-0.004	-0.089	-0.013	-0.006	-0.083	-0.009
13.C	0.000	0.006	0.001	-0.002	0.034	0.012	-0.001	0.080	0.020
14.C	0.000	0.005	0.000	0.014	0.066	0.014	0.017	0.005	0.001
15.C	0.000	0.000	0.001	0.002	0.043	0.006	0.004	-0.088	-0.016
16.C	0.000	-0.005	0.000	0.001	-0.098	-0.020	-0.005	0.087	0.014
17.H	0.000	0.033	0.007	-0.028	0.587	0.113	0.029	-0.439	-0.093
18.H	-0.002	-0.004	-0.002	-0.003	-0.248	-0.066	-0.032	0.438	0.068
19.H	0.001	-0.029	-0.006	0.034	-0.403	-0.081	0.024	-0.037	-0.026
20.H	0.001	-0.031	-0.005	0.000	-0.200	-0.028	0.018	-0.387	-0.063
21.H	-0.002	0.044	0.006	-0.041	0.564	0.081	-0.042	0.413	0.056

	951.677			960.527			976.773		
1.C	0.023	-0.006	-0.005	0.030	0.004	-0.008	-0.002	0.000	0.000
2.C	-0.067	0.009	0.063	-0.094	0.004	0.088	0.004	-0.001	-0.004
3.H	0.409	-0.080	-0.182	0.540	-0.099	-0.266	-0.024	0.003	0.015
4.H	0.405	0.003	-0.186	0.617	0.014	-0.262	-0.027	-0.002	0.009
5.H	0.061	-0.004	0.006	0.125	-0.020	-0.019	-0.003	-0.002	-0.001
6.H	0.086	0.005	-0.020	0.062	-0.001	-0.001	0.002	-0.003	0.006
7.O	-0.027	0.018	0.037	-0.036	-0.005	0.030	0.001	0.000	-0.002
8.Re	-0.005	-0.030	0.004	0.000	0.022	-0.005	0.000	0.000	0.000
9.O	0.073	0.223	-0.160	-0.030	-0.102	0.070	-0.002	-0.005	0.004
10.O	-0.018	0.115	0.048	0.030	-0.156	-0.070	-0.002	0.010	0.005
11.N	0.013	-0.004	0.005	0.019	0.000	0.005	0.002	-0.011	-0.005
12.C	-0.004	0.073	0.015	-0.007	0.025	0.004	0.005	-0.012	-0.004
13.C	0.002	-0.063	-0.017	0.000	-0.019	-0.012	-0.004	0.089	0.009
14.C	0.001	-0.022	-0.001	0.009	-0.009	-0.001	0.002	-0.129	-0.027
15.C	-0.004	0.067	0.015	-0.014	0.031	0.014	-0.008	0.066	0.024
16.C	0.000	-0.048	-0.013	-0.002	-0.029	-0.004	0.001	-0.003	0.003
17.H	-0.041	0.213	0.048	-0.010	0.157	0.033	0.015	0.071	0.011
18.H	0.016	-0.334	-0.056	-0.022	-0.163	-0.036	0.013	-0.391	-0.058
19.H	-0.008	0.130	0.038	0.010	0.056	0.000	-0.028	0.720	0.123
20.H	-0.017	0.317	0.052	-0.013	0.100	0.011	0.025	-0.492	-0.097
21.H	0.017	-0.408	-0.060	-0.018	-0.133	-0.040	0.002	0.136	0.023

	984.780			1013.155			1029.246		
1.C	0.011	-0.004	0.010	-0.003	0.001	-0.006	0.001	-0.001	0.011
2.C	-0.071	0.012	0.050	-0.013	0.003	0.021	-0.025	0.004	0.005
3.H	0.455	-0.084	-0.220	0.129	-0.019	-0.059	0.117	-0.024	-0.066
4.H	0.402	-0.009	-0.228	0.125	0.004	-0.043	0.101	-0.002	-0.072
5.H	-0.036	0.010	0.009	0.060	0.004	0.017	0.010	0.001	0.016
6.H	-0.006	-0.002	-0.003	0.046	0.000	0.000	0.019	-0.002	0.017
7.O	-0.002	0.001	-0.066	-0.002	0.000	-0.006	-0.004	0.000	0.010
8.Re	0.017	-0.017	-0.034	0.004	-0.002	-0.008	0.002	-0.001	-0.003
9.O	-0.100	-0.273	0.218	-0.017	-0.065	0.053	-0.004	-0.016	0.013
10.O	-0.100	0.470	0.235	-0.011	0.083	0.044	-0.003	0.026	0.014
11.N	0.109	0.002	0.025	-0.368	0.001	-0.088	-0.209	0.005	-0.064
12.C	-0.008	0.006	-0.025	-0.106	-0.008	0.121	0.227	0.030	-0.157
13.C	-0.025	0.005	-0.080	0.089	-0.065	0.338	0.057	-0.010	0.072
14.C	0.013	0.014	-0.001	0.162	-0.031	0.050	-0.333	0.016	-0.096
15.C	-0.078	-0.023	0.060	0.249	0.071	-0.258	0.081	0.006	-0.023
16.C	-0.012	-0.003	0.030	-0.040	0.029	-0.173	0.117	-0.046	0.252
17.H	-0.012	-0.040	0.028	-0.096	0.042	-0.172	0.403	0.002	0.179
18.H	-0.143	0.036	0.020	0.305	0.018	-0.259	0.189	-0.013	0.087
19.H	0.022	-0.056	-0.048	0.178	0.108	0.094	-0.351	-0.048	-0.103
20.H	-0.070	0.055	-0.066	0.083	0.003	0.383	0.219	-0.008	0.025
21.H	-0.070	-0.022	-0.102	-0.106	-0.123	0.121	0.438	0.053	0.065

	1065.584			1084.435			1115.771		
1.C	-0.002	0.000	0.001	-0.006	-0.001	-0.018	-0.090	0.010	0.057
2.C	0.002	-0.001	-0.004	0.013	0.001	0.013	0.030	-0.007	-0.086
3.H	-0.024	0.003	0.011	-0.027	0.005	0.042	-0.030	0.033	-0.130
4.H	-0.023	0.000	0.009	-0.033	0.003	0.044	-0.041	-0.040	-0.116
5.H	0.006	-0.001	0.002	0.056	-0.007	-0.009	0.633	-0.022	0.263
6.H	0.008	0.000	0.003	0.056	0.000	-0.011	0.632	-0.032	0.267
7.O	-0.003	0.001	0.000	-0.008	0.001	0.002	-0.031	0.003	0.022
8.Re	0.000	0.000	0.001	-0.001	0.000	0.001	0.000	0.000	-0.002
9.O	0.000	0.006	-0.005	0.003	0.004	-0.003	-0.001	-0.005	0.003
10.O	0.000	-0.006	-0.004	0.001	-0.001	-0.001	0.000	0.005	0.002
11.N	0.072	-0.001	0.016	0.012	0.015	-0.079	0.005	0.000	0.004
12.C	0.041	0.026	-0.121	-0.120	-0.004	0.037	0.003	0.000	0.000
13.C	-0.055	-0.020	0.109	0.043	-0.018	0.083	-0.001	0.001	-0.007
14.C	0.053	-0.007	0.009	0.024	0.015	-0.086	0.000	0.001	0.002
15.C	0.005	0.023	-0.117	-0.070	-0.010	0.051	0.000	-0.001	0.003
16.C	-0.023	-0.023	0.132	0.086	-0.012	0.072	-0.003	0.000	-0.003
17.H	-0.199	-0.055	0.195	0.422	0.031	-0.027	-0.016	-0.002	0.001
18.H	-0.384	0.073	-0.483	-0.274	0.007	-0.127	0.010	-0.001	0.013
19.H	0.066	0.030	-0.004	0.153	0.112	-0.564	-0.006	-0.010	0.023
20.H	-0.545	-0.069	0.225	0.351	0.041	0.030	-0.001	0.005	-0.007
21.H	-0.110	0.029	-0.297	-0.356	-0.019	-0.222	0.000	0.000	-0.003

	1131.854			1165.497			1194.266		
1.C	-0.049	-0.010	-0.248	-0.002	0.000	-0.005	0.009	0.126	-0.007
2.C	0.077	0.007	0.237	0.002	0.000	0.006	-0.008	-0.117	0.007
3.H	-0.053	-0.010	0.429	-0.002	0.001	0.007	0.166	0.048	-0.508
4.H	-0.052	0.061	0.428	-0.001	0.001	0.008	-0.159	0.119	0.500
5.H	0.405	-0.090	-0.250	0.013	-0.004	-0.007	-0.110	-0.119	-0.417
6.H	0.411	0.013	-0.258	0.014	0.001	-0.006	0.087	-0.087	0.422
7.O	-0.055	0.006	0.039	-0.001	0.000	0.002	0.000	0.001	0.000
8.Re	-0.001	0.000	-0.006	0.000	0.000	0.000	0.000	-0.001	0.000
9.O	-0.001	-0.012	0.008	0.000	-0.001	0.001	0.000	0.002	-0.001
10.O	0.000	0.014	0.006	0.000	0.000	0.000	0.000	0.002	0.001
11.N	0.002	0.001	0.010	-0.003	-0.003	0.016	0.000	0.000	0.000
12.C	0.022	0.002	-0.008	0.004	-0.001	0.009	0.000	0.000	0.000
13.C	0.003	0.002	-0.013	-0.040	-0.003	0.006	0.000	0.000	0.000

14.C	-0.012	-0.001	0.009	0.016	0.012	-0.058	0.000	0.000	0.000
15.C	0.007	0.000	-0.003	0.028	-0.004	0.024	0.000	0.000	0.000
16.C	-0.012	-0.001	0.001	-0.006	-0.001	0.005	0.000	0.000	0.000
17.H	-0.060	-0.007	0.017	-0.111	-0.013	0.039	0.001	0.000	0.000
18.H	0.030	-0.002	0.017	0.372	-0.049	0.342	-0.001	0.000	-0.001
19.H	-0.039	-0.026	0.108	0.170	0.119	-0.629	0.000	0.000	0.000
20.H	-0.002	0.002	-0.013	-0.500	-0.032	0.112	0.001	0.000	0.000
21.H	0.027	0.000	-0.001	0.088	-0.015	0.100	0.000	0.001	0.001

	1209.650			1304.658			1342.055		
1.C	-0.004	0.000	-0.005	-0.001	0.000	-0.004	0.002	0.000	-0.001
2.C	0.001	0.001	0.005	0.000	0.001	0.005	-0.001	0.000	-0.004
3.H	0.006	-0.001	0.005	-0.007	0.010	-0.010	0.005	-0.009	0.011
4.H	0.004	0.001	0.005	-0.009	-0.009	-0.007	0.005	0.009	0.009
5.H	0.017	-0.002	-0.001	0.017	-0.004	-0.006	-0.007	0.009	0.010
6.H	0.017	0.000	-0.002	0.015	0.003	-0.010	-0.010	-0.008	0.013
7.O	0.000	0.000	0.002	0.005	0.000	-0.009	0.001	0.000	-0.003
8.Re	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.001	0.000	0.000	0.001
9.O	0.001	-0.001	0.001	-0.002	0.003	-0.004	0.001	0.002	-0.002
10.O	0.000	0.002	0.001	-0.001	0.000	0.000	0.000	-0.001	-0.001
11.N	-0.007	0.001	-0.008	-0.111	-0.075	0.389	-0.010	-0.006	0.027
12.C	0.030	-0.015	0.081	-0.152	0.034	-0.233	0.056	-0.006	0.055
13.C	-0.044	0.000	-0.010	0.222	0.022	-0.074	0.019	0.001	-0.003
14.C	-0.006	0.000	0.000	-0.066	-0.038	0.191	0.025	0.018	-0.091
15.C	-0.044	0.000	-0.011	-0.159	0.025	-0.160	-0.015	0.002	-0.011
16.C	0.069	0.011	-0.054	0.281	0.033	-0.121	-0.072	-0.006	0.015
17.H	0.489	0.062	-0.192	0.357	0.046	-0.131	0.548	0.061	-0.188
18.H	-0.343	0.041	-0.284	0.152	-0.022	0.120	0.216	-0.032	0.203
19.H	-0.008	-0.003	0.001	0.053	0.064	-0.263	-0.095	-0.075	0.361
20.H	-0.406	-0.019	0.073	-0.284	-0.040	0.030	-0.318	-0.021	0.076
21.H	0.358	-0.061	0.444	-0.255	0.069	-0.306	-0.360	0.044	-0.406

	1413.863			1439.661			1466.755		
1.C	-0.004	0.003	0.051	0.001	0.000	0.004	0.027	-0.007	-0.112
2.C	0.022	0.003	0.072	0.001	0.000	0.001	0.025	0.003	0.090
3.H	-0.186	0.310	-0.409	-0.008	0.013	-0.017	-0.141	0.259	-0.311
4.H	-0.227	-0.324	-0.379	-0.010	-0.013	-0.016	-0.174	-0.270	-0.286
5.H	0.053	-0.269	-0.347	-0.003	-0.009	-0.011	-0.089	0.361	0.400
6.H	0.084	0.223	-0.374	-0.001	0.008	-0.012	-0.133	-0.304	0.435
7.O	0.003	0.000	-0.002	-0.002	0.000	0.002	-0.001	0.000	0.003
8.Re	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000
9.O	0.000	0.000	0.000	0.001	-0.001	0.001	0.000	0.001	0.000
10.O	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	-0.001	0.000
11.N	0.000	0.000	0.000	0.042	0.024	-0.123	-0.007	0.000	-0.003
12.C	0.004	0.000	0.003	-0.134	-0.007	0.009	0.005	-0.002	0.012
13.C	-0.002	0.000	-0.001	0.158	-0.001	0.039	0.012	0.002	-0.006
14.C	-0.001	-0.001	0.001	0.027	0.013	-0.068	-0.009	0.001	-0.004
15.C	0.003	0.001	-0.001	-0.161	0.006	-0.063	0.007	-0.002	0.013
16.C	-0.006	0.000	0.001	0.088	-0.012	0.085	0.010	0.002	-0.007
17.H	0.023	0.002	-0.009	-0.268	-0.056	0.222	-0.057	-0.006	0.014
18.H	0.002	-0.001	-0.003	0.248	-0.054	0.337	-0.036	0.003	-0.025
19.H	-0.001	0.002	0.000	-0.126	-0.100	0.511	-0.013	0.000	0.000
20.H	0.000	0.003	-0.002	-0.324	-0.049	0.166	-0.046	-0.004	0.006
21.H	-0.012	-0.003	-0.016	0.165	-0.041	0.365	-0.034	0.005	-0.030

	1473.673			1565.806			1594.157		
1.C	-0.002	0.001	0.020	-0.002	-0.001	0.000	0.000	0.000	-0.001
2.C	-0.003	-0.001	-0.015	-0.001	0.000	0.003	-0.001	0.001	0.003
3.H	0.022	-0.039	0.044	-0.003	0.009	-0.011	0.006	0.001	-0.005
4.H	0.028	0.040	0.040	-0.006	-0.011	-0.013	0.003	-0.001	-0.003
5.H	0.011	-0.059	-0.065	0.000	-0.014	-0.021	0.000	0.001	-0.001
6.H	0.016	0.050	-0.069	0.002	0.010	-0.019	-0.002	0.000	-0.001
7.O	0.001	0.000	-0.002	0.002	0.000	-0.002	0.001	0.000	0.001
8.Re	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	-0.001	0.000	0.000
9.O	0.000	-0.001	0.002	-0.002	0.000	0.000	0.001	0.000	0.001
10.O	0.001	0.000	0.000	-0.001	0.000	-0.001	0.002	0.000	0.001
11.N	-0.072	0.003	-0.035	-0.059	-0.039	0.201	-0.112	0.005	-0.046
12.C	0.044	-0.019	0.116	-0.033	0.032	-0.181	0.245	-0.018	0.151
13.C	0.118	0.016	-0.066	-0.152	-0.038	0.189	-0.275	-0.007	-0.016
14.C	-0.087	0.004	-0.034	0.119	0.075	-0.386	0.135	-0.005	0.052
15.C	0.056	-0.020	0.118	0.009	-0.041	0.221	-0.252	0.018	-0.144
16.C	0.100	0.016	-0.066	0.143	0.031	-0.140	0.273	0.008	0.009
17.H	-0.519	-0.049	0.128	-0.305	-0.019	0.004	-0.353	-0.060	0.234
18.H	-0.338	0.031	-0.231	-0.227	-0.017	0.038	0.201	-0.047	0.289
19.H	-0.119	-0.006	0.004	-0.123	-0.114	0.536	0.162	-0.001	0.036
20.H	-0.448	-0.026	0.055	0.214	-0.016	0.131	0.296	0.049	-0.158
21.H	-0.350	0.037	-0.310	0.238	-0.020	0.123	-0.209	0.045	-0.386

	3022.694			3066.087			3106.444		
1.C	-0.001	0.000	0.001	-0.016	0.004	0.063	0.000	0.000	0.000
2.C	-0.036	-0.003	-0.053	-0.001	0.000	-0.006	0.000	0.000	0.000
3.H	0.259	0.614	0.278	0.007	0.017	0.007	0.001	0.002	0.001
4.H	0.169	-0.582	0.325	0.005	-0.019	0.010	0.000	0.001	-0.001
5.H	-0.005	-0.020	0.015	0.128	0.580	-0.379	0.001	0.006	-0.004

6.H	-0.002	0.019	0.011	0.051	-0.629	-0.317	0.000	-0.006	-0.003
7.O	0.001	0.000	0.000	0.001	0.000	-0.001	0.000	0.000	0.001
8.Re	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000
9.O	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000
10.O	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000
11.N	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.001
12.C	0.000	0.000	0.000	0.001	0.000	-0.001	-0.064	-0.011	0.054
13.C	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.003	-0.016
14.C	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.002	0.000	0.000
15.C	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	-0.002	0.000	0.002
16.C	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.002	0.000	0.002
17.H	0.000	0.000	-0.001	0.000	0.000	0.000	-0.015	0.008	-0.043
18.H	0.002	0.000	-0.002	0.002	0.000	-0.002	0.015	0.003	-0.016
19.H	0.004	0.000	0.001	-0.001	0.000	0.000	-0.027	0.000	-0.007
20.H	0.000	0.000	0.000	0.001	0.000	0.003	0.044	-0.034	0.196
21.H	0.000	0.000	0.000	-0.008	-0.002	0.007	0.723	0.133	-0.638

	3116.462			3128.014			3136.445		
1.C	0.001	0.015	-0.001	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000
2.C	-0.005	-0.097	0.006	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000
3.H	0.255	0.569	0.268	0.000	-0.001	0.000	0.001	0.003	0.002
4.H	-0.189	0.597	-0.344	0.000	0.002	-0.001	0.000	0.000	0.000
5.H	-0.014	-0.082	0.053	0.000	0.001	-0.001	0.000	-0.001	0.001
6.H	0.004	-0.091	-0.045	0.000	-0.003	-0.002	0.000	0.000	0.000
7.O	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000
8.Re	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000
9.O	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000
10.O	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000
11.N	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000
12.C	0.000	0.000	0.000	-0.006	-0.001	0.004	0.006	0.001	-0.006
13.C	0.000	0.000	0.000	0.008	-0.003	0.021	-0.007	0.003	-0.020
14.C	0.000	0.000	0.000	-0.065	0.001	-0.016	0.038	-0.001	0.012
15.C	0.000	0.000	0.000	0.031	0.007	-0.030	0.029	0.008	-0.035
16.C	0.000	0.000	0.000	0.006	-0.003	0.018	0.018	-0.010	0.054
17.H	0.001	-0.001	0.004	-0.072	0.039	-0.213	-0.214	0.113	-0.624
18.H	0.001	0.000	-0.001	-0.350	-0.082	0.364	-0.354	-0.085	0.376
19.H	0.003	0.000	0.001	0.750	-0.009	0.198	-0.430	0.006	-0.116
20.H	0.001	0.000	0.005	-0.064	0.043	-0.255	0.061	-0.042	0.245
21.H	-0.002	-0.001	0.002	0.059	0.011	-0.051	-0.063	-0.011	0.055

	3145.906			3152.280			3185.503		
1.C	0.000	-0.001	0.000	0.000	-0.001	0.000	0.006	0.100	-0.005
2.C	0.000	0.001	0.000	0.000	0.000	0.000	0.001	0.014	-0.001
3.H	-0.001	-0.003	-0.001	-0.001	-0.003	-0.001	-0.037	-0.084	-0.042
4.H	0.001	-0.004	0.002	0.000	0.002	-0.001	0.026	-0.085	0.051
5.H	0.000	0.002	-0.001	0.001	0.003	-0.002	-0.124	-0.569	0.382
6.H	0.000	0.005	0.003	-0.001	0.007	0.004	0.048	-0.615	-0.320
7.O	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000
8.Re	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000
9.O	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000
10.O	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000
11.N	0.000	0.000	0.001	0.001	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000
12.C	0.011	0.001	-0.006	0.010	0.002	-0.007	0.000	0.000	0.000
13.C	-0.016	0.011	-0.067	-0.008	0.007	-0.040	0.000	0.000	-0.001
14.C	-0.018	0.000	0.000	-0.035	0.001	-0.010	0.000	0.000	0.000
15.C	0.023	0.005	-0.020	-0.037	-0.008	0.037	0.000	0.000	0.000
16.C	-0.015	0.007	-0.038	0.018	-0.008	0.044	0.000	0.000	0.000
17.H	0.149	-0.077	0.429	-0.172	0.088	-0.492	-0.001	0.000	-0.002
18.H	-0.238	-0.056	0.246	0.395	0.093	-0.413	0.003	0.001	-0.003
19.H	0.182	-0.002	0.044	0.381	-0.005	0.102	0.004	0.000	0.001
20.H	0.181	-0.128	0.748	0.105	-0.074	0.437	0.002	-0.002	0.007
21.H	-0.095	-0.017	0.081	-0.090	-0.017	0.078	-0.001	0.000	0.000

List of All Frequencies:

Intensities
==========

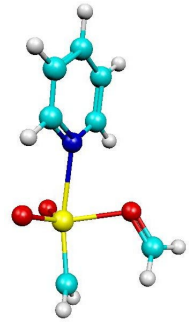
Frequency cm-1	Dipole Strength 1e-40 esu2 cm2	Absorption Intensity (degeneracy not counted) km/mole
-329.846028	181.147569	-14.976897
-64.946130	33.659809	-0.547953
61.395211	296.468452	4.562376
68.960862	230.301119	3.980859
110.987190	93.358675	2.597201
141.538233	270.668034	9.602599
165.769328	428.006026	17.784110
210.484198	619.280158	32.672678
236.476286	155.579619	9.221857
252.304551	30.684879	1.940562
269.647074	3.386219	0.228870
315.074436	5.456611	0.430937
340.192383	58.229468	4.965300

376.475605	0.838913	0.079165
422.765250	41.730724	4.422148
531.044139	527.928238	70.272205
631.762336	75.208646	11.909666
649.227478	5.525273	0.899143
682.725120	297.642365	50.935280
709.257771	3.481224	0.618891
745.435414	263.728133	49.277033
794.994357	435.274928	86.737274
847.144722	9.194410	1.952358
852.161021	1.046031	0.223431
904.132072	3.079243	0.697837
921.951404	4.280242	0.989132
950.190995	100.627161	23.966477
951.676867	234.030448	55.826442
960.527486	324.837530	78.208520
976.772598	1.030304	0.252253
984.780347	173.882739	42.921404
1013.154927	157.359651	39.962009
1029.245621	15.472963	3.991817
1065.583595	100.604061	26.870832
1084.435114	17.957838	4.881302
1115.771394	21.912971	6.128505
1131.853537	25.855638	7.335396
1165.497212	5.896129	1.722488
1194.265675	1.732459	0.518611
1209.649790	36.649332	11.112296
1304.658178	2.231622	0.729786
1342.054659	13.274493	4.465460
1413.863023	74.487656	26.397920
1439.661246	125.033190	45.119439
1466.755223	10.312944	3.791564
1473.673178	9.999071	3.693507
1565.806395	3.327856	1.306113
1594.157407	33.357224	13.329049
3022.694255	42.882689	32.490344
3066.086817	20.153351	15.488515
3106.443853	2.918878	2.272781
3116.462278	19.239706	15.029287
3128.013763	0.028019	0.021968
3136.444565	16.810477	13.215869
3145.906199	19.149960	15.100513
3152.279565	4.724900	3.733321
3185.502940	29.012262	23.165286

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

997.7924	4189.1946	4673.9329
0.9861	-0.1660	-0.0043
-0.0088	-0.0779	0.9969
0.1658	0.9830	0.0783

TS(IIa-IVb)



CCSD=-629.6498745

ATOMS cartesian

C	1.225749	-1.840128	-3.290606
N	0.578858	-0.680863	-3.058435
C	0.388093	0.173041	-4.081893
C	0.849242	-0.098575	-5.363891
C	1.529730	-1.290576	-5.601224
C	1.712632	-2.179038	-4.544512
Re	-0.299446	-0.197595	-0.879072
O	-1.083517	-1.713575	-0.930923
C	-0.644056	0.294850	0.949953
O	1.774634	-0.346074	-0.632174
C	2.123521	-0.194397	0.575115
H	2.777222	-0.957339	1.026468
O	-1.032007	1.108383	-1.711117
H	1.876033	0.716906	1.132760
H	-0.667296	1.336800	1.299149
H	-0.806618	-0.445567	1.745400
H	-0.157438	1.088253	-3.852081
H	0.668338	0.620889	-6.162482
H	1.899651	-1.527364	-6.599598
H	2.221787	-3.131511	-4.687635
H	1.342698	-2.515919	-2.444134

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)

	-307.144			-81.894			42.543		
1.C	-0.005	-0.001	0.002	-0.181	-0.078	-0.023	0.086	0.007	-0.065
2.N	-0.013	-0.005	0.000	0.003	0.023	-0.006	0.138	0.026	-0.009
3.C	-0.007	-0.002	0.002	0.183	0.099	0.023	0.045	0.004	-0.012
4.C	-0.002	0.001	0.003	0.199	0.081	0.030	-0.129	-0.045	-0.065
5.C	0.000	0.002	0.003	0.002	-0.032	-0.003	-0.204	-0.076	-0.132
6.C	-0.001	0.002	0.003	-0.207	-0.128	-0.027	-0.081	-0.041	-0.122
7.Re	0.018	-0.003	0.006	-0.003	-0.011	0.005	0.022	0.000	0.008
8.O	-0.010	0.017	-0.020	0.079	-0.054	-0.035	0.047	-0.009	-0.118
9.C	0.044	-0.013	0.041	-0.012	-0.074	0.020	-0.194	-0.054	-0.020
10.O	-0.012	0.024	-0.100	0.010	0.135	-0.034	0.001	0.067	0.194
11.C	-0.225	0.023	0.003	0.026	0.182	-0.044	-0.115	0.076	0.226
12.H	-0.734	-0.243	0.290	0.095	0.240	-0.046	-0.110	0.111	0.278
13.O	-0.005	-0.020	0.004	-0.060	-0.024	0.037	0.103	0.027	-0.020
14.H	0.253	0.316	-0.265	-0.022	0.177	-0.057	-0.220	0.056	0.213
15.H	0.102	-0.018	0.058	-0.073	-0.080	0.037	-0.271	-0.061	-0.003
16.H	0.014	-0.018	0.029	0.047	-0.095	0.012	-0.277	-0.075	-0.056
17.H	-0.007	-0.002	-0.001	0.317	0.176	0.038	0.102	0.028	0.025
18.H	0.003	0.006	0.007	0.368	0.163	0.065	-0.217	-0.066	-0.063
19.H	0.001	0.004	0.003	0.004	-0.043	0.000	-0.350	-0.116	-0.176
20.H	0.003	0.004	0.004	-0.366	-0.208	-0.051	-0.115	-0.054	-0.154
21.H	-0.001	0.001	0.003	-0.323	-0.125	-0.042	0.182	0.026	-0.063

	92.874			106.259			129.887		
1.C	0.041	-0.022	-0.118	-0.090	0.004	0.048	-0.002	-0.112	-0.203
2.N	0.083	-0.015	-0.032	-0.059	0.024	0.026	-0.057	-0.148	-0.167
3.C	0.107	0.043	0.010	-0.034	0.024	0.022	-0.015	-0.126	-0.158
4.C	0.066	0.096	-0.019	-0.017	0.006	0.034	0.093	-0.044	-0.145
5.C	-0.021	0.064	-0.121	-0.023	-0.002	0.066	0.171	0.004	-0.166
6.C	-0.031	0.010	-0.159	-0.065	-0.006	0.064	0.114	-0.036	-0.188
7.Re	-0.010	-0.007	0.017	0.025	0.024	-0.024	-0.014	0.024	0.071
8.O	0.016	-0.025	0.247	0.236	-0.091	0.061	0.012	0.013	0.035
9.C	0.051	0.285	-0.057	-0.088	0.030	-0.039	-0.101	-0.021	0.060
10.O	-0.022	-0.163	0.072	0.011	0.116	0.008	-0.028	0.191	-0.080
11.C	-0.030	0.010	0.053	-0.083	-0.300	0.089	-0.014	-0.121	-0.043
12.H	-0.132	0.013	0.205	-0.145	-0.475	-0.116	0.003	-0.230	-0.252

13.O	-0.094	-0.159	-0.148	-0.141	-0.085	-0.056	0.041	0.035	0.046
14.H	0.072	0.142	-0.117	-0.128	-0.491	0.381	-0.039	-0.276	0.202
15.H	0.039	0.350	-0.251	-0.153	0.036	-0.057	-0.127	-0.026	0.075
16.H	0.083	0.424	0.079	-0.064	0.039	-0.025	-0.203	-0.038	0.022
17.H	0.147	0.054	0.062	-0.027	0.031	0.011	-0.054	-0.146	-0.168
18.H	0.081	0.156	0.033	0.007	-0.005	0.019	0.132	0.012	-0.106
19.H	-0.074	0.090	-0.146	-0.003	-0.008	0.075	0.276	0.084	-0.146
20.H	-0.084	-0.008	-0.218	-0.089	-0.021	0.075	0.163	-0.012	-0.184
21.H	0.054	-0.072	-0.158	-0.136	0.007	0.057	-0.033	-0.157	-0.233

	145.812			184.597			201.631		
1.C	-0.163	-0.110	-0.026	-0.151	0.020	-0.037	0.041	0.004	0.028
2.N	-0.198	-0.146	0.031	-0.158	0.029	-0.109	0.048	0.003	0.041
3.C	-0.162	-0.059	0.099	-0.116	-0.017	-0.162	0.031	0.009	0.056
4.C	-0.031	0.097	0.118	0.025	-0.041	-0.112	-0.019	0.007	0.041
5.C	0.069	0.163	0.068	0.124	-0.007	-0.005	-0.040	0.001	0.022
6.C	-0.028	0.042	-0.012	-0.001	0.006	0.026	0.003	0.002	0.015
7.Re	0.037	-0.028	-0.020	0.014	0.026	0.003	0.002	0.014	0.028
8.O	-0.056	0.012	0.052	0.154	-0.047	-0.032	0.123	-0.049	-0.061
9.C	-0.153	0.116	-0.084	-0.026	-0.092	0.021	-0.315	0.030	-0.035
10.O	0.028	0.073	0.050	0.012	-0.280	0.155	-0.037	-0.157	-0.161
11.C	-0.031	0.123	0.060	0.004	0.100	0.105	0.079	-0.007	-0.214
12.H	0.020	0.188	0.096	-0.063	0.202	0.375	-0.067	-0.070	-0.109
13.O	0.202	0.036	-0.077	-0.083	0.005	0.059	0.057	-0.001	-0.047
14.H	-0.160	0.099	0.042	0.079	0.312	-0.209	0.328	0.166	-0.385
15.H	-0.162	0.139	-0.154	-0.226	-0.112	0.063	-0.522	0.036	-0.068
16.H	-0.283	0.183	-0.047	0.090	-0.153	-0.011	-0.376	0.037	-0.041
17.H	-0.217	-0.106	0.149	-0.160	-0.023	-0.238	0.044	0.012	0.075
18.H	0.007	0.172	0.177	0.090	-0.053	-0.141	-0.042	0.005	0.044
19.H	0.197	0.296	0.084	0.280	0.005	0.050	-0.088	-0.007	0.006
20.H	0.004	0.069	-0.074	0.028	0.010	0.105	-0.003	0.003	-0.007
21.H	-0.250	-0.211	-0.094	-0.236	0.035	-0.014	0.057	0.003	0.025

	224.250			285.604			290.754		
1.C	0.077	-0.209	-0.052	-0.049	-0.003	-0.002	0.035	0.012	-0.003
2.N	0.061	-0.235	0.096	-0.019	0.010	-0.009	0.015	0.006	0.001
3.C	0.002	-0.139	0.198	-0.059	-0.017	-0.021	0.039	0.013	-0.005
4.C	-0.041	0.036	0.155	-0.004	0.000	-0.006	0.025	-0.001	-0.006
5.C	-0.012	0.088	-0.010	0.042	0.021	0.020	-0.022	-0.025	-0.017
6.C	0.037	-0.044	-0.120	-0.036	-0.013	0.006	0.007	-0.003	-0.010
7.Re	-0.012	0.052	-0.021	0.042	-0.001	0.035	0.036	0.007	-0.035
8.O	0.082	0.010	-0.075	-0.292	0.212	-0.371	-0.209	0.122	0.367
9.C	0.087	-0.147	0.047	-0.109	0.101	-0.024	-0.236	-0.212	-0.016
10.O	0.005	-0.074	0.036	0.167	0.053	0.043	0.101	-0.021	-0.035
11.C	0.020	0.015	0.017	0.187	-0.034	0.048	-0.007	0.012	-0.009
12.H	0.002	0.032	0.072	-0.014	-0.192	0.076	-0.040	0.036	0.079
13.O	-0.141	-0.004	0.007	-0.318	-0.310	-0.093	-0.159	0.004	0.126
14.H	0.062	0.069	-0.052	0.402	0.035	0.038	-0.074	0.021	-0.052
15.H	0.070	-0.205	0.218	-0.174	0.134	-0.122	-0.390	-0.296	0.212
16.H	0.196	-0.282	-0.056	-0.273	0.185	0.020	-0.336	-0.405	-0.217
17.H	-0.025	-0.185	0.309	-0.105	-0.040	-0.041	0.055	0.023	-0.007
18.H	-0.119	0.105	0.240	0.016	0.006	-0.006	0.041	0.007	-0.003
19.H	-0.041	0.222	-0.053	0.111	0.049	0.039	-0.066	-0.047	-0.029
20.H	0.048	-0.018	-0.263	-0.059	-0.025	0.008	0.000	-0.009	-0.004
21.H	0.109	-0.303	-0.131	-0.062	-0.004	-0.001	0.068	0.025	0.003

	314.018			372.555			414.039		
1.C	0.049	-0.028	-0.008	-0.154	-0.078	-0.042	0.056	0.036	0.016
2.N	0.016	-0.039	0.011	-0.032	-0.019	-0.007	-0.137	-0.064	-0.029
3.C	0.007	-0.033	0.020	0.182	0.089	0.045	0.009	0.008	-0.002
4.C	0.017	-0.007	0.016	-0.135	-0.072	-0.035	0.102	0.052	0.021
5.C	0.001	-0.011	-0.022	-0.030	-0.014	-0.010	-0.110	-0.059	-0.032
6.C	0.018	-0.025	-0.027	0.180	0.097	0.043	0.044	0.031	0.012
7.Re	0.002	-0.020	-0.020	-0.002	-0.001	0.000	-0.030	-0.001	-0.007
8.O	0.028	-0.041	-0.075	-0.006	-0.001	-0.003	0.030	-0.035	0.020
9.C	-0.050	0.239	-0.110	0.001	0.008	-0.004	-0.008	-0.017	0.004
10.O	0.068	-0.003	-0.007	0.018	0.007	0.006	0.175	0.053	0.046
11.C	-0.017	-0.011	0.013	0.016	0.006	0.006	0.148	-0.021	0.061
12.H	-0.123	-0.056	0.095	-0.030	-0.024	0.024	-0.307	-0.319	0.227
13.O	-0.139	0.177	0.409	-0.011	-0.004	0.007	0.055	0.030	-0.034
14.H	0.005	0.019	-0.022	0.060	0.027	-0.008	0.607	0.193	-0.067
15.H	-0.109	0.363	-0.473	-0.014	0.012	-0.017	-0.001	-0.026	0.031
16.H	0.014	0.503	0.144	0.017	0.016	0.008	0.041	-0.036	-0.003
17.H	-0.007	-0.042	0.031	0.454	0.234	0.109	0.015	0.013	-0.010
18.H	0.024	0.024	0.040	-0.302	-0.162	-0.077	0.207	0.097	0.041
19.H	-0.019	0.004	-0.033	-0.082	-0.048	-0.021	-0.266	-0.148	-0.068
20.H	0.023	-0.019	-0.044	0.361	0.187	0.087	0.113	0.065	0.037
21.H	0.081	-0.031	-0.016	-0.446	-0.231	-0.122	0.161	0.088	0.042

	420.515			492.914			575.814		
1.C	-0.060	-0.033	-0.018	-0.004	0.003	-0.001	0.002	0.000	0.002
2.N	0.196	0.099	0.047	0.011	0.009	0.008	0.002	-0.001	0.005
3.C	-0.030	-0.020	-0.011	0.004	-0.001	0.002	0.000	-0.006	0.001
4.C	-0.125	-0.064	-0.036	-0.008	-0.006	-0.002	0.001	0.002	0.001

5.C	0.160	0.085	0.036	0.008	0.003	0.000	-0.001	0.002	-0.001
6.C	-0.089	-0.047	-0.027	-0.005	0.001	0.000	-0.002	0.003	0.000
7.Re	-0.025	-0.004	-0.007	-0.022	0.006	0.014	0.001	0.003	0.001
8.O	0.010	-0.029	0.056	0.027	-0.009	-0.027	-0.034	-0.003	-0.001
9.C	-0.012	-0.011	-0.009	0.005	0.005	0.007	0.004	-0.022	0.001
10.O	0.113	0.050	0.022	0.333	-0.071	-0.123	0.006	0.009	-0.007
11.C	0.104	-0.018	0.029	-0.125	-0.001	0.000	-0.013	-0.009	-0.003
12.H	-0.266	-0.268	0.151	0.122	0.313	0.177	-0.031	-0.024	0.002
13.O	0.046	0.039	-0.005	0.024	-0.009	-0.041	0.028	-0.017	-0.005
14.H	0.494	0.157	-0.069	-0.802	-0.212	0.028	-0.055	-0.029	0.014
15.H	0.016	-0.017	0.004	0.099	0.010	0.006	-0.644	0.028	-0.190
16.H	0.037	-0.028	-0.015	-0.050	0.025	0.015	0.712	0.013	0.180
17.H	-0.074	-0.044	-0.021	0.007	0.002	-0.005	-0.003	-0.006	-0.008
18.H	-0.273	-0.133	-0.066	-0.013	-0.005	0.000	-0.005	0.002	0.003
19.H	0.385	0.204	0.091	0.019	0.008	0.002	-0.005	-0.001	-0.002
20.H	-0.210	-0.108	-0.060	-0.012	-0.003	0.002	-0.005	0.002	-0.003
21.H	-0.168	-0.084	-0.045	0.000	-0.001	-0.005	0.001	-0.003	0.000

	622.093			648.027			654.427		
1.C	-0.092	0.185	-0.023	0.008	-0.142	0.276	-0.004	0.000	0.008
2.N	-0.115	0.080	0.331	0.050	-0.121	0.038	0.002	-0.001	0.008
3.C	0.053	-0.170	0.110	0.154	-0.236	-0.131	0.007	-0.014	-0.003
4.C	0.084	-0.222	0.071	0.002	0.156	-0.305	0.007	0.001	-0.010
5.C	0.133	-0.090	-0.341	-0.057	0.131	-0.043	0.001	0.001	-0.009
6.C	-0.095	0.225	-0.085	-0.171	0.252	0.142	-0.006	0.019	0.004
7.Re	0.004	-0.001	-0.007	0.001	0.001	-0.001	0.000	-0.005	0.002
8.O	0.002	-0.003	-0.010	0.001	0.000	0.002	-0.005	-0.017	-0.016
9.C	-0.022	-0.011	0.040	-0.008	-0.023	0.014	0.015	0.143	-0.038
10.O	-0.013	-0.001	-0.004	-0.003	-0.001	-0.001	0.003	0.003	-0.003
11.C	0.006	-0.003	-0.008	0.000	0.000	0.000	-0.005	-0.002	0.000
12.H	0.028	0.006	-0.027	0.012	0.009	-0.004	-0.008	-0.005	0.002
13.O	-0.005	0.001	-0.012	-0.003	-0.001	0.005	0.003	-0.003	0.022
14.H	0.009	-0.007	0.000	0.001	0.000	0.001	-0.023	-0.010	0.003
15.H	0.102	0.010	0.001	0.067	0.021	-0.103	-0.215	-0.105	0.654
16.H	0.012	0.069	0.122	-0.068	0.083	0.098	0.166	-0.428	-0.526
17.H	0.106	-0.066	-0.194	0.151	-0.267	-0.023	-0.008	-0.020	-0.009
18.H	-0.019	0.051	0.334	-0.111	0.244	-0.200	-0.013	0.000	-0.006
19.H	0.176	-0.078	-0.329	0.104	-0.240	0.105	-0.011	-0.025	-0.008
20.H	-0.155	0.139	0.271	-0.142	0.302	-0.066	-0.031	0.006	0.003
21.H	0.088	-0.001	-0.200	0.059	-0.210	0.219	-0.013	-0.013	-0.001

	686.166			721.065			742.626		
1.C	0.063	0.027	0.022	0.013	-0.016	0.000	0.116	0.066	0.021
2.N	-0.094	-0.049	-0.024	0.010	-0.001	-0.018	-0.125	-0.060	-0.028
3.C	0.072	0.044	0.020	-0.003	0.019	-0.009	0.103	0.050	0.021
4.C	-0.114	-0.051	-0.029	0.000	0.011	-0.007	-0.030	-0.028	-0.008
5.C	0.040	0.022	0.006	0.005	0.006	0.010	0.113	0.055	0.034
6.C	-0.105	-0.064	-0.025	0.016	-0.017	-0.003	-0.030	-0.005	-0.012
7.Re	0.000	0.000	-0.001	0.003	-0.009	-0.035	0.000	0.001	0.002
8.O	0.001	0.001	-0.003	0.004	0.003	-0.003	0.000	-0.001	-0.003
9.C	-0.001	0.011	0.012	-0.119	0.137	0.465	0.006	-0.007	-0.013
10.O	-0.001	-0.001	0.001	0.008	-0.010	-0.003	-0.001	-0.001	0.002
11.C	0.002	-0.002	0.003	0.020	-0.001	0.017	0.000	0.001	0.001
12.H	0.007	0.001	0.000	0.101	0.046	-0.023	0.000	0.001	0.001
13.O	0.000	-0.001	-0.001	0.000	0.000	0.006	-0.001	0.000	0.000
14.H	0.001	-0.003	0.003	-0.019	-0.020	0.021	-0.002	0.000	0.002
15.H	-0.029	-0.001	0.046	-0.011	0.117	0.582	-0.006	-0.002	-0.030
16.H	0.014	-0.015	-0.008	0.069	0.184	0.568	-0.017	0.003	-0.009
17.H	0.420	0.230	0.107	-0.049	-0.009	-0.003	-0.079	-0.045	-0.035
18.H	0.169	0.102	0.044	-0.054	-0.031	-0.034	-0.476	-0.262	-0.119
19.H	0.470	0.246	0.112	-0.055	-0.018	-0.007	-0.304	-0.157	-0.070
20.H	0.246	0.113	0.056	-0.046	-0.046	-0.035	-0.598	-0.290	-0.146
21.H	0.464	0.232	0.129	-0.051	-0.027	0.000	-0.130	-0.066	-0.050

	857.093			877.092			924.363		
1.C	0.072	0.032	0.017	0.015	-0.002	0.004	-0.106	-0.050	-0.032
2.N	0.006	-0.001	-0.006	-0.007	-0.002	0.006	0.020	0.005	-0.001
3.C	-0.060	-0.031	-0.013	-0.015	0.005	-0.008	-0.058	-0.034	-0.014
4.C	-0.068	-0.034	-0.015	-0.008	0.005	-0.015	0.000	0.001	0.003
5.C	-0.014	-0.009	0.001	-0.002	-0.001	0.001	0.057	0.031	0.021
6.C	0.054	0.034	0.016	0.014	-0.006	-0.001	0.057	0.033	0.017
7.Re	-0.001	0.000	-0.001	0.004	0.000	0.004	0.000	0.000	0.000
8.O	-0.001	-0.004	0.000	-0.005	0.001	-0.002	0.003	0.005	0.000
9.C	0.021	-0.001	0.009	-0.155	-0.002	-0.060	0.000	0.001	0.001
10.O	0.001	0.000	0.000	-0.004	-0.002	0.004	-0.001	0.000	0.000
11.C	0.002	0.000	0.001	-0.001	0.000	-0.008	0.001	0.001	0.000
12.H	-0.006	-0.005	0.002	-0.001	0.007	0.003	-0.001	0.000	0.002
13.O	0.001	0.000	0.000	-0.007	0.001	-0.004	0.001	-0.001	0.002
14.H	-0.001	0.000	0.001	-0.007	0.003	-0.013	-0.002	-0.001	0.002
15.H	-0.091	0.004	-0.012	0.702	-0.038	0.112	-0.003	0.003	-0.005
16.H	-0.086	0.004	-0.010	0.659	-0.034	0.080	0.000	0.002	0.002
17.H	0.350	0.187	0.090	0.064	0.046	0.017	0.402	0.209	0.099
18.H	0.528	0.283	0.136	0.067	0.023	-0.016	-0.017	-0.007	0.000
19.H	0.056	0.030	0.018	0.014	0.000	0.006	-0.348	-0.185	-0.078
20.H	-0.410	-0.196	-0.105	-0.054	-0.039	-0.028	-0.318	-0.154	-0.073
21.H	-0.388	-0.192	-0.097	-0.053	-0.033	-0.011	0.598	0.293	0.142

	949.023			956.260			970.109		
1.C	0.031	0.031	-0.012	0.064	0.030	0.021	-0.005	0.017	-0.037
2.N	0.003	-0.001	-0.002	-0.001	0.012	0.011	0.000	-0.014	-0.022
3.C	-0.049	-0.053	-0.024	-0.110	-0.061	-0.030	-0.006	-0.029	-0.009
4.C	0.053	0.007	0.039	0.078	0.038	0.016	0.083	0.011	0.040
5.C	-0.007	0.014	0.032	0.029	0.021	0.002	-0.122	-0.050	0.017
6.C	-0.042	-0.004	-0.019	-0.065	-0.046	-0.021	0.038	0.069	0.013
7.Re	-0.007	0.070	-0.026	0.001	-0.005	0.002	0.000	-0.002	0.000
8.O	-0.164	-0.338	-0.004	0.011	0.023	0.000	0.008	0.014	0.000
9.C	-0.012	-0.013	-0.001	0.005	0.002	0.002	0.000	0.001	0.003
10.O	-0.001	-0.005	0.002	0.001	0.000	-0.001	0.000	0.000	0.000
11.C	-0.005	0.003	0.001	-0.002	-0.002	0.001	0.000	0.003	0.000
12.H	0.035	0.019	-0.031	0.005	0.002	-0.002	-0.003	-0.001	0.000
13.O	0.257	-0.472	0.301	-0.023	0.039	-0.026	-0.004	0.006	-0.002
14.H	0.043	0.011	0.005	0.002	0.001	-0.002	-0.003	-0.001	0.004
15.H	0.298	0.003	-0.027	-0.042	0.000	0.003	-0.007	0.003	-0.005
16.H	-0.244	0.049	0.005	-0.002	-0.005	-0.006	0.003	0.000	0.003
17.H	0.360	0.188	-0.042	0.597	0.323	0.116	0.170	0.065	0.020
18.H	-0.222	-0.163	-0.047	-0.376	-0.193	-0.091	-0.356	-0.287	-0.121
19.H	-0.049	0.025	0.018	-0.173	-0.065	-0.053	0.626	0.293	0.218
20.H	0.156	0.098	0.013	0.339	0.155	0.070	-0.376	-0.133	-0.095
21.H	-0.130	-0.034	-0.043	-0.298	-0.145	-0.067	0.101	0.027	-0.046

	981.390			987.920			1025.993		
1.C	-0.003	0.108	-0.156	0.008	-0.073	0.149	-0.001	-0.082	0.190
2.N	0.085	-0.066	-0.177	-0.056	0.042	0.107	0.100	-0.058	-0.304
3.C	0.071	-0.108	-0.018	-0.068	0.092	0.031	-0.088	0.121	0.065
4.C	0.011	-0.172	0.144	-0.017	0.128	-0.093	0.012	-0.073	0.173
5.C	-0.006	0.043	0.208	0.028	-0.038	-0.199	0.082	-0.051	-0.255
6.C	-0.183	0.209	0.004	0.122	-0.157	0.010	-0.070	0.117	0.077
7.Re	-0.015	-0.011	-0.006	-0.035	-0.018	-0.017	0.002	0.003	0.002
8.O	0.120	0.217	0.013	0.255	0.469	0.028	-0.020	-0.032	0.002
9.C	-0.024	0.004	-0.002	0.004	0.000	-0.033	-0.011	-0.004	-0.005
10.O	-0.005	0.002	0.006	-0.007	0.001	0.001	0.003	0.000	-0.003
11.C	0.007	0.010	-0.004	-0.011	-0.012	0.003	-0.001	-0.006	0.005
12.H	-0.025	-0.015	0.004	0.065	0.028	-0.038	0.015	0.012	0.013
13.O	0.056	-0.088	0.072	0.172	-0.266	0.181	-0.006	0.010	-0.006
14.H	-0.019	-0.009	0.016	0.074	0.014	0.000	0.010	0.006	-0.008
15.H	0.078	0.001	-0.003	-0.055	-0.010	-0.032	0.042	-0.001	-0.006
16.H	0.122	-0.019	0.003	0.030	-0.036	-0.076	0.043	-0.005	0.005
17.H	0.029	-0.141	-0.053	-0.029	0.115	0.083	-0.070	0.081	0.299
18.H	0.350	-0.151	0.118	-0.286	0.168	-0.023	-0.274	0.082	0.373
19.H	-0.298	-0.222	0.185	0.195	0.139	-0.199	0.101	0.038	-0.281
20.H	0.149	0.396	0.093	-0.079	-0.282	0.009	-0.130	0.061	0.251
21.H	-0.014	-0.044	-0.290	-0.109	0.015	0.249	-0.165	0.125	0.382

	1063.394			1071.815			1088.158		
1.C	0.044	-0.131	0.064	0.013	0.036	-0.100	0.002	-0.006	0.009
2.N	-0.013	0.002	0.068	0.035	-0.076	0.021	-0.002	0.003	0.003
3.C	-0.086	0.166	-0.004	-0.066	0.075	0.085	-0.003	0.005	-0.001
4.C	0.047	-0.093	-0.006	-0.018	0.088	-0.090	0.002	0.000	-0.001
5.C	0.011	-0.010	0.005	0.054	-0.091	-0.006	0.001	0.000	-0.006
6.C	-0.042	0.100	-0.056	-0.037	0.034	0.038	0.001	-0.003	-0.003
7.Re	0.000	0.000	0.000	0.000	0.002	-0.001	0.001	0.000	0.000
8.O	0.003	0.003	-0.001	-0.003	-0.007	-0.001	0.001	0.003	-0.001
9.C	0.006	-0.001	-0.002	0.003	-0.002	0.002	0.004	-0.002	0.007
10.O	0.001	0.000	-0.002	0.000	0.000	0.000	-0.033	-0.012	0.020
11.C	-0.005	0.001	0.001	0.002	0.003	-0.003	0.123	0.072	-0.072
12.H	0.016	0.007	-0.016	-0.018	-0.011	0.003	-0.598	-0.344	0.266
13.O	0.003	-0.004	0.002	0.002	-0.005	0.004	0.002	-0.006	0.003
14.H	0.018	0.004	0.004	-0.013	-0.008	0.008	-0.569	-0.262	0.172
15.H	-0.031	0.000	-0.010	-0.015	0.000	-0.006	0.027	-0.003	0.017
16.H	-0.026	0.003	-0.005	-0.010	0.003	0.005	-0.029	0.005	0.009
17.H	-0.084	0.199	-0.082	-0.073	-0.018	0.474	0.001	0.009	-0.006
18.H	0.347	-0.439	-0.382	0.014	0.003	-0.193	-0.011	-0.003	-0.002
19.H	0.021	-0.113	0.039	0.222	-0.532	0.155	-0.003	0.017	-0.012
20.H	0.034	0.206	-0.479	-0.061	-0.037	0.459	0.008	0.001	-0.011
21.H	0.167	-0.279	-0.059	0.101	-0.133	-0.253	-0.004	0.000	0.016

	1160.198			1187.076			1213.775		
1.C	-0.003	0.004	0.003	0.000	0.000	0.002	0.042	-0.074	-0.020
2.N	-0.007	0.015	-0.002	0.001	-0.001	-0.001	-0.001	-0.004	0.019
3.C	-0.001	0.007	-0.012	0.000	0.000	-0.002	-0.008	0.056	-0.078
4.C	-0.017	0.023	0.028	-0.002	0.002	0.002	-0.016	0.012	0.039
5.C	0.021	-0.057	0.026	0.001	-0.002	-0.001	-0.004	-0.002	0.011
6.C	0.006	0.007	-0.039	0.000	-0.001	-0.001	-0.015	0.012	0.037
7.Re	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000
8.O	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.001	0.001	-0.001
9.C	0.000	0.000	0.000	-0.003	0.001	0.001	0.000	0.000	-0.002
10.O	-0.001	0.001	0.000	0.039	-0.066	-0.007	-0.001	0.001	0.000
11.C	0.001	-0.001	0.000	-0.059	0.125	0.007	0.001	-0.002	-0.001
12.H	0.000	0.003	0.008	-0.118	-0.287	-0.625	0.002	0.004	0.006
13.O	0.000	0.000	-0.001	-0.001	0.003	-0.002	0.000	0.001	-0.001

14.H	-0.005	0.001	-0.008	0.268	-0.144	0.627	-0.001	0.000	-0.005
15.H	0.002	-0.001	0.002	0.006	0.005	-0.010	-0.001	-0.002	0.005
16.H	0.001	-0.001	-0.001	0.010	-0.012	-0.008	-0.002	0.001	-0.002
17.H	0.010	0.045	-0.136	0.000	0.003	-0.011	0.022	0.193	-0.540
18.H	-0.253	0.308	0.335	-0.006	0.014	0.014	-0.184	0.228	0.272
19.H	0.232	-0.552	0.222	0.001	-0.004	-0.001	-0.013	0.035	0.000
20.H	0.073	0.115	-0.514	0.000	-0.002	0.003	-0.067	-0.071	0.416
21.H	-0.048	0.066	0.058	-0.002	0.005	0.006	0.268	-0.385	-0.293

	1299.353			1342.280			1344.543		
1.C	0.170	-0.250	-0.177	0.023	-0.032	-0.031	0.008	-0.011	-0.012
2.N	-0.157	0.373	-0.148	0.015	-0.034	0.011	0.008	-0.014	0.002
3.C	-0.007	-0.129	0.305	-0.006	-0.013	0.057	-0.002	-0.004	0.016
4.C	0.109	-0.148	-0.137	-0.018	0.019	0.024	-0.006	0.006	0.010
5.C	-0.084	0.196	-0.070	-0.026	0.072	-0.033	-0.009	0.025	-0.010
6.C	-0.029	-0.052	0.227	0.006	0.001	-0.028	0.002	0.001	-0.011
7.Re	0.000	0.001	0.000	0.000	-0.001	0.000	0.000	0.000	0.001
8.O	-0.002	-0.002	0.002	0.000	0.001	0.000	0.001	0.003	0.001
9.C	-0.002	-0.003	-0.005	-0.007	0.010	0.035	0.021	-0.027	-0.101
10.O	0.001	-0.001	0.001	-0.005	-0.002	-0.014	0.008	0.003	0.022
11.C	0.000	0.003	0.003	0.007	0.002	0.012	-0.012	-0.002	-0.020
12.H	-0.009	-0.012	-0.012	0.006	0.018	0.044	-0.010	-0.031	-0.073
13.O	0.006	-0.007	0.000	-0.002	0.004	-0.002	0.000	0.000	0.001
14.H	0.005	-0.004	0.022	0.006	-0.011	0.032	-0.014	0.018	-0.054
15.H	0.006	-0.010	0.023	0.040	0.086	-0.212	-0.122	-0.245	0.600
16.H	0.009	0.015	0.014	0.018	-0.179	-0.144	-0.067	0.514	0.411
17.H	-0.024	-0.090	0.209	0.035	0.154	-0.518	0.013	0.051	-0.169
18.H	-0.090	0.126	0.164	0.150	-0.177	-0.185	0.049	-0.062	-0.062
19.H	0.146	-0.377	0.152	0.129	-0.321	0.118	0.043	-0.107	0.041
20.H	0.009	0.015	-0.089	-0.036	-0.070	0.276	-0.014	-0.023	0.096
21.H	0.180	-0.235	-0.189	-0.251	0.345	0.303	-0.089	0.129	0.111

	1389.827			1436.362			1477.147		
1.C	0.000	0.001	0.001	0.020	0.021	-0.121	0.064	-0.111	-0.042
2.N	0.000	0.003	0.001	0.049	-0.114	0.042	-0.026	0.016	0.075
3.C	0.001	0.000	-0.005	-0.058	0.068	0.095	-0.008	0.068	-0.110
4.C	0.000	0.000	-0.001	0.063	-0.047	-0.147	0.064	-0.100	-0.043
5.C	0.001	-0.005	0.006	0.019	-0.054	0.023	-0.033	0.021	0.081
6.C	0.000	0.001	-0.004	-0.049	0.021	0.154	-0.006	0.064	-0.113
7.Re	-0.001	0.001	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000
8.O	0.001	-0.001	0.002	0.000	0.000	0.000	0.001	0.001	-0.001
9.C	-0.001	-0.009	-0.039	0.001	0.000	0.000	0.001	0.001	0.000
10.O	-0.075	-0.031	-0.217	-0.001	0.000	-0.002	0.001	0.001	0.001
11.C	0.090	0.030	0.200	0.001	0.000	0.002	-0.001	0.000	-0.001
12.H	0.088	0.245	0.597	0.003	0.003	0.002	0.005	0.001	-0.008
13.O	0.001	0.001	0.002	-0.002	0.002	0.000	0.001	-0.002	0.000
14.H	0.218	-0.152	0.591	0.003	0.000	0.003	-0.002	0.005	-0.013
15.H	-0.030	-0.066	0.138	-0.001	0.000	-0.001	-0.003	0.005	-0.018
16.H	0.010	0.129	0.094	0.000	0.000	0.000	-0.003	-0.009	-0.008
17.H	-0.004	-0.013	0.032	-0.031	0.215	-0.346	-0.052	-0.098	0.472
18.H	-0.006	0.009	0.009	-0.189	0.258	0.156	-0.185	0.218	0.313
19.H	-0.007	0.014	-0.001	-0.185	0.462	-0.176	-0.036	0.037	0.098
20.H	0.002	0.002	-0.005	0.016	0.154	-0.356	-0.075	-0.041	0.409
21.H	0.004	-0.019	-0.016	-0.195	0.335	0.131	-0.253	0.341	0.367

	1531.035			1569.363			1599.129		
1.C	0.000	-0.001	0.002	-0.078	0.159	0.009	0.119	-0.120	-0.224
2.N	0.000	0.002	-0.002	0.068	-0.166	0.071	-0.042	0.030	0.106
3.C	0.000	-0.002	0.005	-0.027	0.119	-0.146	0.065	-0.003	-0.259
4.C	0.000	0.002	-0.002	0.100	-0.203	0.007	-0.125	0.131	0.228
5.C	0.001	-0.004	0.002	-0.142	0.343	-0.139	0.060	-0.047	-0.133
6.C	0.000	0.002	-0.005	0.045	-0.162	0.160	-0.073	0.005	0.280
7.Re	-0.001	0.000	0.000	0.000	0.001	0.000	0.000	0.000	0.000
8.O	0.001	0.000	0.001	0.000	-0.002	0.000	0.000	0.001	-0.001
9.C	-0.002	-0.002	-0.006	0.001	-0.001	0.000	0.001	0.001	0.001
10.O	-0.017	-0.011	-0.078	-0.002	-0.002	-0.006	-0.002	-0.001	-0.004
11.C	0.069	0.023	0.194	0.004	0.000	0.010	0.003	0.001	0.006
12.H	0.023	-0.425	-0.527	-0.007	-0.022	-0.017	-0.002	-0.016	-0.014
13.O	0.000	0.000	0.001	0.000	-0.001	0.001	0.000	-0.001	0.000
14.H	-0.402	0.291	-0.495	-0.018	0.008	-0.008	-0.016	0.007	-0.012
15.H	0.011	-0.001	-0.009	-0.006	0.002	0.004	-0.003	0.003	-0.003
16.H	0.007	0.000	-0.005	-0.001	-0.005	-0.008	-0.005	-0.007	-0.008
17.H	0.000	0.002	-0.009	-0.068	-0.017	0.303	0.026	-0.200	0.334
18.H	-0.001	0.001	-0.004	-0.038	-0.013	0.251	0.180	-0.274	-0.195
19.H	-0.003	0.006	-0.001	0.203	-0.510	0.190	0.048	-0.016	-0.171
20.H	0.000	0.000	0.006	0.084	-0.113	-0.170	0.004	0.155	-0.339
21.H	0.003	-0.006	-0.003	0.105	-0.122	-0.241	-0.206	0.331	0.147

	2972.574			3007.369			3107.056		
1.C	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000
2.N	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000
3.C	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	-0.001	0.001	0.000
4.C	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.001	-0.003	0.004
5.C	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	-0.001

6.C	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.003	-0.004	-0.001
7.Re	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000
8.O	0.000	0.000	0.000	0.000	0.001	0.000	0.000	0.000	0.000
9.C	0.000	0.000	0.000	0.010	-0.018	-0.061	-0.008	-0.093	0.025
10.O	0.000	0.000	-0.001	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000
11.C	0.028	-0.003	0.053	0.000	0.000	0.001	0.006	-0.011	-0.002
12.H	-0.469	0.550	-0.310	-0.003	0.004	-0.002	-0.044	0.052	-0.030
13.O	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000
14.H	0.151	-0.516	-0.298	0.003	-0.002	-0.002	-0.022	0.080	0.047
15.H	-0.001	-0.006	-0.002	-0.014	0.690	0.211	-0.017	0.640	0.223
16.H	0.002	0.003	-0.002	-0.103	-0.480	0.484	0.108	0.474	-0.521
17.H	0.000	0.000	0.000	0.001	-0.001	0.000	0.010	-0.018	-0.004
18.H	-0.001	0.002	-0.003	0.000	0.000	-0.001	-0.009	0.036	-0.042
19.H	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.001	-0.005	0.003	0.013
20.H	0.000	0.000	0.000	-0.002	0.004	0.000	-0.030	0.055	0.009
21.H	0.000	0.002	-0.002	0.000	0.001	-0.001	0.000	-0.001	0.002

	3109.637			3123.256			3126.237		
1.C	0.000	0.000	0.000	-0.003	0.017	-0.021	-0.005	0.030	-0.040
2.N	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000
3.C	0.001	-0.001	0.000	0.015	-0.025	-0.006	-0.029	0.049	0.014
4.C	-0.001	0.003	-0.004	-0.006	0.024	-0.028	0.005	-0.018	0.016
5.C	0.000	0.000	0.001	-0.019	0.012	0.053	-0.004	0.004	0.009
6.C	-0.002	0.003	0.001	0.015	-0.027	-0.005	0.011	-0.021	-0.002
7.Re	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000
8.O	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000
9.C	-0.001	-0.012	0.003	0.000	-0.001	0.000	0.000	0.004	-0.001
10.O	0.000	-0.001	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000
11.C	-0.045	0.091	0.012	0.001	-0.002	0.000	-0.002	0.005	0.001
12.H	0.352	-0.418	0.242	-0.010	0.012	-0.007	0.017	-0.021	0.012
13.O	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000
14.H	0.186	-0.654	-0.383	-0.005	0.016	0.009	0.009	-0.033	-0.019
15.H	-0.003	0.085	0.029	0.000	0.009	0.003	0.001	-0.028	-0.009
16.H	0.015	0.062	-0.067	0.001	0.006	-0.007	-0.004	-0.020	0.021
17.H	-0.010	0.016	0.004	-0.171	0.288	0.072	0.342	-0.575	-0.145
18.H	0.010	-0.039	0.046	0.071	-0.287	0.320	-0.049	0.194	-0.212
19.H	0.004	-0.003	-0.013	0.228	-0.146	-0.617	0.041	-0.027	-0.108
20.H	0.021	-0.040	-0.007	-0.174	0.323	0.049	-0.132	0.248	0.036
21.H	-0.001	0.002	-0.004	0.032	-0.188	0.238	0.062	-0.360	0.456

	3131.457			3137.179			3149.863		
1.C	-0.006	0.034	-0.042	-0.002	0.015	-0.022	-0.002	0.016	-0.023
2.N	0.000	0.000	0.000	0.000	-0.001	0.000	0.000	0.000	0.000
3.C	0.022	-0.037	-0.009	-0.014	0.023	0.009	0.013	-0.021	-0.007
4.C	-0.001	0.001	0.004	-0.010	0.040	-0.045	0.008	-0.030	0.033
5.C	0.018	-0.011	-0.048	0.006	-0.006	-0.008	-0.013	0.008	0.034
6.C	0.005	-0.012	0.002	-0.024	0.043	0.009	-0.027	0.051	0.007
7.Re	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000
8.O	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000
9.C	0.000	0.001	0.000	0.000	-0.005	0.001	0.000	-0.002	0.000
10.O	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000
11.C	0.000	0.001	0.000	0.003	-0.006	-0.001	0.000	-0.001	0.000
12.H	0.003	-0.004	0.002	-0.025	0.031	-0.017	-0.003	0.004	-0.002
13.O	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000
14.H	0.002	-0.007	-0.004	-0.012	0.042	0.024	-0.002	0.008	0.004
15.H	0.001	-0.005	-0.002	-0.001	0.040	0.014	0.000	0.017	0.006
16.H	0.000	-0.004	0.005	0.006	0.027	-0.029	0.003	0.009	-0.009
17.H	-0.245	0.413	0.104	0.150	-0.251	-0.066	-0.135	0.227	0.059
18.H	-0.002	0.012	-0.020	0.111	-0.445	0.501	-0.081	0.329	-0.365
19.H	-0.201	0.128	0.543	-0.039	0.029	0.097	0.136	-0.085	-0.365
20.H	-0.067	0.128	0.015	0.270	-0.503	-0.079	0.303	-0.565	-0.085
21.H	0.065	-0.378	0.480	0.030	-0.181	0.234	0.031	-0.183	0.239

List of All Frequencies:

Intensities
==========

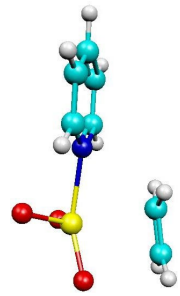
Frequency cm-1	Dipole Strength 1e-40 esu2 cm2	Absorption Intensity (degeneracy not counted) km/mole
-307.143667	1072.207407	-82.546457
-81.894304	63.424428	-1.301932
42.543361	1008.542280	10.754841
92.874181	144.854770	3.372142
106.259214	169.079653	4.503353
129.886716	525.234892	17.100010
145.812106	31.560616	1.153499
184.596802	117.903203	5.455416
201.630825	150.544556	7.608518
224.249754	17.936817	1.008220
285.604477	5.979050	0.428031
290.753876	85.936976	6.263018
314.018377	24.445929	1.924153

372.555236	0.944296	0.088181
414.038584	22.352242	2.319744
420.514690	54.995116	5.796734
492.914463	298.119580	36.833258
575.814326	37.896182	5.469605
622.092837	96.429253	15.036338
648.026911	3.359273	0.545653
654.426807	9.008864	1.477778
686.166259	350.458374	60.275923
721.065274	220.550184	39.862091
742.626013	182.804620	34.027919
857.092954	2.999143	0.644322
877.092203	278.455341	61.217963
924.363206	0.198309	0.045948
949.022655	407.943038	97.040757
956.259697	10.431946	2.500456
970.108934	2.383524	0.579586
981.389545	33.103180	8.143090
987.920489	192.638200	47.702646
1025.992506	72.796356	18.721123
1063.394391	92.609269	24.684645
1071.815472	18.650320	5.010538
1088.157784	29.357582	8.007376
1160.198021	5.950405	1.730441
1187.076094	32.038488	9.532979
1213.774773	56.861115	17.299420
1299.353409	0.861006	0.280422
1342.279830	16.026006	5.391957
1344.543500	24.116432	8.127669
1389.826560	177.763677	61.927237
1436.361966	122.623807	44.148582
1477.146662	3.182805	1.178451
1531.034768	11.703047	4.491197
1569.362729	0.384972	0.151437
1599.129076	70.730969	28.351184
2972.574219	8.984870	6.694568
3007.368939	42.064889	31.709145
3107.056000	22.683274	17.665783
3109.636838	1.665675	1.298309
3123.255756	1.133130	0.887085
3126.236949	1.996607	1.564561
3131.456686	13.769770	10.808145
3137.179121	7.262968	5.711254
3149.862573	3.679455	2.905047

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

1250.6170	4201.4710	4603.9503
-0.2900	0.8368	0.4643
0.2034	-0.4202	0.8843
0.9352	0.3509	-0.0484

TS(IIb-IIIb)



CCSD=-629.6651853

ATOMS cartesian

C	-0.378765	-0.150751	-0.511626
C	-0.434730	-0.214632	0.849907
H	-0.523575	-1.187572	1.341269
H	-0.723317	0.665997	1.432955
H	-0.252988	-1.048993	-1.121759
H	-0.476915	0.796230	-1.045631
O	1.976207	0.503802	-0.833006
Re	2.102525	-0.036783	0.808360
O	2.649659	-1.657565	0.767549
O	3.340105	0.954092	1.460820
N	1.425571	-0.073342	2.987471
C	1.502952	1.050821	3.734365
C	1.197286	1.048834	5.086887
C	0.826462	-0.145869	5.698028
C	0.776148	-1.307524	4.931014
C	1.075083	-1.238529	3.579396
H	1.840185	1.954881	3.230093
H	1.268555	1.978149	5.652021
H	0.592357	-0.174654	6.763043
H	0.518473	-2.270002	5.373000
H	1.067402	-2.128212	2.952318

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)

	-77.733			-6.964			42.527		
1.C	0.133	0.213	-0.010	0.030	0.169	-0.043	-0.009	0.206	0.033
2.C	0.196	0.236	0.011	0.007	0.120	-0.045	0.019	-0.192	0.017
3.H	0.073	0.247	0.014	-0.035	0.106	-0.077	0.137	-0.347	-0.265
4.H	0.238	0.262	-0.004	0.022	0.109	-0.021	-0.067	-0.394	0.275
5.H	0.007	0.194	-0.006	0.003	0.187	-0.076	0.060	0.399	-0.234
6.H	0.165	0.214	-0.016	0.071	0.193	-0.010	-0.119	0.353	0.313
7.O	0.067	-0.341	-0.167	0.076	-0.004	-0.006	-0.020	0.007	0.003
8.Re	-0.030	-0.004	-0.028	-0.007	-0.010	0.000	0.001	-0.010	-0.002
9.O	0.138	0.047	0.290	-0.087	-0.038	0.016	0.045	0.006	-0.017
10.O	-0.233	0.284	-0.086	0.013	-0.067	0.046	-0.016	0.011	-0.002
11.N	0.069	-0.084	0.069	-0.042	-0.027	-0.007	0.015	-0.004	0.003
12.C	0.079	-0.087	0.067	-0.211	0.022	-0.065	0.014	0.006	-0.010
13.C	0.045	-0.070	0.060	-0.173	0.046	-0.058	-0.008	0.026	-0.015
14.C	-0.024	-0.054	0.047	0.070	0.010	0.018	-0.028	0.037	-0.005
15.C	-0.050	-0.054	0.046	0.248	-0.034	0.080	-0.022	0.027	0.010
16.C	0.010	-0.067	0.059	0.169	-0.055	0.059	-0.002	0.007	0.013
17.H	0.118	-0.099	0.070	-0.376	0.055	-0.117	0.030	-0.004	-0.018
18.H	0.064	-0.072	0.062	-0.323	0.090	-0.111	-0.010	0.033	-0.027
19.H	-0.062	-0.044	0.039	0.117	0.021	0.028	-0.045	0.053	-0.009
20.H	-0.120	-0.038	0.040	0.450	-0.060	0.141	-0.035	0.034	0.019
21.H	0.010	-0.068	0.060	0.280	-0.084	0.098	0.001	-0.001	0.025

	66.069			118.315			138.081		
1.C	-0.158	0.034	0.219	-0.227	0.059	0.033	0.154	-0.073	0.014
2.C	-0.056	0.121	0.222	-0.291	-0.039	0.008	0.152	-0.161	0.019
3.H	-0.076	0.162	0.298	-0.243	-0.068	-0.044	0.290	-0.211	-0.055
4.H	0.075	0.183	0.194	-0.225	-0.071	0.084	-0.034	-0.252	0.062
5.H	-0.274	-0.014	0.266	-0.222	0.103	-0.029	0.298	-0.015	-0.039
6.H	-0.116	0.010	0.169	-0.147	0.106	0.100	-0.024	-0.059	0.069
7.O	-0.099	-0.025	0.001	0.068	-0.187	-0.026	0.001	-0.120	-0.074
8.Re	0.031	-0.004	-0.007	0.032	0.007	0.022	-0.015	0.039	-0.009
9.O	0.045	0.001	-0.033	0.020	-0.003	0.221	-0.335	-0.074	0.144
10.O	0.067	0.013	-0.102	0.055	0.033	-0.063	0.160	-0.100	-0.131
11.N	0.120	-0.043	0.001	-0.137	0.130	-0.105	0.116	0.108	0.051
12.C	-0.012	-0.018	-0.025	-0.107	0.077	-0.027	0.035	0.062	0.127
13.C	-0.182	0.011	-0.064	0.036	-0.054	0.005	-0.079	-0.041	0.107
14.C	-0.217	0.014	-0.079	0.136	-0.119	-0.057	-0.107	-0.089	-0.001
15.C	-0.056	-0.018	-0.044	0.051	-0.049	-0.156	0.012	-0.044	-0.074

16.C	0.115	-0.045	-0.007	-0.075	0.073	-0.173	0.129	0.058	-0.040
17.H	0.002	-0.017	-0.016	-0.182	0.128	0.015	0.040	0.106	0.207
18.H	-0.296	0.031	-0.082	0.080	-0.105	0.084	-0.155	-0.078	0.178
19.H	-0.371	0.041	-0.111	0.273	-0.220	-0.030	-0.214	-0.159	-0.027
20.H	-0.079	-0.012	-0.046	0.096	-0.090	-0.219	0.007	-0.084	-0.162
21.H	0.233	-0.060	0.012	-0.111	0.126	-0.245	0.228	0.096	-0.093

	172.127			193.815			199.574		
1.C	0.080	0.049	-0.178	-0.247	0.037	-0.274	0.138	0.060	0.048
2.C	0.050	0.050	-0.167	-0.058	0.029	-0.263	0.189	0.100	0.059
3.H	-0.051	0.050	-0.182	-0.092	0.028	-0.264	0.073	0.117	0.073
4.H	0.000	0.055	-0.195	0.021	0.041	-0.238	0.234	0.133	0.033
5.H	0.063	0.048	-0.178	-0.368	0.040	-0.303	0.054	0.033	0.068
6.H	0.095	0.049	-0.179	-0.220	0.056	-0.247	0.158	0.047	0.023
7.O	-0.200	0.010	0.097	-0.133	-0.039	0.013	-0.121	0.056	0.040
8.Re	-0.036	-0.009	0.098	0.017	-0.007	0.003	-0.014	-0.057	0.005
9.O	-0.001	0.001	0.078	0.080	0.017	-0.046	0.157	0.001	-0.136
10.O	0.002	0.054	-0.057	0.084	-0.005	-0.134	-0.055	0.015	-0.022
11.N	0.176	-0.039	-0.142	0.069	0.038	0.112	-0.037	0.261	-0.001
12.C	0.171	-0.015	-0.187	0.037	0.018	0.158	-0.094	0.196	0.112
13.C	0.067	0.019	-0.223	-0.053	-0.006	0.146	-0.069	0.002	0.126
14.C	-0.011	0.031	-0.247	-0.084	-0.014	0.114	0.036	-0.099	0.001
15.C	0.064	-0.003	-0.202	0.013	-0.002	0.093	0.043	-0.003	-0.139
16.C	0.164	-0.047	-0.171	0.068	0.028	0.102	0.003	0.192	-0.130
17.H	0.229	-0.047	-0.203	0.059	0.033	0.200	-0.153	0.267	0.196
18.H	0.032	0.024	-0.227	-0.097	-0.010	0.159	-0.116	-0.067	0.246
19.H	-0.128	0.064	-0.272	-0.170	-0.028	0.095	0.098	-0.246	0.011
20.H	0.026	0.017	-0.180	0.033	-0.022	0.061	0.078	-0.070	-0.266
21.H	0.217	-0.044	-0.174	0.099	0.032	0.095	0.020	0.263	-0.230

	249.320			255.657			327.623		
1.C	0.126	0.012	0.012	0.306	0.044	0.026	0.006	0.026	-0.027
2.C	-0.349	-0.006	-0.016	-0.199	0.023	0.004	-0.142	0.002	-0.029
3.H	-0.390	-0.002	-0.015	-0.250	0.018	-0.019	-0.164	-0.003	-0.048
4.H	-0.402	0.005	-0.061	-0.357	0.010	-0.060	-0.145	0.005	-0.041
5.H	0.301	0.014	0.045	0.530	0.057	0.057	0.050	0.034	-0.030
6.H	0.265	0.010	-0.015	0.365	0.030	-0.004	0.056	0.036	-0.017
7.O	0.166	0.030	-0.006	-0.174	-0.049	0.000	-0.196	0.317	0.131
8.Re	-0.023	-0.015	-0.014	0.010	0.007	0.011	0.100	-0.054	-0.025
9.O	0.059	0.013	-0.023	0.038	0.022	-0.063	-0.487	-0.289	0.104
10.O	-0.082	-0.009	0.084	0.124	0.018	-0.235	-0.348	0.523	-0.034
11.N	0.115	0.069	0.033	-0.058	-0.060	0.011	0.012	0.023	0.015
12.C	0.144	0.040	0.086	-0.088	-0.041	-0.015	-0.017	0.018	0.035
13.C	0.009	0.007	0.059	-0.021	-0.010	0.001	-0.015	-0.003	0.043
14.C	-0.115	0.005	-0.018	0.053	-0.001	0.061	0.007	-0.009	0.044
15.C	0.059	0.005	-0.027	-0.039	-0.005	0.070	-0.009	0.010	0.016
16.C	0.162	0.043	0.000	-0.096	-0.039	0.051	-0.008	0.024	0.014
17.H	0.209	0.042	0.134	-0.129	-0.040	-0.041	-0.031	0.028	0.046
18.H	-0.030	-0.011	0.094	-0.005	0.010	-0.033	-0.018	-0.004	0.046
19.H	-0.303	-0.005	-0.059	0.156	0.014	0.085	0.031	-0.027	0.049
20.H	0.064	-0.014	-0.067	-0.043	0.008	0.097	-0.007	0.000	-0.005
21.H	0.229	0.056	-0.019	-0.147	-0.054	0.072	-0.008	0.027	0.012

	339.293			370.317			380.000		
1.C	0.058	0.011	0.006	-0.015	0.001	-0.008	-0.079	-0.027	0.022
2.C	-0.002	0.034	0.006	0.001	0.001	-0.009	0.088	-0.019	0.018
3.H	0.010	0.043	0.025	0.041	0.003	0.004	0.134	-0.023	0.023
4.H	-0.039	0.039	-0.020	-0.010	-0.002	-0.007	0.150	-0.020	0.052
5.H	0.130	0.004	0.030	0.003	0.005	-0.009	-0.131	-0.032	0.015
6.H	-0.005	-0.014	-0.024	-0.026	0.002	-0.006	-0.047	-0.017	0.031
7.O	-0.208	0.495	0.090	0.069	0.034	0.015	0.479	0.276	0.110
8.Re	-0.015	-0.023	-0.078	-0.007	-0.005	0.005	-0.048	-0.028	0.033
9.O	0.243	0.043	0.714	0.004	-0.004	-0.018	0.037	-0.012	0.001
10.O	0.112	-0.261	-0.006	0.007	0.017	-0.060	0.088	0.161	-0.521
11.N	-0.009	-0.011	0.008	0.020	-0.004	0.008	-0.014	-0.014	-0.008
12.C	-0.017	-0.017	0.009	-0.184	0.041	-0.039	0.083	-0.033	0.010
13.C	0.012	-0.018	0.021	0.170	-0.030	0.040	-0.101	0.008	-0.032
14.C	-0.014	-0.004	0.030	0.014	-0.001	0.003	0.002	-0.006	0.003
15.C	-0.018	-0.001	0.026	-0.190	0.033	-0.037	0.090	-0.029	0.031
16.C	0.018	-0.013	0.029	0.187	-0.037	0.043	-0.122	0.004	-0.013
17.H	-0.045	-0.005	0.011	-0.496	0.119	-0.109	0.244	-0.076	0.037
18.H	0.031	-0.014	0.013	0.351	-0.068	0.079	-0.201	0.032	-0.059
19.H	-0.021	0.004	0.028	0.029	-0.002	0.007	0.014	0.003	0.006
20.H	-0.031	-0.001	0.020	-0.407	0.074	-0.073	0.195	-0.045	0.055
21.H	0.053	-0.026	0.049	0.488	-0.085	0.107	-0.295	0.027	-0.044

	429.090			479.123			639.376		
1.C	-0.017	-0.006	-0.017	0.028	-0.005	0.005	0.000	0.000	-0.007
2.C	-0.041	-0.008	-0.013	0.001	-0.070	0.000	-0.009	-0.003	-0.005
3.H	-0.051	-0.010	-0.019	-0.455	-0.033	-0.012	-0.029	0.000	-0.002
4.H	-0.050	-0.007	-0.017	0.426	0.060	0.018	-0.008	-0.001	-0.007
5.H	-0.009	-0.008	-0.013	-0.510	-0.032	-0.069	-0.003	0.004	-0.014
6.H	-0.012	-0.007	-0.019	0.564	0.091	0.086	0.008	0.005	0.000
7.O	0.034	0.008	-0.008	-0.004	0.003	-0.002	-0.005	0.005	0.002

8.Re	-0.006	0.000	-0.002	-0.001	0.004	-0.001	0.004	0.000	-0.006
9.O	0.002	0.004	0.009	-0.011	0.005	0.007	-0.003	0.002	0.000
10.O	-0.016	-0.016	0.040	0.007	-0.002	-0.003	-0.001	-0.005	-0.013
11.N	0.313	-0.049	0.072	0.001	-0.002	0.000	-0.093	0.021	0.342
12.C	-0.029	0.027	-0.003	-0.006	-0.001	0.001	0.046	0.243	0.023
13.C	-0.187	0.046	-0.037	0.002	0.001	0.002	0.051	0.199	-0.036
14.C	0.242	-0.049	0.043	0.000	0.001	0.003	0.075	-0.020	-0.371
15.C	-0.152	0.024	-0.044	-0.003	0.003	0.001	-0.047	-0.302	0.038
16.C	-0.058	0.025	-0.020	0.006	-0.004	0.002	-0.049	-0.160	0.089
17.H	-0.092	0.047	-0.010	-0.010	0.001	0.000	0.062	0.098	-0.234
18.H	-0.422	0.086	-0.074	0.006	0.001	0.001	-0.095	0.013	0.286
19.H	0.589	-0.120	0.117	0.000	0.001	0.003	0.045	0.081	-0.377
20.H	-0.354	0.058	-0.090	-0.008	0.004	0.002	-0.152	-0.148	0.315
21.H	-0.174	0.048	-0.051	0.006	-0.002	0.000	-0.010	0.037	-0.193

	644.111			686.231			743.756		
1.C	0.000	0.002	-0.002	-0.002	-0.001	-0.001	0.001	0.000	0.001
2.C	-0.004	0.000	-0.003	0.000	-0.001	0.001	0.002	0.000	-0.002
3.H	0.005	0.005	0.010	-0.021	-0.005	-0.014	0.017	0.006	0.012
4.H	0.013	0.008	-0.006	-0.016	-0.005	-0.001	0.018	0.004	-0.001
5.H	-0.018	0.002	-0.006	0.000	-0.002	0.001	0.010	0.007	-0.006
6.H	0.025	0.007	0.003	-0.005	-0.004	-0.005	0.002	0.006	0.011
7.O	0.000	-0.003	-0.001	0.003	0.002	-0.004	-0.003	-0.002	0.005
8.Re	-0.001	0.001	0.001	0.000	0.000	0.000	0.001	0.000	0.000
9.O	-0.003	0.005	0.001	0.000	0.001	0.002	-0.001	0.000	-0.001
10.O	0.003	0.004	0.010	-0.003	-0.002	0.003	0.000	0.001	-0.003
11.N	0.037	0.130	-0.061	0.132	-0.026	0.026	-0.122	0.025	-0.035
12.C	0.085	0.175	-0.220	-0.088	0.018	-0.022	0.105	-0.032	0.024
13.C	0.000	-0.271	-0.264	0.128	-0.029	0.027	-0.018	0.002	-0.004
14.C	-0.044	-0.148	0.063	-0.053	0.008	-0.008	0.112	-0.019	0.032
15.C	-0.085	-0.189	0.230	0.124	-0.020	0.023	-0.018	0.004	-0.002
16.C	0.007	0.244	0.227	-0.094	0.024	-0.021	0.108	-0.019	0.022
17.H	0.089	0.259	-0.074	-0.521	0.130	-0.109	-0.176	0.042	-0.030
18.H	-0.027	-0.335	-0.162	-0.193	0.040	-0.046	-0.573	0.127	-0.140
19.H	0.037	0.269	0.092	-0.515	0.096	-0.108	-0.377	0.080	-0.072
20.H	-0.052	-0.310	-0.004	-0.160	0.026	-0.043	-0.573	0.100	-0.117
21.H	0.015	0.270	0.196	-0.501	0.088	-0.103	-0.194	0.027	-0.037

	820.985			855.068			909.152		
1.C	-0.003	0.041	0.001	0.001	0.001	0.000	0.016	0.000	0.007
2.C	-0.006	0.034	0.000	-0.002	-0.001	0.000	-0.071	-0.002	-0.046
3.H	0.086	-0.203	-0.436	0.020	0.002	0.011	0.601	0.042	0.143
4.H	-0.003	-0.252	0.421	0.001	0.001	-0.001	0.498	0.068	0.119
5.H	-0.108	-0.265	0.423	-0.016	-0.001	-0.001	0.125	0.027	-0.009
6.H	0.159	-0.195	-0.441	0.013	0.002	0.000	0.202	0.045	0.055
7.O	-0.002	0.000	0.001	0.000	-0.001	0.000	0.015	-0.159	0.464
8.Re	0.000	0.000	0.000	0.000	0.001	0.000	-0.011	0.019	-0.040
9.O	0.000	-0.001	0.000	0.003	-0.006	-0.001	0.033	-0.085	0.005
10.O	0.000	0.000	0.000	-0.005	-0.003	-0.003	0.021	0.013	0.016
11.N	-0.002	-0.001	0.000	-0.003	0.005	0.002	0.023	-0.004	-0.001
12.C	0.002	0.001	0.001	0.084	-0.015	0.016	-0.016	-0.006	0.000
13.C	0.000	0.000	-0.001	0.059	-0.015	0.011	0.003	0.001	-0.001
14.C	0.001	-0.001	0.000	0.001	0.002	-0.002	0.003	0.001	-0.008
15.C	-0.003	0.000	0.001	-0.066	0.011	-0.013	0.020	-0.006	0.004
16.C	0.005	-0.001	0.001	-0.080	0.007	-0.016	-0.026	0.010	-0.003
17.H	-0.005	0.003	-0.002	-0.448	0.120	-0.093	0.063	-0.025	0.021
18.H	-0.003	0.000	0.000	-0.485	0.096	-0.105	-0.003	0.003	-0.003
19.H	-0.002	0.001	0.000	0.020	0.001	0.002	-0.024	0.009	-0.015
20.H	0.002	0.000	0.002	0.489	-0.083	0.105	-0.087	0.015	-0.014
21.H	-0.007	0.001	-0.002	0.474	-0.078	0.093	0.107	-0.017	0.032

	926.683			945.096			951.257		
1.C	0.004	0.001	-0.002	-0.036	0.001	0.005	-0.031	-0.008	0.008
2.C	-0.015	-0.001	-0.003	0.111	0.006	0.037	0.102	0.012	0.030
3.H	0.076	0.001	0.018	-0.674	-0.042	-0.180	-0.423	-0.036	-0.145
4.H	0.048	0.005	0.018	-0.503	-0.066	-0.146	-0.652	-0.093	-0.173
5.H	-0.024	-0.006	0.004	0.119	0.007	0.022	-0.093	0.000	-0.021
6.H	0.002	-0.001	-0.006	-0.025	-0.019	-0.040	0.165	0.019	0.017
7.O	-0.002	0.010	-0.030	0.010	-0.029	0.091	0.005	-0.021	0.047
8.Re	0.000	-0.002	0.002	-0.007	-0.005	-0.013	0.016	0.043	0.008
9.O	-0.003	0.008	0.000	-0.007	0.026	0.004	0.088	-0.253	-0.012
10.O	0.009	0.007	0.005	0.085	0.066	0.043	-0.271	-0.221	-0.138
11.N	0.017	-0.002	0.004	-0.003	0.000	0.010	-0.003	0.002	0.023
12.C	-0.095	0.028	-0.028	-0.040	0.008	-0.013	-0.012	-0.007	-0.006
13.C	0.043	-0.006	0.014	0.040	-0.012	0.006	-0.012	-0.015	-0.022
14.C	0.063	-0.012	0.025	0.010	-0.003	0.005	0.029	-0.003	0.012
15.C	0.029	-0.009	0.005	-0.043	0.013	-0.012	0.009	0.010	-0.003
16.C	-0.085	0.009	-0.021	0.034	-0.004	0.005	-0.015	0.011	-0.008
17.H	0.591	-0.151	0.103	0.214	-0.067	0.023	0.095	-0.023	0.039
18.H	-0.254	0.058	-0.053	-0.208	0.040	-0.048	0.070	-0.022	-0.024
19.H	-0.394	0.074	-0.072	-0.055	0.004	-0.009	-0.153	0.055	-0.027
20.H	-0.179	0.023	-0.045	0.216	-0.035	0.036	-0.046	0.015	-0.027
21.H	0.538	-0.089	0.105	-0.131	0.031	-0.040	0.129	0.017	-0.016

	956.234	978.545	981.965

1.C	-0.016	-0.001	0.001	0.008	0.004	0.001	0.003	-0.023	-0.001
2.C	0.042	0.005	0.014	-0.012	-0.006	-0.004	-0.006	0.028	0.001
3.H	-0.201	-0.014	-0.059	-0.018	0.002	0.009	0.517	0.018	0.069
4.H	-0.254	-0.038	-0.062	0.150	0.027	0.025	-0.491	-0.084	-0.065
5.H	0.001	-0.001	0.003	0.049	0.001	0.013	-0.409	-0.003	-0.115
6.H	0.052	0.001	-0.010	-0.095	-0.015	-0.015	0.426	0.092	0.129
7.O	0.003	-0.005	0.019	0.000	-0.001	0.004	-0.006	0.014	-0.045
8.Re	-0.004	-0.004	-0.004	0.001	-0.001	0.000	-0.011	0.003	0.000
9.O	-0.003	0.010	0.001	-0.006	0.017	0.001	0.048	-0.126	-0.003
10.O	0.049	0.038	0.026	-0.009	-0.006	-0.005	0.090	0.068	0.048
11.N	0.004	0.006	-0.008	0.011	-0.004	0.007	0.006	-0.001	-0.023
12.C	0.078	-0.019	0.018	0.003	-0.002	0.003	-0.004	0.012	-0.001
13.C	-0.091	0.023	-0.019	-0.069	0.012	-0.018	-0.003	0.018	0.013
14.C	0.021	0.001	0.010	0.125	-0.025	0.020	0.017	-0.005	0.005
15.C	0.080	-0.026	0.022	-0.082	0.020	-0.019	-0.029	-0.010	0.004
16.C	-0.094	0.009	-0.023	0.012	0.003	0.006	0.016	-0.012	0.004
17.H	-0.385	0.105	-0.066	-0.073	0.014	-0.016	0.021	0.005	0.001
18.H	0.458	-0.084	0.089	0.394	-0.089	0.089	0.024	0.005	0.034
19.H	-0.115	0.048	-0.018	-0.687	0.119	-0.156	-0.100	0.006	-0.020
20.H	-0.423	0.065	-0.070	0.466	-0.080	0.084	0.128	-0.036	0.043
21.H	0.487	-0.077	0.087	-0.121	0.021	-0.017	-0.126	-0.001	-0.011

	983.978			1009.642			1038.435		
1.C	0.009	0.023	-0.004	0.011	0.001	-0.007	-0.007	0.004	0.001
2.C	-0.019	-0.031	-0.003	-0.023	-0.004	0.000	0.010	-0.004	0.004
3.H	-0.421	-0.013	-0.036	0.064	-0.004	0.018	-0.079	-0.008	-0.015
4.H	0.580	0.099	0.093	0.053	0.013	0.013	-0.014	0.003	-0.017
5.H	0.358	-0.003	0.107	-0.054	-0.009	-0.008	0.040	-0.003	0.021
6.H	-0.451	-0.087	-0.118	-0.032	-0.002	-0.007	0.001	-0.008	-0.022
7.O	-0.001	0.016	-0.064	-0.004	0.013	-0.035	-0.001	0.004	-0.008
8.Re	-0.015	0.015	0.002	-0.006	0.001	-0.002	0.000	0.000	0.002
9.O	0.087	-0.247	-0.006	0.027	-0.073	-0.004	0.000	-0.002	0.000
10.O	0.093	0.067	0.047	0.067	0.050	0.025	-0.007	-0.004	-0.001
11.N	0.006	0.005	-0.030	-0.086	-0.011	0.371	0.055	0.008	-0.228
12.C	0.007	0.016	-0.002	-0.040	-0.146	0.070	-0.100	-0.254	0.164
13.C	0.002	0.019	0.013	-0.025	-0.312	-0.190	0.009	0.074	0.088
14.C	-0.009	0.005	0.014	0.044	0.001	-0.187	0.080	0.011	-0.346
15.C	-0.004	-0.028	0.019	0.105	0.324	-0.145	-0.029	-0.085	0.077
16.C	-0.003	-0.023	-0.009	-0.002	0.147	0.090	-0.006	0.248	0.192
17.H	-0.014	0.028	0.003	-0.068	-0.138	0.111	-0.057	-0.150	0.414
18.H	-0.005	0.022	0.013	-0.025	-0.357	-0.176	-0.082	0.036	0.149
19.H	0.032	0.016	0.026	0.055	-0.009	-0.212	0.074	0.028	-0.367
20.H	-0.038	-0.016	0.033	-0.007	0.378	-0.171	-0.041	-0.031	0.172
21.H	0.013	-0.011	-0.029	0.067	0.116	0.168	0.006	0.112	0.410

	1055.106			1063.791			1078.647		
1.C	-0.140	-0.016	-0.015	0.025	0.003	0.006	0.002	0.002	0.000
2.C	0.022	0.002	0.011	0.002	0.000	-0.002	0.002	-0.003	0.001
3.H	0.043	0.023	0.058	-0.031	-0.004	-0.018	-0.034	-0.003	-0.004
4.H	0.111	-0.014	0.080	-0.033	0.001	-0.022	0.005	0.005	-0.009
5.H	0.694	0.104	-0.022	-0.121	-0.018	0.008	-0.004	-0.004	0.008
6.H	0.662	0.061	-0.026	-0.128	-0.013	0.008	-0.027	-0.006	-0.008
7.O	-0.007	0.008	-0.030	0.002	-0.004	0.011	0.000	-0.001	0.002
8.Re	0.000	-0.001	0.002	0.000	0.000	0.000	0.000	0.002	0.000
9.O	0.000	-0.001	0.000	-0.002	0.007	0.001	0.002	-0.009	0.001
10.O	-0.002	-0.001	0.000	-0.008	-0.005	-0.002	0.000	-0.002	-0.002
11.N	0.003	-0.003	-0.008	0.020	0.001	-0.095	-0.022	-0.099	-0.008
12.C	0.003	0.019	0.000	0.021	0.119	0.005	0.044	0.063	-0.092
13.C	-0.004	-0.015	0.002	-0.026	-0.104	0.028	-0.001	0.081	0.060
14.C	0.004	-0.003	-0.008	0.017	-0.003	-0.067	-0.020	-0.099	-0.006
15.C	0.001	0.019	0.002	0.014	0.106	0.038	0.028	0.067	-0.049
16.C	-0.003	-0.016	0.002	-0.022	-0.114	-0.002	-0.013	0.070	0.103
17.H	0.007	0.030	0.020	0.029	0.224	0.180	0.026	-0.099	-0.407
18.H	-0.018	-0.050	0.060	-0.176	-0.360	0.457	-0.070	-0.047	0.299
19.H	-0.015	-0.011	-0.014	0.006	-0.016	-0.079	-0.095	-0.592	-0.036
20.H	0.015	0.041	0.055	-0.064	0.334	0.474	0.026	-0.060	-0.351
21.H	-0.020	-0.037	0.030	-0.081	-0.247	0.173	-0.063	-0.123	0.388

	1167.494			1204.166			1215.906		
1.C	0.000	-0.001	0.000	-0.019	0.145	0.007	0.001	-0.003	0.004
2.C	0.000	0.001	0.000	0.016	-0.142	-0.007	0.002	0.004	-0.003
3.H	0.001	0.000	-0.002	0.092	0.116	0.498	-0.017	-0.005	-0.024
4.H	0.000	-0.001	0.002	-0.099	0.139	-0.479	-0.002	-0.002	0.002
5.H	0.000	0.001	-0.002	-0.031	-0.150	0.437	-0.002	0.002	-0.004
6.H	-0.001	0.000	0.002	0.083	-0.098	-0.444	-0.011	0.002	0.017
7.O	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	-0.001	0.002
8.Re	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000
9.O	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.001	0.000
10.O	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	-0.001	0.000	0.000
11.N	0.005	0.022	0.002	0.001	0.005	0.001	0.003	0.003	-0.016
12.C	-0.001	0.004	0.003	0.000	0.001	0.000	-0.003	0.067	0.059
13.C	0.010	0.016	-0.031	0.000	-0.001	0.000	0.011	0.001	-0.041
14.C	-0.010	-0.060	-0.004	0.000	0.002	0.002	0.002	0.000	-0.011
15.C	-0.004	0.015	0.034	0.000	-0.001	-0.004	0.009	0.000	-0.041
16.C	0.000	0.005	-0.003	0.000	-0.006	0.001	-0.024	-0.070	0.050

17.H	-0.003	0.058	0.097	0.003	0.007	0.012	-0.011	0.298	0.455
18.H	0.143	0.248	-0.427	0.007	0.009	-0.017	0.119	0.197	-0.379
19.H	-0.116	-0.645	-0.043	0.000	-0.003	0.001	0.002	-0.001	-0.013
20.H	-0.058	0.228	0.464	0.004	-0.002	-0.003	0.051	-0.171	-0.392
21.H	0.035	0.068	-0.092	-0.024	-0.012	0.009	-0.141	-0.333	0.412

	1292.870			1308.137			1347.979		
1.C	-0.005	0.003	0.040	0.024	0.009	-0.152	0.000	0.000	0.000
2.C	0.004	-0.005	-0.036	-0.008	-0.008	0.147	0.000	-0.001	-0.001
3.H	0.028	-0.027	-0.088	-0.094	0.155	0.490	0.007	0.003	0.006
4.H	0.008	0.062	-0.140	-0.072	-0.216	0.465	-0.001	-0.002	0.000
5.H	0.019	-0.037	0.112	-0.088	0.147	-0.421	-0.001	-0.002	0.004
6.H	0.003	0.023	0.086	-0.037	-0.128	-0.432	0.001	0.001	0.001
7.O	-0.002	0.001	-0.002	0.004	-0.002	0.012	0.000	0.000	0.000
8.Re	0.000	0.000	0.000	0.000	0.001	-0.001	0.000	0.000	0.000
9.O	-0.001	0.001	0.002	0.001	0.000	0.000	0.000	0.002	0.000
10.O	0.006	0.004	-0.002	-0.001	-0.002	-0.002	0.002	0.002	0.001
11.N	-0.080	-0.408	-0.028	-0.006	-0.020	-0.006	-0.009	-0.044	-0.004
12.C	-0.012	0.200	0.264	-0.001	0.012	0.014	0.005	-0.024	-0.054
13.C	0.061	0.102	-0.172	0.003	0.005	-0.009	0.009	0.014	-0.026
14.C	-0.035	-0.201	-0.012	-0.002	-0.011	-0.001	0.014	0.080	0.005
15.C	-0.022	0.092	0.187	-0.001	0.005	0.009	-0.004	0.014	0.028
16.C	0.084	0.214	-0.241	0.003	0.009	-0.012	-0.015	-0.031	0.053
17.H	-0.022	0.202	0.285	-0.001	0.020	0.028	-0.025	0.295	0.488
18.H	-0.029	-0.015	0.035	0.001	0.002	-0.003	-0.087	-0.148	0.251
19.H	0.067	0.419	0.027	0.003	0.021	0.001	-0.063	-0.359	-0.024
20.H	-0.001	-0.013	-0.035	-0.001	-0.002	-0.007	0.030	-0.138	-0.282
21.H	0.136	0.195	-0.234	-0.003	0.001	-0.004	0.145	0.329	-0.448

	1422.213			1443.218			1472.593		
1.C	0.003	0.002	-0.047	0.000	0.000	0.002	0.000	0.000	-0.008
2.C	0.019	0.006	-0.088	0.000	0.000	0.001	-0.001	0.000	0.001
3.H	-0.149	0.262	0.397	0.000	-0.003	-0.005	-0.006	0.002	0.006
4.H	-0.084	-0.326	0.371	0.000	0.004	-0.006	0.001	-0.004	0.011
5.H	0.028	-0.287	0.401	0.000	0.007	-0.008	0.004	-0.021	0.024
6.H	-0.047	0.252	0.425	0.000	-0.006	-0.010	-0.001	0.020	0.028
7.O	-0.001	0.000	0.000	0.000	0.000	-0.001	0.000	0.001	-0.001
8.Re	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000
9.O	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	-0.002	0.000
10.O	0.000	0.000	0.000	-0.002	-0.001	0.000	0.002	0.002	0.000
11.N	0.002	0.001	-0.001	0.025	0.121	0.008	-0.018	-0.003	0.075
12.C	-0.001	0.001	0.004	-0.036	-0.053	0.113	-0.001	-0.088	-0.084
13.C	0.000	-0.002	0.000	0.043	0.027	-0.167	0.037	0.094	-0.077
14.C	0.000	-0.001	-0.002	0.009	0.052	0.003	-0.018	0.005	0.088
15.C	0.000	0.003	0.003	-0.033	0.018	0.172	0.002	-0.095	-0.091
16.C	-0.001	-0.002	0.001	0.015	-0.047	-0.120	0.032	0.095	-0.073
17.H	0.002	-0.012	-0.017	-0.017	-0.291	-0.251	-0.039	0.232	0.472
18.H	0.002	0.002	-0.007	-0.118	-0.256	0.287	-0.118	-0.159	0.375
19.H	-0.002	-0.001	-0.003	-0.087	-0.514	-0.033	-0.029	-0.020	0.105
20.H	0.005	-0.005	-0.011	0.015	-0.240	-0.324	-0.046	0.129	0.394
21.H	0.001	0.003	-0.007	-0.092	-0.303	0.203	-0.130	-0.260	0.437

	1555.950			1562.565			1596.783		
1.C	-0.002	-0.010	0.228	0.000	-0.001	0.018	0.001	0.001	-0.010
2.C	0.025	0.012	-0.213	0.002	0.002	-0.017	0.000	0.000	0.012
3.H	-0.126	0.287	0.269	-0.019	0.023	0.021	0.006	-0.016	-0.017
4.H	-0.054	-0.335	0.244	-0.005	-0.030	0.023	0.000	0.018	-0.016
5.H	-0.054	0.394	-0.344	-0.006	0.031	-0.029	0.001	-0.015	0.012
6.H	0.031	-0.367	-0.377	0.000	-0.028	-0.027	-0.003	0.015	0.013
7.O	-0.002	0.001	-0.006	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000
8.Re	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000
9.O	-0.001	-0.002	0.000	0.000	-0.002	0.001	0.000	0.001	0.000
10.O	0.001	0.002	0.001	0.001	-0.001	-0.001	-0.001	-0.002	0.001
11.N	0.004	0.005	0.003	-0.033	-0.170	-0.017	0.026	0.004	-0.114
12.C	-0.002	-0.008	-0.001	0.012	0.150	0.099	-0.048	0.057	0.266
13.C	0.004	0.011	-0.009	-0.056	-0.216	0.057	0.076	0.078	-0.268
14.C	-0.003	-0.014	0.004	0.071	0.401	0.025	-0.033	-0.010	0.143
15.C	0.002	0.003	-0.006	-0.018	-0.206	-0.086	0.047	-0.058	-0.276
16.C	-0.002	-0.002	0.007	0.041	0.146	-0.066	-0.068	-0.072	0.258
17.H	0.001	-0.002	0.013	0.036	-0.080	-0.299	-0.009	-0.300	-0.296
18.H	-0.006	-0.005	0.022	0.028	-0.091	-0.211	-0.110	-0.239	0.251
19.H	0.003	0.021	0.008	-0.104	-0.595	-0.041	-0.038	0.004	0.168
20.H	0.000	0.013	0.012	-0.052	-0.103	0.180	-0.010	0.228	0.281
21.H	0.003	0.005	-0.002	-0.056	-0.076	0.250	0.102	0.315	-0.252

	3037.873			3070.713			3127.909		
1.C	0.000	0.000	0.001	0.002	-0.004	-0.068	0.000	0.000	0.000
2.C	-0.020	0.001	0.062	-0.002	0.001	0.013	0.000	0.000	0.000
3.H	0.046	0.591	-0.293	0.003	0.048	-0.023	0.000	0.001	-0.001
4.H	0.189	-0.600	-0.390	0.019	-0.064	-0.041	0.000	0.001	0.001
5.H	0.008	-0.063	-0.041	-0.086	0.618	0.410	0.000	0.001	0.001
6.H	-0.006	0.062	-0.033	0.058	-0.573	0.311	0.000	-0.002	0.001
7.O	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000
8.Re	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000

9.O	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000
10.O	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000
11.N	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000
12.C	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	-0.004	-0.011	0.005
13.C	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.002	0.031	0.021
14.C	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.014	0.002	-0.063
15.C	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	-0.009	-0.034	0.017
16.C	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.012	0.008
17.H	-0.001	-0.002	0.001	0.000	0.001	0.000	0.045	0.122	-0.068
18.H	0.000	0.002	0.001	0.000	0.002	0.001	-0.028	-0.370	-0.227
19.H	0.000	0.000	0.002	0.000	0.000	0.002	-0.159	-0.019	0.721
20.H	-0.001	-0.001	0.001	-0.001	-0.005	0.002	0.108	0.402	-0.186
21.H	0.001	-0.001	0.000	0.000	0.001	0.000	-0.002	-0.138	-0.098

	3135.470			3138.829			3140.504		
1.C	0.000	-0.001	0.000	0.003	-0.028	0.001	0.000	-0.002	0.000
2.C	0.000	0.002	0.000	-0.009	0.095	0.001	-0.001	0.006	0.000
3.H	-0.001	-0.012	0.007	-0.056	-0.631	0.329	-0.004	-0.042	0.021
4.H	0.003	-0.011	-0.008	0.166	-0.503	-0.342	0.012	-0.037	-0.025
5.H	-0.001	0.003	0.002	-0.023	0.142	0.096	-0.002	0.012	0.008
6.H	-0.001	0.008	-0.005	-0.016	0.190	-0.106	-0.001	0.012	-0.007
7.O	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000
8.Re	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000
9.O	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000
10.O	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000
11.N	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000
12.C	-0.010	-0.027	0.015	0.001	0.003	-0.002	-0.013	-0.036	0.019
13.C	0.003	0.040	0.023	0.000	-0.003	-0.001	0.003	0.032	0.015
14.C	0.001	-0.003	-0.007	0.001	0.000	-0.003	-0.012	-0.002	0.052
15.C	0.012	0.045	-0.019	0.000	0.000	0.001	-0.006	-0.023	0.007
16.C	-0.001	-0.033	-0.023	0.000	-0.002	-0.002	0.001	0.030	0.020
17.H	0.119	0.321	-0.181	-0.014	-0.038	0.022	0.149	0.402	-0.227
18.H	-0.034	-0.452	-0.275	0.003	0.030	0.018	-0.026	-0.339	-0.202
19.H	-0.015	0.001	0.073	-0.008	-0.001	0.036	0.127	0.016	-0.577
20.H	-0.136	-0.508	0.232	0.001	0.004	-0.002	0.064	0.243	-0.108
21.H	0.004	0.386	0.276	-0.001	0.025	0.017	-0.004	-0.337	-0.242

	3148.633			3155.478			3182.389		
1.C	0.000	0.000	0.000	0.000	-0.001	0.000	0.012	-0.096	0.000
2.C	0.000	-0.001	0.000	0.000	0.001	0.000	0.003	-0.028	-0.001
3.H	0.001	0.007	-0.003	-0.001	-0.011	0.005	0.016	0.183	-0.098
4.H	-0.001	0.003	0.002	0.002	-0.006	-0.005	-0.049	0.149	0.103
5.H	0.000	0.001	0.001	0.000	0.001	0.000	-0.074	0.515	0.354
6.H	0.000	0.001	-0.001	0.000	0.006	-0.003	-0.061	0.622	-0.353
7.O	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000
8.Re	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000
9.O	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000
10.O	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000
11.N	0.000	0.002	0.000	0.000	0.000	0.001	0.000	0.000	0.000
12.C	-0.015	-0.040	0.026	-0.015	-0.039	0.024	0.000	0.000	0.000
13.C	-0.002	-0.031	-0.022	-0.002	-0.034	-0.021	0.000	0.000	0.000
14.C	0.000	0.003	0.001	0.006	0.001	-0.027	0.000	0.000	0.000
15.C	-0.010	-0.035	0.018	0.009	0.034	-0.016	0.000	0.000	0.000
16.C	0.000	-0.039	-0.031	0.000	0.037	0.028	0.000	0.000	0.000
17.H	0.171	0.458	-0.262	0.162	0.435	-0.250	-0.002	-0.004	0.002
18.H	0.027	0.354	0.219	0.028	0.371	0.228	0.000	0.000	0.000
19.H	0.002	-0.003	-0.011	-0.064	-0.008	0.290	0.000	0.000	0.000
20.H	0.107	0.392	-0.183	-0.101	-0.374	0.174	0.001	0.000	0.000
21.H	0.004	0.452	0.327	-0.004	-0.408	-0.296	0.000	-0.002	-0.001

List of All Frequencies:

Intensities
==========

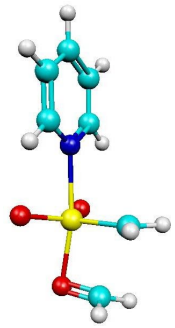
Frequency cm-1	Dipole Strength 1e-40 esu2 cm2	Absorption Intensity (degeneracy not counted) km/mole
-77.732594	606.281463	-11.812873
-6.963770	0.000000	0.000000
42.526691	46.059638	0.490976
66.068973	302.730086	5.013387
118.314753	263.384310	7.811004
138.081307	42.047594	1.455305
172.127439	10.570591	0.456066
193.815072	20.354812	0.988855
199.573974	2.066351	0.103368
249.320305	32.292278	2.018062
255.657157	310.772100	19.914896
327.622842	23.197617	1.905003
339.292701	15.273071	1.298910
370.317126	7.628730	0.708115
379.999627	78.651721	7.491512
429.089646	55.831704	6.004917

479.123400	15.492933	1.860626
639.376304	47.400199	7.596522
644.110504	4.449943	0.718444
686.231207	327.622072	56.353603
743.756005	228.071200	42.518605
820.985054	14.904407	3.067101
855.067628	6.116226	1.310877
909.152215	256.338802	58.415624
926.682570	13.988649	3.249263
945.096362	792.819055	187.814121
951.256867	208.392260	49.688680
956.234186	111.838327	26.806061
978.544785	10.155142	2.490834
981.965283	50.324319	12.386600
983.977673	57.765353	14.247240
1009.641543	100.279556	25.378017
1038.435206	2.246419	0.584720
1055.105541	143.096116	37.844417
1063.790958	93.540770	24.942232
1078.647416	17.252061	4.664430
1167.494311	5.577642	1.632238
1204.165689	11.195890	3.379270
1215.905836	41.696684	12.708068
1292.870246	1.562113	0.506227
1308.136834	88.395389	28.984169
1347.979146	11.717261	3.959017
1422.212642	67.201144	23.956274
1443.218458	128.873702	46.620234
1472.593292	6.821991	2.518095
1555.950277	70.691599	27.570306
1562.564901	1.486562	0.582236
1596.782565	83.071845	33.248933
3037.872943	2.533016	1.928793
3070.713467	15.030350	11.568751
3127.908958	0.345638	0.270990
3135.470119	3.080816	2.421288
3138.829363	1.005069	0.790755
3140.504139	32.669487	25.716967
3148.632908	24.030111	18.965132
3155.478288	1.262658	0.998686
3182.389194	20.766997	16.565520

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

1315.5949	4043.0819	4372.0308
-0.1847	-0.9243	0.3339
-0.0186	-0.3364	-0.9415
0.9826	-0.1801	0.0450

TS(IIb-IVa)



CCSD=-629.6562186

ATOMS cartesian

Re	0.056703	0.216095	0.005296
O	1.770129	-0.924163	0.014578
C	0.929276	1.942365	0.030283
C	2.476545	0.165800	-0.049403
H	2.954441	0.542971	0.869013
H	2.874131	0.485517	-1.026223
H	1.174904	2.461202	0.967155
H	1.171142	2.507088	-0.880120
O	-0.417336	-0.357744	1.562942
O	-0.393148	-0.331446	-1.569800
N	-1.988388	1.061119	-0.006466
C	-2.636935	1.265434	-1.173185
C	-3.915953	1.798319	-1.209269
C	-4.549507	2.131138	-0.014689
C	-3.877912	1.909258	1.184291
C	-2.601820	1.369226	1.157114
H	-2.051325	1.148555	2.068957
H	-2.111752	0.963472	-2.076981
H	-4.409290	1.933544	-2.171610
H	-5.558800	2.546410	-0.018697
H	-4.339373	2.139163	2.144358

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)

	-61.808			25.711			41.651		
1.Re	-0.032	0.074	0.003	0.001	-0.005	0.022	0.003	0.001	-0.004
2.O	-0.048	-0.248	0.018	0.011	0.025	0.119	-0.012	-0.010	-0.015
3.C	-0.103	0.065	0.017	0.006	-0.005	0.024	0.023	-0.006	-0.199
4.C	0.184	-0.508	-0.067	-0.030	0.030	-0.333	0.002	-0.009	0.078
5.H	0.180	-0.405	-0.100	0.198	0.258	-0.545	-0.068	-0.044	0.128
6.H	0.075	-0.482	-0.111	-0.276	-0.206	-0.510	0.092	0.006	0.120
7.H	-0.065	0.041	0.022	0.051	-0.057	0.042	0.039	0.102	-0.263
8.H	-0.061	0.054	0.019	-0.037	0.045	0.044	0.015	-0.114	-0.268
9.O	0.133	0.083	0.068	-0.024	-0.025	0.006	0.068	0.148	0.071
10.O	0.141	0.095	-0.064	0.022	0.008	0.011	-0.088	-0.135	0.071
11.N	0.018	-0.073	0.002	-0.001	-0.002	-0.006	0.002	0.016	0.017
12.C	0.026	-0.073	-0.006	0.034	0.052	-0.016	0.080	0.186	0.001
13.C	0.024	-0.082	-0.005	0.039	0.064	-0.031	0.079	0.182	-0.008
14.C	0.015	-0.089	-0.008	0.004	0.011	-0.034	-0.015	-0.021	-0.001
15.C	0.007	-0.098	-0.005	-0.033	-0.046	-0.024	-0.097	-0.197	0.011
16.C	0.010	-0.088	0.006	-0.034	-0.049	-0.011	-0.082	-0.164	0.018
17.H	0.013	-0.086	0.003	-0.060	-0.089	-0.004	-0.134	-0.287	0.021
18.H	0.043	-0.056	-0.001	0.055	0.083	-0.014	0.137	0.318	-0.010
19.H	0.031	-0.078	-0.008	0.069	0.112	-0.039	0.150	0.330	-0.023
20.H	0.015	-0.090	-0.012	0.005	0.015	-0.046	-0.024	-0.043	-0.009
21.H	0.000	-0.108	-0.005	-0.062	-0.090	-0.028	-0.171	-0.361	0.015

	83.941			132.993			177.253		
1.Re	0.026	0.009	0.000	0.003	-0.001	0.053	0.014	0.017	-0.001
2.O	-0.113	-0.077	0.020	-0.007	-0.012	-0.488	-0.082	-0.003	0.003
3.C	0.278	-0.102	0.020	0.016	-0.007	0.076	0.290	-0.107	-0.005
4.C	-0.076	-0.061	-0.017	0.001	0.005	-0.158	-0.081	0.036	0.009
5.H	0.007	-0.127	-0.036	0.033	-0.291	-0.053	-0.031	-0.039	0.011
6.H	-0.031	-0.158	-0.027	-0.019	0.301	-0.069	-0.019	-0.032	0.014
7.H	0.336	-0.147	0.029	0.099	-0.076	0.093	0.384	-0.154	-0.006
8.H	0.342	-0.113	0.031	-0.060	0.057	0.097	0.386	-0.154	-0.007
9.O	-0.109	0.051	-0.029	0.163	-0.043	0.081	0.025	0.088	0.033
10.O	-0.073	0.075	0.008	-0.173	0.046	0.084	0.026	0.092	-0.035
11.N	0.040	0.185	-0.009	-0.004	0.010	0.084	-0.115	-0.188	0.006
12.C	0.001	0.099	-0.002	0.084	-0.045	0.024	-0.120	-0.175	0.008

13.C	-0.086	-0.109	0.006	0.088	-0.055	-0.117	-0.045	0.006	0.000
14.C	-0.138	-0.224	0.010	-0.011	-0.006	-0.186	0.024	0.168	-0.008
15.C	-0.075	-0.075	0.002	-0.106	0.056	-0.119	-0.038	0.009	-0.002
16.C	0.012	0.129	-0.008	-0.095	0.062	0.021	-0.117	-0.180	0.004
17.H	0.047	0.222	-0.007	-0.165	0.110	0.078	-0.152	-0.266	0.005
18.H	0.028	0.166	-0.009	0.154	-0.088	0.081	-0.154	-0.252	0.013
19.H	-0.118	-0.195	0.010	0.174	-0.103	-0.168	-0.030	0.053	-0.001
20.H	-0.219	-0.420	0.020	-0.015	-0.017	-0.285	0.112	0.384	-0.016
21.H	-0.097	-0.132	0.005	-0.194	0.098	-0.171	-0.017	0.058	-0.003

	198.890			230.208			242.203		
1.Re	-0.091	0.040	0.000	0.002	-0.002	-0.030	0.009	-0.066	0.006
2.O	-0.068	0.068	-0.017	0.001	-0.004	0.024	-0.109	-0.035	-0.031
3.C	0.189	-0.080	0.004	-0.007	-0.003	0.300	-0.212	0.003	-0.024
4.C	-0.130	0.125	0.009	-0.014	0.005	-0.001	-0.265	0.116	-0.002
5.H	-0.107	0.083	0.015	0.068	-0.028	-0.030	-0.275	0.094	0.008
6.H	-0.091	0.119	0.023	-0.106	0.048	-0.024	-0.275	0.140	0.006
7.H	0.276	-0.127	0.007	-0.155	-0.321	0.520	-0.306	0.053	-0.030
8.H	0.288	-0.107	0.015	0.142	0.304	0.534	-0.313	-0.015	-0.059
9.O	-0.010	-0.053	-0.006	0.090	0.171	0.056	0.016	0.386	0.203
10.O	-0.021	-0.071	0.015	-0.080	-0.155	0.041	0.067	0.391	-0.196
11.N	0.188	-0.063	-0.003	-0.002	0.000	-0.041	0.059	-0.006	-0.015
12.C	0.221	-0.076	-0.019	-0.023	0.010	-0.030	0.075	0.016	-0.014
13.C	0.230	-0.099	-0.012	-0.024	0.017	0.003	0.066	-0.018	-0.003
14.C	0.242	-0.124	0.001	-0.002	0.002	0.019	0.062	-0.067	0.008
15.C	0.229	-0.103	0.011	0.019	-0.014	0.003	0.082	-0.023	0.004
16.C	0.223	-0.076	0.014	0.018	-0.008	-0.030	0.088	0.008	-0.010
17.H	0.241	-0.083	-0.001	0.036	-0.013	-0.043	0.109	0.017	-0.022
18.H	0.240	-0.081	-0.004	-0.039	0.017	-0.042	0.087	0.036	-0.013
19.H	0.213	-0.102	-0.003	-0.042	0.030	0.014	0.056	-0.011	0.004
20.H	0.230	-0.154	0.003	-0.002	0.004	0.042	0.041	-0.120	0.019
21.H	0.212	-0.111	0.004	0.037	-0.029	0.016	0.087	-0.020	0.005

	264.730			285.714			314.596		
1.Re	-0.002	-0.004	-0.058	-0.076	-0.032	0.002	0.019	0.018	0.007
2.O	-0.007	0.001	0.229	0.241	0.106	0.002	-0.250	-0.115	0.047
3.C	-0.009	-0.004	0.023	0.184	-0.206	-0.007	-0.046	0.080	-0.022
4.C	-0.029	0.008	0.063	0.211	0.072	0.006	-0.424	0.050	0.038
5.H	-0.046	0.155	0.011	0.138	0.159	0.017	-0.412	0.038	0.033
6.H	-0.015	-0.140	0.020	0.196	0.127	0.011	-0.381	0.010	0.047
7.H	-0.008	-0.068	0.057	0.279	-0.253	-0.009	0.087	0.084	-0.060
8.H	-0.017	0.057	0.058	0.268	-0.261	-0.017	-0.057	0.031	-0.057
9.O	0.144	-0.040	-0.028	0.281	0.024	0.147	0.406	-0.258	0.023
10.O	-0.112	0.066	-0.054	0.254	0.043	-0.136	0.181	-0.114	0.007
11.N	0.007	0.009	0.271	-0.025	0.051	-0.015	-0.017	0.022	-0.068
12.C	0.139	-0.046	0.204	-0.029	0.127	-0.016	-0.052	0.073	-0.058
13.C	0.148	-0.079	-0.008	-0.060	0.072	0.003	-0.070	0.054	-0.012
14.C	0.003	-0.007	-0.113	-0.121	-0.060	0.010	-0.068	-0.018	0.014
15.C	-0.138	0.081	-0.010	-0.047	0.065	-0.008	-0.002	0.025	-0.016
16.C	-0.124	0.065	0.205	-0.014	0.126	-0.015	0.012	0.053	-0.061
17.H	-0.222	0.107	0.280	0.007	0.184	-0.013	0.041	0.071	-0.072
18.H	0.238	-0.081	0.280	-0.021	0.178	-0.030	-0.067	0.109	-0.082
19.H	0.280	-0.161	-0.086	-0.053	0.084	0.000	-0.093	0.076	0.002
20.H	-0.001	-0.018	-0.264	-0.183	-0.209	0.025	-0.095	-0.082	0.053
21.H	-0.274	0.154	-0.092	-0.026	0.069	0.002	0.034	0.017	0.004

	322.118			383.350			434.100		
1.Re	-0.002	-0.005	0.013	0.000	0.000	-0.001	-0.010	-0.005	0.001
2.O	0.063	0.036	0.193	-0.001	0.000	0.004	0.045	-0.022	-0.001
3.C	0.006	-0.014	-0.022	0.000	0.000	0.003	-0.014	-0.020	-0.003
4.C	0.125	-0.025	0.058	0.000	0.000	0.004	-0.017	0.014	0.000
5.H	0.046	0.128	0.037	0.003	-0.002	0.003	-0.036	0.046	-0.001
6.H	0.198	-0.181	0.037	-0.004	0.002	0.003	-0.032	0.043	0.003
7.H	0.214	-0.007	-0.084	0.016	0.008	-0.006	-0.027	-0.015	-0.003
8.H	-0.257	0.001	-0.085	-0.015	-0.007	-0.006	-0.032	-0.021	-0.008
9.O	0.255	-0.147	0.039	-0.001	-0.002	-0.004	0.041	-0.006	0.017
10.O	-0.485	0.290	0.050	0.000	0.006	-0.005	0.034	-0.002	-0.014
11.N	0.007	-0.016	-0.173	0.002	0.002	0.004	0.125	0.302	-0.016
12.C	-0.069	0.002	-0.151	-0.075	-0.184	0.016	-0.021	-0.040	0.000
13.C	-0.070	0.015	-0.048	0.075	0.176	-0.010	-0.072	-0.163	0.010
14.C	0.028	-0.001	0.013	0.001	0.005	-0.002	0.090	0.226	-0.012
15.C	0.106	-0.049	-0.046	-0.078	-0.181	0.009	-0.069	-0.159	0.006
16.C	0.092	-0.054	-0.152	0.074	0.179	-0.004	-0.023	-0.048	0.001
17.H	0.144	-0.088	-0.192	0.195	0.479	-0.006	-0.073	-0.180	0.000
18.H	-0.122	0.026	-0.188	-0.195	-0.476	0.043	-0.065	-0.158	0.014
19.H	-0.145	0.049	-0.006	0.155	0.362	-0.025	-0.170	-0.392	0.028
20.H	0.037	0.019	0.105	0.003	0.010	-0.008	0.214	0.526	-0.026
21.H	0.179	-0.079	-0.005	-0.156	-0.365	0.015	-0.165	-0.387	0.015

	516.488			619.256			638.637		
1.Re	-0.007	0.026	0.000	0.000	0.001	0.003	0.000	0.000	0.003
2.O	0.443	-0.377	0.003	0.009	-0.012	-0.019	-0.005	0.006	0.004
3.C	0.017	-0.011	-0.007	-0.003	0.000	-0.045	-0.002	0.000	-0.114
4.C	-0.239	0.052	0.019	-0.010	0.000	-0.034	0.004	-0.001	0.008

5.H	-0.304	0.260	-0.026	-0.521	0.357	0.079	0.144	-0.090	-0.026
6.H	-0.494	0.371	0.017	0.500	-0.334	0.059	-0.140	0.085	-0.020
7.H	0.035	0.027	-0.032	0.022	-0.314	0.126	-0.625	-0.209	0.174
8.H	0.140	-0.090	-0.026	-0.012	0.300	0.142	0.624	0.198	0.184
9.O	-0.052	0.011	-0.037	-0.010	-0.001	0.004	0.007	-0.028	0.011
10.O	-0.059	0.020	0.036	0.009	0.002	0.007	-0.007	0.028	0.011
11.N	-0.016	-0.050	0.001	0.000	-0.002	0.000	0.003	-0.001	0.001
12.C	-0.007	-0.004	-0.001	0.001	-0.003	0.000	-0.005	-0.002	0.003
13.C	0.000	0.021	0.005	0.003	0.000	0.003	-0.004	0.002	-0.002
14.C	-0.026	-0.016	0.001	-0.001	0.000	0.001	-0.002	0.002	-0.002
15.C	0.001	0.019	-0.008	-0.003	0.001	0.002	0.004	-0.003	-0.006
16.C	-0.005	-0.005	-0.001	-0.001	0.003	-0.002	0.006	0.003	-0.001
17.H	-0.002	0.033	0.005	-0.002	0.002	-0.001	0.001	-0.004	0.001
18.H	-0.007	0.031	-0.011	0.002	0.003	-0.002	-0.005	0.005	0.001
19.H	0.026	0.061	-0.004	0.005	0.005	0.003	0.001	0.003	-0.005
20.H	-0.029	-0.022	0.003	-0.001	0.001	-0.003	-0.002	0.001	0.005
21.H	0.029	0.060	-0.004	-0.001	-0.001	0.003	0.002	-0.010	-0.005

	643.748			647.444			683.012		
1.Re	-0.004	0.001	0.000	0.002	-0.001	0.000	0.000	-0.001	0.000
2.O	-0.012	0.011	-0.003	0.009	-0.009	-0.002	-0.002	0.003	0.000
3.C	0.004	0.013	0.010	-0.002	-0.006	0.002	0.005	0.010	0.000
4.C	-0.003	-0.001	-0.002	0.002	0.001	-0.002	0.001	-0.001	0.000
5.H	-0.027	0.015	0.005	-0.022	0.016	0.004	0.003	-0.004	0.000
6.H	0.018	-0.012	0.003	0.028	-0.016	0.003	0.000	-0.002	-0.001
7.H	0.044	0.032	-0.011	0.035	-0.021	0.001	0.024	0.008	-0.004
8.H	-0.055	0.009	-0.010	-0.020	0.001	0.002	0.022	0.005	0.001
9.O	-0.020	0.005	0.010	0.000	0.003	0.000	-0.002	0.001	-0.001
10.O	-0.005	-0.004	-0.004	0.020	-0.005	0.010	-0.002	0.000	0.001
11.N	0.268	-0.103	0.082	-0.190	0.081	0.109	-0.052	-0.131	0.006
12.C	-0.080	0.048	0.301	-0.200	0.094	0.056	0.044	0.098	-0.007
13.C	-0.135	0.060	0.061	-0.203	0.062	-0.342	-0.052	-0.131	0.012
14.C	-0.287	0.112	-0.090	0.201	-0.088	-0.121	0.023	0.063	-0.003
15.C	0.141	-0.073	-0.346	0.186	-0.087	-0.047	-0.057	-0.129	0.005
16.C	0.165	-0.081	-0.038	0.149	-0.045	0.300	0.039	0.095	-0.006
17.H	-0.081	0.046	0.140	0.232	-0.069	0.248	0.197	0.494	-0.006
18.H	-0.237	0.109	0.194	0.025	0.026	0.209	0.194	0.481	-0.045
19.H	0.197	-0.089	-0.133	-0.244	0.085	-0.322	0.060	0.147	-0.006
20.H	-0.278	0.140	0.168	0.213	-0.059	0.236	0.207	0.511	-0.028
21.H	0.294	-0.116	-0.266	-0.107	0.055	-0.225	0.063	0.154	-0.005

	704.623			724.532			749.587		
1.Re	0.000	0.001	0.000	-0.021	-0.037	-0.001	-0.002	-0.002	0.000
2.O	0.001	-0.003	0.010	0.022	-0.024	0.001	-0.001	0.001	0.000
3.C	-0.004	-0.009	-0.086	0.182	0.465	-0.002	0.006	0.016	0.000
4.C	0.001	0.002	0.033	0.021	0.006	0.001	0.002	0.001	0.000
5.H	0.247	-0.203	-0.008	0.056	-0.041	0.000	0.004	0.000	-0.001
6.H	-0.236	0.190	0.002	0.034	-0.018	0.001	0.003	0.000	0.000
7.H	0.362	-0.507	0.095	0.379	0.430	-0.017	-0.002	0.021	0.000
8.H	-0.389	0.483	0.118	0.337	0.525	0.057	0.005	0.022	0.002
9.O	-0.016	-0.007	0.009	0.006	0.016	0.022	0.004	0.000	0.001
10.O	0.017	0.006	0.010	0.010	0.018	-0.018	0.003	0.000	-0.001
11.N	0.001	0.000	0.000	-0.002	0.005	0.000	0.048	0.116	-0.006
12.C	0.001	0.000	0.001	0.002	0.007	-0.004	-0.037	-0.091	0.004
13.C	0.001	0.000	0.001	0.002	0.002	-0.003	0.005	0.006	-0.002
14.C	-0.001	0.000	0.000	0.009	0.007	0.000	-0.040	-0.104	0.006
15.C	-0.001	0.000	0.000	-0.001	0.004	0.005	0.003	0.007	0.003
16.C	-0.001	-0.001	0.001	0.000	0.006	0.003	-0.041	-0.095	0.004
17.H	0.001	0.004	0.000	-0.015	-0.033	0.003	0.071	0.173	-0.001
18.H	-0.001	0.000	0.000	-0.018	-0.040	0.000	0.064	0.153	-0.018
19.H	0.002	-0.001	0.001	-0.035	-0.069	0.005	0.225	0.546	-0.038
20.H	0.000	0.001	-0.002	-0.015	-0.052	0.001	0.162	0.384	-0.022
21.H	0.001	0.004	0.000	-0.036	-0.066	0.005	0.231	0.556	-0.019

	853.512			932.826			933.782		
1.Re	0.000	0.000	0.001	0.002	-0.001	-0.072	-0.001	0.001	-0.003
2.O	0.000	0.000	0.000	-0.001	0.016	-0.003	0.001	-0.010	0.000
3.C	-0.001	-0.001	-0.002	-0.099	0.019	0.049	0.059	-0.012	0.002
4.C	0.000	0.000	0.000	0.001	-0.009	-0.007	-0.001	0.005	-0.001
5.H	-0.003	0.002	0.000	-0.055	0.039	0.001	0.007	-0.006	-0.001
6.H	0.003	-0.001	0.001	0.015	-0.004	-0.002	0.018	-0.012	0.001
7.H	-0.007	-0.007	0.003	0.446	-0.052	-0.055	-0.246	0.122	0.009
8.H	0.013	0.002	0.004	0.381	-0.348	-0.048	-0.246	0.111	-0.004
9.O	0.002	0.001	-0.005	-0.117	-0.133	0.388	-0.006	-0.011	0.027
10.O	-0.002	-0.001	-0.005	0.114	0.143	0.428	0.004	0.001	0.009
11.N	0.000	0.000	0.000	-0.005	0.008	0.000	-0.009	-0.023	0.001
12.C	0.030	0.071	-0.008	-0.014	-0.023	0.009	0.036	0.077	-0.011
13.C	0.027	0.065	-0.005	0.030	0.025	0.009	-0.011	-0.024	-0.001
14.C	0.001	0.003	0.003	0.001	-0.001	-0.005	-0.032	-0.050	0.003
15.C	-0.026	-0.063	0.003	-0.023	-0.025	0.003	-0.019	-0.038	0.005
16.C	-0.031	-0.074	0.000	0.012	0.020	-0.004	0.042	0.086	0.003
17.H	0.169	0.428	-0.002	0.032	-0.120	-0.047	-0.196	-0.544	-0.001
18.H	-0.163	-0.417	0.040	-0.035	0.132	-0.050	-0.192	-0.501	0.045
19.H	-0.208	-0.499	0.036	-0.032	-0.173	0.015	0.062	0.142	-0.016
20.H	-0.007	-0.018	0.004	0.001	-0.002	-0.049	0.120	0.321	-0.021
21.H	0.203	0.478	-0.017	0.046	0.163	-0.009	0.089	0.222	-0.005

	934.412			954.808			956.789		
1.Re	0.004	0.000	0.007	0.033	0.038	-0.002	0.001	0.001	-0.004
2.O	0.001	0.018	0.000	0.020	-0.012	0.000	0.000	-0.001	0.000
3.C	-0.136	0.031	-0.004	0.015	0.024	0.001	0.002	-0.001	0.002
4.C	0.001	-0.011	0.003	-0.004	-0.003	0.000	0.000	0.000	0.000
5.H	-0.016	0.013	0.002	-0.063	0.027	0.017	-0.006	0.005	0.001
6.H	-0.040	0.024	-0.003	-0.060	0.024	-0.012	0.002	-0.001	0.000
7.H	0.574	-0.289	-0.015	0.006	0.030	0.010	-0.015	0.011	0.001
8.H	0.568	-0.256	0.006	0.005	0.019	-0.014	-0.005	-0.001	0.000
9.O	0.003	0.013	-0.034	-0.204	-0.243	0.580	-0.012	-0.015	0.039
10.O	-0.020	-0.014	-0.048	-0.186	-0.221	-0.551	0.001	0.002	0.009
11.N	-0.012	0.001	0.000	0.067	-0.020	-0.001	0.001	-0.003	0.002
12.C	0.019	0.036	0.001	-0.020	-0.046	-0.042	0.041	0.094	-0.011
13.C	-0.004	-0.015	0.006	-0.024	0.042	-0.053	-0.038	-0.084	0.002
14.C	-0.015	-0.025	0.002	-0.003	0.017	-0.002	-0.003	-0.006	0.003
15.C	0.000	-0.012	-0.005	-0.045	0.001	0.053	0.037	0.087	-0.003
16.C	0.017	0.032	-0.004	0.003	0.006	0.047	-0.038	-0.086	0.003
17.H	-0.087	-0.224	-0.003	0.018	0.003	0.042	0.173	0.452	0.002
18.H	-0.080	-0.245	0.035	0.109	0.252	-0.069	-0.193	-0.505	0.048
19.H	0.045	0.084	-0.005	-0.134	-0.113	-0.024	0.162	0.426	-0.029
20.H	0.059	0.155	-0.004	-0.043	-0.072	-0.001	0.013	0.032	0.007
21.H	0.039	0.059	-0.004	-0.043	0.127	0.029	-0.177	-0.436	0.019

	975.899			1013.082			1036.287		
1.Re	0.000	0.000	0.000	-0.003	-0.003	0.000	0.002	0.000	0.000
2.O	-0.001	0.000	0.000	-0.006	0.013	0.000	-0.002	-0.004	0.000
3.C	0.002	-0.002	0.000	-0.021	0.002	0.000	0.006	-0.001	0.000
4.C	0.000	0.000	0.000	-0.003	-0.008	0.001	-0.001	0.009	0.000
5.H	0.000	0.000	0.000	-0.014	0.013	-0.002	0.027	-0.021	-0.003
6.H	0.000	0.001	0.000	-0.015	0.015	0.003	0.029	-0.023	0.001
7.H	-0.008	0.005	-0.001	0.063	-0.032	-0.005	-0.022	0.019	-0.003
8.H	-0.009	0.004	0.001	0.062	-0.030	0.004	-0.018	0.018	0.005
9.O	0.000	0.000	0.000	0.006	0.025	-0.052	-0.001	-0.006	0.012
10.O	0.000	0.000	0.000	0.004	0.024	0.050	-0.001	-0.004	-0.009
11.N	-0.002	-0.013	0.000	0.314	-0.128	-0.001	-0.267	0.116	-0.003
12.C	-0.005	-0.008	0.002	0.101	-0.058	-0.202	0.150	-0.090	-0.245
13.C	0.030	0.076	-0.010	-0.143	0.043	-0.293	0.110	-0.028	0.145
14.C	-0.049	-0.123	0.007	-0.226	0.104	-0.002	-0.301	0.126	-0.001
15.C	0.028	0.070	0.002	-0.136	0.071	0.293	0.103	-0.040	-0.144
16.C	-0.003	-0.004	-0.002	0.111	-0.040	0.205	0.161	-0.068	0.249
17.H	0.029	0.079	-0.002	0.176	-0.065	0.186	0.397	-0.093	0.116
18.H	0.039	0.098	-0.007	0.163	-0.064	-0.190	0.388	-0.098	-0.121
19.H	-0.171	-0.426	0.022	-0.134	0.034	-0.334	0.145	-0.089	0.117
20.H	0.285	0.688	-0.037	-0.269	0.075	-0.003	-0.316	0.125	-0.005
21.H	-0.162	-0.397	0.023	-0.128	0.073	0.332	0.133	-0.104	-0.113

	1063.187			1086.898			1095.732		
1.Re	0.000	-0.001	0.000	0.000	0.000	-0.003	0.002	-0.003	0.000
2.O	-0.002	0.005	0.000	0.000	-0.001	0.001	-0.023	0.049	-0.003
3.C	-0.004	0.000	0.000	-0.001	0.000	0.000	0.031	-0.002	-0.002
4.C	-0.001	-0.004	0.000	-0.001	0.002	0.000	0.060	-0.117	0.006
5.H	-0.008	0.008	0.000	0.008	-0.005	-0.002	-0.492	0.492	0.036
6.H	-0.009	0.008	0.001	0.008	-0.009	0.000	-0.517	0.470	-0.028
7.H	0.011	-0.007	-0.001	0.002	0.000	-0.001	0.002	0.034	-0.013
8.H	0.011	-0.006	0.000	-0.001	-0.002	-0.001	-0.018	0.048	0.013
9.O	0.000	0.004	-0.008	-0.003	-0.003	0.007	-0.003	0.001	-0.004
10.O	0.000	0.004	0.007	0.003	0.003	0.008	-0.003	0.001	0.004
11.N	0.091	-0.037	-0.001	0.003	0.003	0.091	-0.008	0.004	0.001
12.C	-0.010	0.000	-0.111	0.092	-0.047	-0.063	0.002	-0.001	-0.001
13.C	-0.026	0.019	0.111	-0.048	0.019	-0.072	0.001	0.000	0.000
14.C	0.072	-0.036	-0.001	0.001	0.004	0.098	-0.002	0.001	0.001
15.C	-0.031	0.008	-0.110	0.045	-0.026	-0.074	0.002	-0.001	-0.002
16.C	-0.003	0.008	0.113	-0.092	0.043	-0.058	0.000	0.000	-0.001
17.H	-0.190	0.064	0.247	-0.389	0.135	0.135	0.003	-0.005	-0.005
18.H	-0.210	0.049	-0.250	0.389	-0.127	0.126	0.013	-0.006	0.008
19.H	-0.433	0.198	0.352	-0.288	0.116	0.054	0.001	-0.001	0.000
20.H	0.089	-0.021	-0.009	0.009	0.029	0.613	-0.002	0.000	0.007
21.H	-0.451	0.174	-0.359	0.279	-0.104	0.046	0.009	-0.002	0.001

	1160.231			1166.739			1211.096		
1.Re	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.001	0.000	0.000
2.O	-0.004	-0.004	-0.070	0.000	0.000	0.001	-0.001	0.002	0.000
3.C	0.000	0.001	0.000	0.000	0.000	0.000	-0.001	0.001	0.000
4.C	0.004	0.007	0.132	0.000	0.000	-0.001	0.000	-0.002	0.000
5.H	0.340	0.560	-0.256	-0.003	-0.004	0.002	-0.003	0.002	0.000
6.H	-0.323	-0.586	-0.184	0.003	0.005	0.002	-0.002	0.004	0.001
7.H	0.012	-0.013	0.004	0.000	0.000	0.000	0.001	-0.004	0.002
8.H	-0.017	0.009	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	-0.004	-0.002
9.O	0.000	-0.001	0.001	0.000	0.000	0.001	0.000	0.000	0.000
10.O	0.000	0.001	0.000	0.000	0.000	0.001	0.000	0.000	0.000
11.N	0.000	0.000	0.000	0.000	0.001	0.021	0.008	-0.003	0.002
12.C	0.000	0.000	0.000	0.005	-0.002	0.004	-0.049	0.019	-0.065
13.C	0.000	0.000	0.000	-0.032	0.014	0.015	0.040	-0.018	-0.002

14.C	0.000	0.000	-0.001	-0.001	-0.003	-0.059	0.009	-0.004	0.000
15.C	0.000	0.000	0.000	0.032	-0.013	0.015	0.040	-0.018	0.001
16.C	0.000	0.000	0.000	-0.005	0.003	0.005	-0.047	0.025	0.063
17.H	0.000	0.001	0.000	-0.106	0.040	0.074	-0.411	0.161	0.319
18.H	-0.001	0.001	-0.001	0.110	-0.036	0.076	-0.427	0.136	-0.325
19.H	-0.004	0.001	0.002	-0.421	0.187	0.240	0.359	-0.157	-0.183
20.H	0.000	0.000	-0.007	-0.010	-0.030	-0.646	0.011	-0.002	-0.002
21.H	0.004	-0.002	0.003	0.426	-0.165	0.242	0.369	-0.143	0.188

	1297.796			1297.889			1340.785		
1.Re	-0.003	0.003	0.000	0.002	-0.002	0.000	0.000	0.000	-0.001
2.O	-0.153	-0.233	0.015	0.111	0.169	-0.011	0.002	0.003	0.000
3.C	-0.020	0.008	0.001	0.013	-0.007	-0.001	0.010	0.024	0.000
4.C	0.213	0.201	-0.017	-0.155	-0.146	0.013	-0.002	-0.004	0.000
5.H	0.201	0.502	-0.134	-0.143	-0.366	0.097	-0.003	0.001	-0.001
6.H	0.214	0.521	0.087	-0.153	-0.378	-0.063	-0.002	0.001	0.002
7.H	0.003	-0.093	0.047	0.004	0.068	-0.036	-0.048	-0.118	0.089
8.H	0.013	-0.095	-0.049	-0.007	0.078	0.043	-0.047	-0.114	-0.095
9.O	0.003	0.000	-0.002	-0.007	0.005	-0.008	-0.001	-0.001	0.003
10.O	0.006	-0.004	-0.006	0.000	-0.003	-0.006	0.000	0.001	0.004
11.N	0.007	0.004	0.178	0.000	0.017	0.318	0.000	-0.002	-0.032
12.C	-0.089	0.031	-0.082	-0.162	0.057	-0.147	-0.065	0.023	-0.035
13.C	0.072	-0.034	-0.047	0.127	-0.058	-0.081	-0.013	0.006	0.011
14.C	0.000	0.005	0.080	0.003	0.006	0.145	0.001	0.004	0.085
15.C	-0.073	0.029	-0.044	-0.130	0.052	-0.082	0.014	-0.006	0.011
16.C	0.090	-0.040	-0.083	0.158	-0.071	-0.150	0.063	-0.026	-0.034
17.H	0.126	-0.050	-0.099	0.239	-0.105	-0.196	-0.425	0.172	0.312
18.H	-0.138	0.056	-0.112	-0.231	0.081	-0.180	0.435	-0.142	0.311
19.H	-0.065	0.031	0.031	-0.100	0.051	0.047	0.251	-0.112	-0.141
20.H	-0.004	-0.006	-0.135	-0.004	-0.014	-0.245	-0.006	-0.017	-0.358
21.H	0.045	-0.024	0.024	0.092	-0.045	0.046	-0.251	0.099	-0.141

	1342.568			1445.660			1470.265		
1.Re	0.000	0.001	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000
2.O	-0.008	-0.013	0.001	0.000	0.000	0.000	0.001	0.000	0.000
3.C	-0.045	-0.104	-0.002	0.000	0.000	0.000	0.001	-0.001	0.000
4.C	0.012	0.017	-0.001	-0.001	-0.001	0.000	0.002	0.001	0.000
5.H	0.010	-0.002	0.007	0.002	0.001	-0.002	-0.015	-0.013	0.014
6.H	0.006	-0.007	-0.010	0.002	0.001	0.002	-0.015	-0.014	-0.012
7.H	0.212	0.522	-0.395	-0.001	-0.001	0.001	-0.003	0.000	0.000
8.H	0.210	0.500	0.419	-0.001	-0.002	-0.001	-0.004	0.000	-0.001
9.O	0.001	0.001	0.002	0.001	-0.001	0.002	0.001	-0.001	0.003
10.O	0.001	0.001	0.000	-0.001	0.001	0.002	0.001	-0.001	-0.003
11.N	0.001	0.000	-0.008	0.001	-0.007	-0.127	-0.076	0.032	-0.006
12.C	-0.014	0.005	-0.007	-0.115	0.050	0.048	0.078	-0.026	0.098
13.C	-0.003	0.001	0.003	0.158	-0.066	-0.013	0.081	-0.040	-0.099
14.C	0.001	0.001	0.018	0.002	-0.005	-0.069	-0.085	0.035	0.000
15.C	0.002	-0.001	0.003	-0.163	0.068	-0.021	0.077	-0.028	0.098
16.C	0.013	-0.005	-0.007	0.110	-0.043	0.054	0.079	-0.036	-0.093
17.H	-0.097	0.035	0.069	-0.176	0.072	0.278	-0.424	0.172	0.253
18.H	0.088	-0.031	0.065	0.205	-0.060	0.292	-0.418	0.145	-0.236
19.H	0.055	-0.023	-0.031	-0.272	0.132	0.255	-0.382	0.168	0.157
20.H	0.000	-0.004	-0.074	0.012	0.024	0.551	-0.104	0.044	0.011
21.H	-0.050	0.021	-0.028	0.305	-0.118	0.267	-0.369	0.148	-0.148

	1491.409			1563.859			1598.773		
1.Re	-0.001	0.001	0.000	0.000	0.000	-0.001	0.000	0.000	0.000
2.O	-0.011	-0.034	0.001	0.000	0.000	0.000	0.001	0.001	0.000
3.C	-0.002	0.002	0.000	0.000	0.000	-0.001	-0.003	0.000	0.000
4.C	0.099	0.101	-0.006	0.000	0.000	0.000	0.000	-0.001	0.000
5.H	-0.413	-0.360	0.423	-0.001	-0.003	0.002	-0.001	0.002	-0.001
6.H	-0.451	-0.396	-0.369	-0.003	-0.001	-0.002	-0.001	0.003	0.001
7.H	-0.007	-0.027	0.017	0.000	-0.001	0.000	0.006	0.002	-0.004
8.H	-0.005	-0.027	-0.017	-0.001	0.001	0.000	0.006	0.002	0.004
9.O	0.002	0.000	-0.002	-0.002	0.000	0.001	-0.001	0.000	-0.002
10.O	0.001	0.000	0.002	0.002	0.000	0.001	-0.001	0.000	0.002
11.N	0.003	-0.001	0.000	0.001	0.009	0.194	0.111	-0.048	0.002
12.C	-0.002	0.001	-0.002	-0.075	0.021	-0.158	-0.255	0.103	-0.068
13.C	-0.001	0.001	0.001	-0.072	0.044	0.218	0.260	-0.113	-0.069
14.C	0.001	-0.001	0.000	-0.007	-0.019	-0.414	-0.137	0.057	-0.004
15.C	-0.002	0.001	-0.002	0.077	-0.022	0.220	0.263	-0.107	0.075
16.C	-0.001	0.001	0.003	0.077	-0.038	-0.160	-0.252	0.109	0.064
17.H	0.008	-0.002	-0.003	-0.253	0.101	0.069	0.244	-0.104	-0.311
18.H	0.006	-0.002	0.003	0.240	-0.091	0.058	0.254	-0.077	0.311
19.H	0.005	-0.003	-0.002	0.194	-0.077	0.093	-0.249	0.121	0.239
20.H	0.002	0.000	0.001	0.009	0.029	0.602	-0.160	0.067	0.005
21.H	0.008	-0.004	0.004	-0.195	0.086	0.092	-0.257	0.100	-0.240

	2940.629			3016.224			3060.650		
1.Re	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000
2.O	0.001	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.001
3.C	-0.001	-0.002	0.000	0.026	0.059	0.003	0.000	0.000	0.006
4.C	0.045	0.035	-0.003	0.001	0.000	0.000	-0.004	-0.003	-0.104
5.H	-0.290	-0.235	-0.597	-0.007	-0.005	-0.014	0.298	0.237	0.592

6.H	-0.240	-0.199	0.635	-0.007	-0.005	0.017	-0.245	-0.201	0.625
7.H	0.003	0.008	0.016	-0.156	-0.325	-0.623	-0.009	-0.017	-0.031
8.H	0.004	0.007	-0.014	-0.147	-0.340	0.583	0.010	0.021	-0.034
9.O	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000
10.O	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000
11.N	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000
12.C	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000
13.C	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000
14.C	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000
15.C	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000
16.C	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000
17.H	0.001	0.000	0.001	0.002	-0.001	0.002	0.000	0.000	0.000
18.H	0.001	0.000	-0.001	0.000	0.000	0.001	0.000	0.000	0.000
19.H	0.000	0.000	-0.001	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000
20.H	-0.001	0.000	0.000	-0.002	0.001	0.000	0.000	0.000	0.000
21.H	0.000	0.000	0.001	-0.001	0.001	0.003	0.000	0.000	0.000

	3122.929			3122.960			3138.415		
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.C	0.000	-0.003	0.081	0.000	-0.002	0.055	0.000	0.000	0.000
4.C	0.000	0.000	0.004	0.000	0.000	0.003	0.000	0.000	0.000
5.H	-0.014	-0.011	-0.027	-0.010	-0.007	-0.019	0.000	0.000	0.000
6.H	0.011	0.008	-0.027	0.008	0.006	-0.019	0.000	0.000	0.000
7.H	-0.131	-0.271	-0.479	-0.089	-0.184	-0.326	-0.001	-0.001	-0.002
8.H	0.134	0.306	-0.486	0.092	0.209	-0.332	0.001	0.002	-0.002
9.O	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000
10.O	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000
11.N	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.001
12.C	0.001	-0.001	-0.003	-0.002	0.001	0.004	-0.016	0.009	0.029
13.C	0.008	-0.002	0.013	-0.012	0.004	-0.019	-0.027	0.007	-0.056
14.C	-0.041	0.017	0.000	0.059	-0.024	0.000	-0.009	0.004	0.004
15.C	0.007	-0.003	-0.012	-0.011	0.005	0.017	0.019	-0.009	-0.039
16.C	0.001	0.000	0.003	-0.002	0.001	-0.003	0.008	-0.003	0.014
17.H	-0.017	0.007	-0.029	0.022	-0.009	0.037	-0.104	0.041	-0.174
18.H	-0.018	0.011	0.032	0.025	-0.014	-0.045	0.194	-0.110	-0.336
19.H	-0.086	0.024	-0.165	0.123	-0.034	0.235	0.324	-0.089	0.633
20.H	0.467	-0.193	0.002	-0.680	0.280	-0.003	0.096	-0.040	-0.003
21.H	-0.073	0.036	0.148	0.108	-0.054	-0.220	-0.218	0.109	0.451

	3141.786			3153.626			3159.095		
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.C	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	0.001	0.000	0.000	-0.001
6.H	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	-0.001	0.002
7.H	-0.001	-0.001	-0.002	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000
8.H	0.000	0.000	0.001	0.000	-0.001	0.002	-0.001	-0.003	0.004
9.O	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000
10.O	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000
11.N	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	-0.001	0.001	0.000	0.000
12.C	-0.013	0.008	0.025	-0.035	0.019	0.055	0.016	-0.009	-0.027
13.C	-0.012	0.003	-0.029	0.020	-0.006	0.034	-0.011	0.003	-0.020
14.C	-0.034	0.014	-0.001	0.007	-0.003	-0.002	-0.014	0.006	-0.001
15.C	-0.023	0.012	0.054	-0.008	0.004	0.011	-0.018	0.009	0.032
16.C	-0.015	0.006	-0.029	0.021	-0.008	0.031	0.037	-0.014	0.057
17.H	0.197	-0.077	0.329	-0.223	0.087	-0.366	-0.398	0.155	-0.650
18.H	0.161	-0.091	-0.279	0.372	-0.209	-0.634	-0.176	0.099	0.301
19.H	0.154	-0.042	0.305	-0.199	0.055	-0.383	0.115	-0.032	0.221
20.H	0.370	-0.152	0.002	-0.074	0.031	0.002	0.143	-0.059	0.001
21.H	0.282	-0.141	-0.591	0.063	-0.031	-0.128	0.176	-0.087	-0.359

List of All Frequencies:

Intensities
==========

Frequency cm-1	Dipole Strength 1e-40 esu2 cm2	Absorption Intensity (degeneracy not counted) km/mole
-61.807954	119.807577	-1.856123
25.710542	1562.397778	10.068874
41.651486	48.568368	0.507063
83.940805	301.059382	6.334369
132.993011	7.918403	0.263964
177.253122	4.138973	0.183893
198.890345	369.053325	18.398435
230.207509	38.198161	2.204144
242.203239	5.279698	0.320529
264.729843	1.314565	0.087229
285.714147	158.226051	11.331510
314.595839	458.771201	36.176554
322.117913	89.183686	7.200760

383.349707	0.329897	0.031699
434.100341	65.261029	7.101043
516.488067	983.783954	127.361480
619.256311	3.153937	0.489555
638.637366	3.315138	0.530682
643.748418	25.258182	4.075645
647.444062	13.482403	2.188002
683.011694	286.167783	48.992201
704.623008	4.944828	0.873346
724.532291	23.361043	4.242561
749.586882	275.650148	51.791475
853.512241	4.767245	1.019895
932.826068	509.629164	119.160692
933.781998	28.919542	6.768851
934.411721	234.168493	54.845981
954.807877	92.008821	22.020315
956.789109	3.849151	0.923122
975.899370	0.331831	0.081171
1013.082059	78.427210	19.915420
1036.287157	10.043034	2.608694
1063.186510	100.328749	26.737015
1086.898387	17.826998	4.856744
1095.732035	65.764067	18.062218
1160.230501	5.769103	1.677763
1166.739030	4.610813	1.348433
1211.095726	52.154641	15.832500
1297.796256	116.356640	37.850861
1297.888802	47.507261	15.455233
1340.785081	20.184192	6.783418
1342.568069	70.768057	23.815059
1445.659501	130.938306	47.447223
1470.265318	17.653150	6.505729
1491.408597	20.491829	7.660470
1563.858539	1.006258	0.394444
1598.773127	61.066901	24.472075
2940.629390	1.077539	0.794239
3016.224004	49.113931	37.131831
3060.649894	0.302849	0.232337
3122.928949	21.611425	16.917009
3122.960288	10.395134	8.137193
3138.415053	5.479672	4.310652
3141.785943	32.364245	25.487084
3153.625933	20.488991	16.196039
3159.094515	3.265863	2.586060

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

907.3491	4229.8701	4516.9584
0.9368	0.0132	-0.3496
-0.3499	0.0403	-0.9359
0.0017	0.9991	0.0423

Corrections of the internal energy to Gibbs free energy was done using a worksheet in Mathcad 2000. A sample is shown below for the species IIa. The structural and frequency values were imported from the *ab initio* results. The final results are then referenced to the internal energy and Gibbs free energy of I.

This worksheet calculates the translational, rotational, and vibrational entropy of a molecule, as well as the heat capacity. The translational and rotational contributions are treated classically but the vibrational part requires explicit entry of the vibrational frequencies (with a scaling factor). Internal rotors are treated as free rotors.

The primary reference is:

G. Herzberg, Molecular Spectra and Molecular Structure II: Infrared and Raman Spectra of Polyatomic Molecules, Chapter V, Van Nostrand Reinhold Co: New York, 1945, pp.501-530.

$E := -2.21$	electronic internal energy (without ZPE) in kcal/mol
$T := 300$	absolute temperature in Kelvin
$n := 57$	the number of normal modes, 3N-6

Molecule 062_F **metallaoxetane, oxygen cis to pyridine**

$M := 342$	molecular weight in atomic mass units for the complex with the ^{187}Re isotope
$I_{A1} := 1180.4561$	moments of inertia in atomic units
$I_{B1} := 3787.3006$	(amu bohr^2), from DFT calculations
$I_{C1} := 4482.1163$	
$I_{rotor} := 84$	moment of inertia for a free pyridine rotor attached to a much heavier fragment in (amu Å^2)

Unit conversion for the moments of inertia from atomic units to spectroscopy units (amu Å^2)

$I_A := I_{A1} \cdot 0.2801$

$I_B := I_{B1} \cdot 0.2801$

$I_C := I_{C1} \cdot 0.2801$

The translational entropy is given classically by the Sackur-Tetrode equation, which in a form with constants matching the units above, is equation V,68 on page 521 of Herzberg. The units are (cal mol^{-1} K^{-1}) or eu.

$S_{trans} := 2.2868(5 \cdot \log(T, 10) + 3 \cdot \log(M, 10)) - 2.3135$

$S_{trans} = 43.394$

For the rotational entropy, the molecule's symmetry number has to be considered, in principle. See Herzberg page 508. The symmetry number is designated as σ. However, as noted on page 509, the effect on the entropy at normal temperatures is negligible, so nuclear spin statistics will be ignored in this calculation. The classical rotational entropy for an asymmetric top can be expressed approximately according to equation V,76 on page 521 of Herzberg. The units are (cal mol^{-1} K^{-1}).

$S_{rot} := 2.2868\left(3 \cdot \log(T, 10) + \log\left(I_A \cdot I_B \cdot I_C, 10\right)\right) - 5.3838$

$S_{rot} = 31.377$

If the pyridine ligand is treated as a free rotor, it makes a significant contribution to the heat capacity and entropy. The rotational potential is close to (or exactly) a six-fold potential, which means that the rotational barriers are necessarily very small, not matter what the interactions, stereoelectronic or steric, are. Accordingly, the classical expression can be used. Taking equation V,86 on page 524 of Herzberg, and using n = 6, and again ignoring the nuclear spin statistics, we get, with units of (cal mol^{-1} K^{-1}):

$S_{rotor} := 2.2868\left(\log(T, 10) + \log\left(I_{rotor}, 10\right) - 2 \cdot \log(6, 10) - 39.780\right) + 89.932$

$S_{rotor} = 5.469$

The computed harmonic vibrational frequencies for the complex are listed below. For subsequent calculations, the frequencies are multiplied by a scaling factor, normally 0.90. The lowest frequency vibration is taken to be the torsional mode that becomes the free rotor. In computation of the zero point energy, the torsional frequency is used, but in calculation of the heat capacity and entropy, it is omitted and replaced with an adiabatic free rotor. It should be noted that the index describing the elements of the one-dimensional array, raw_freq, starts with zero, not one.

$$\text{raw_freq} := \begin{pmatrix} -45.03314 \\ 1.896596 \\ 75.889147 \\ 120.991202 \\ 132.003 \\ 183.816505 \\ 184.545932 \\ 199.335905 \\ 249.087659 \\ 256.351997 \\ 316.08985 \\ 379.232866 \\ 411.56679 \\ 422.323879 \\ 530.983065 \\ 642.807848 \\ 651.159794 \\ 673.093391 \\ 706.722042 \\ 724.859751 \\ 743.517484 \\ 845.077584 \\ 870.301328 \\ 928.254661 \\ 962.496613 \\ 962.923839 \\ 970.546449 \\ 976.052946 \\ 993.772755 \\ 997.679491 \\ 1012.750638 \\ 1032.801254 \\ 1056.200537 \\ 1085.972574 \\ 1103.23221 \\ 1135.031636 \\ 1169.349465 \\ 1183.830473 \\ 1207.612914 \\ 1300.445018 \\ 1321.123764 \\ 1341.48784 \\ 1410.935762 \end{pmatrix}$$

The frequencies must be scaled to make an approximate correction for anharmonicity. The scaling factor depends on the temperature range of interest. In the vicinity of room temperature, a scaling factor of 0.90 is appropriate.

$$\omega := 0.90\,\text{raw_freq}$$

$$ZPE := 1.4296\,10^{-3}\cdot\sum_{i=1}^{n-1}\omega_i$$

$ZPE = 86.054$ in units of kcal/mol is the zero-point energy

For the calculation of the vibrational contribution to the total entropy, a classical approximation is not appropriate except at very high temperatures. Because the lowest of the scaled harmonic frequencies has been replaced by a free rotor and treated separately, the summations over 3N-6 normal modes cover elements 1 to 3N-5 rather than 0 to 3N-5 in the vector.

In the useful spectroscopist's units, R = 1.9863 cal mol^{-1} K^{-1}, Rhc/k = 2.858 cal cm^{-1}., and hc/k = 1.439 cm K. With these constants, the vibrational entropy is given by equation V,82 on page 522 of Herzberg, again with units of cal mol^{-1} K^{-1}.

$$S_{vib} := -1.9863\left[\sum_{i=1}^{n-1}\left(\ln\left(1-\exp\left(-\omega_i\cdot\frac{1.439}{T}\right)\right)\right)\right]+\frac{2.858}{T}\cdot\left[\sum_{i=1}^{n-1}\left[\frac{\left(\omega_i\cdot\exp\left(-\omega_i\cdot\frac{1.439}{T}\right)\right)}{\left(1-\exp\left(-\omega_i\cdot\frac{1.439}{T}\right)\right)}\right]\right]$$

$S_{vib} = 44.203$

To get from internal energy (corrected for ZPE) to free energy, we need not only the entropy, but also the conversion of internal energy to enthalpy, which is dependent on the frequencies and the temperature. In this conversion, given in equation V,42 on page 513 of Herzberg, the contribution of the free rotor will also be treated separately by dropping the lowest frequency from the list of harmonic frequencies, and adding one more term to the internal heat content, V,46, corresponding to V,58 on page 517 of Herzberg. The first term is the rotational contribution. The second is due to the internal rotor. The last term is from the vibrations. Units are cal mol^{-1}.

$$H_{int} := (1.9863\,T)+\left[\frac{(1.9863\,T)}{2}\right]+2.858\left[\sum_{i=1}^{n-1}\frac{\left(\omega_i\cdot\exp\left(-\omega_i\cdot\frac{1.439}{T}\right)\right)}{\left(1-\exp\left(-\omega_i\cdot\frac{1.439}{T}\right)\right)}\right]$$

$H_{int} = 7040.066$

The total enthalpy (relative to the internal energy E entered at the top of the worksheet is:

$$H := E + ZPE + \left(\frac{5}{2}\right)\cdot\left(\frac{1.9863T}{1000}\right) + \frac{H_{int}}{1000}$$

$H = 92.373$ in kcal/mol

Now, for the final calculation, the Gibb's free energy, G, relative to the internal energy, is calculated. Each increment in the entropy is added up.

$$G := H - T\cdot\frac{\left(S_{trans} + S_{vib} + S_{rot} + S_{rotor}\right)}{1000}$$

$G = 55.04$ in kcal/mol