Supplementary material

Dynamic Effects of the Bridged Structure on the Quantum

Yield of the Cis→Trans Photoisomerization of Azobenzene

Toshiaki Matsubara*

Department of Chemistry, Faculty of Science, Kanagawa University, 2946, Tsuchiya, Hiratsuka, Kanagawa 259-1293, Japan

- 1. Relative energies at the various levels
- 2. Optimized structural parameters of the S_1/S_0 -CI at the various levels
- 3. Vertical excitation energies of $S_0 \rightarrow S_1$ at the various levels
- 4. Pattern of motion of all normal modes for azobenzene 1
- 5. Pattern of motion of all normal modes for diindane diazocine 4
- 6. Orbitals constituting the active space for azobenzene 1
- 7. Orbitals constituting the active space for diindane diazocine 4
- 8. Optimized structure and the relative energy of the transition state TS'-CW for diindane diazocine **4**
- 9. Changes in the kinetic energy of the N atoms
- 10. Time evolution of the populations after the S_1 excitation
- 11. Activity of all normal modes in the reactions of *cis→cis* for azobenzene
 1 and diindane diazocine 4
- 12. Cartesian coordinates of the optimized structures

	Azobenzene 1 ^b			Diin	Diindane diazocine 4		
	Level 1	Level 2	Level 3	Level 1	Level 2	Level 4	
Cis	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	
Trans-CCW	-8.9	-18.7	-18.6	6.3	2.1	3.5	
Trans-CW	-8.9	-18.7	-18.6	4.1	5.9		
CI-CCW	42.1	41.5	38.9	35.7	36.6		
CI-CW	44.3	41.5	39.1	39.6	42.7		

Table S1 Relative energies (kcal/mol) at the various levels of the *cis* and *trans* forms and the clockwise (CW) and counterclockwise (CCW) conical intersection (CI) in the $cis \rightarrow trans$ isomerization for azobenzene **1** and diindane diazocine **4**^a

^aLevel 1, CASSCF(6,5) with the basis set 6-31G for all the atoms; Level 2, CASSCF(10,8) with the basis set 6-31G(d) for the N atoms and 6-31G for the C and H atoms; Level 3, CASSCF(10,8) with the basis set cc-pVDZ for all the atoms; Level 4, PBE(D3(BJ)) with the basis set def2TZVP for all the atoms [Ref. 12]. ^bFor azobenzene 1, *Trans*-CCW and *Trans*-CW are the same structures.

Table S2 Optimized structural parameters (Å and degree) at the various levels of the S_1/S_0 -CI in the *cis* \rightarrow *trans* isomerization for azobenzene **1** and diindane diazocine **4**^a



	Azobenzene 1			Diindane d	iazocine 4
-	Level 1	Level 2	Level 3	Level 1	Level 2
		Counterclocky	wise S_1/S_0 -CI		
$d(N^1-N^2)$	1.311	1.285	1.287	1.347	1.300
$d(N^{1}-C^{3})$	1.427	1.403	1.398	1.406	1.428
$d(N^2-C^4)$	1.373	1.376	1.375	1.440	1.388
$C^3-N^1-N^2$	117.4	117.0	117.4	117.4	116.9
C^4 - N^2 - N^1	131.5	131.2	130.7	124.6	130.6
$C^{3}-N^{1}-N^{2}-C^{4}$	90.8	91.6	91.6	94.8	95.4
$C^{5}-C^{3}-N^{1}-N^{2}$	-177.4	179.5	179.6	-70.2	-58.3
$C^{6}-C^{4}-N^{2}-N^{1}$	-0.2	-0.4	-0.4	-17.2	-25.2
		Clockwise	S_1/S_0 -CI		
$d(N^1-N^2)$	1.319	1.276	1.277	1.351	1.281
$d(N^{1}-C^{3})$	1.394	1.380	1.379	1.421	1.385
$d(N^2-C^4)$	1.423	1.419	1.416	1.436	1.429
$C^3-N^1-N^2$	128.6	131.2	130.5	127.4	134.3
C^4 - N^2 - N^1	117.5	117.7	118.1	114.8	114.9
$C^{3}-N^{1}-N^{2}-C^{4}$	-91.0	-92.4	-92.4	-93.2	-95.1
$C^{5}-C^{3}-N^{1}-N^{2}$	-0.6	1.1	0.9	43.9	42.9
$C^{6}-C^{4}-N^{2}-N^{1}$	178.7	179.7	179.3	85.5	82.2

^aLevel 1, CASSCF(6,5) with the basis set 6-31G for all the atoms; Level 2, CASSCF(10,8) with the basis set 6-31G(d) for the N atoms and 6-31G for the C and H atoms; Level 3, CASSCF(10,8) with the basis set cc-pVDZ for all the atoms.

	Azobenzene 1	Diindane diazocine 4
Exp.	67.3 ^b	66.3°
CASSCF		
(6e,5o)/6-31G	74.7	72.0
(6e,50)/6-31G(d)	77.4	89.7
(6e,50)/cc-pVDZ	77.2	89.7
(10e,8o)/6-31G	69.5	66.6
(10e,8o)/6-31G(d)	75.3	73.1
(10e,8o)/cc-pVDZ	75.1	72.6
MS-CASPT2		
(6e,5o)/6-31G	80.3	77.8
(6e,5o)/6-31G(d)	62.2	77.5
(6e,50)/cc-pVDZ	61.4	75.5
(10e,8o)/6-31G	66.5	64.5
(10e,8o)/6-31G(d)	67.8	65.1
(10e,8o)/cc-pVDZ	67.0	63.6
XMS-CASPT2		
(6e,50)/cc-pVDZ	56.8	66.1
(10e,8o)/cc-pVDZ	64.3	

Table S3 Vertical excitation energies of $S_0 \rightarrow S_1$ at the various levels for azobenzene **1** and diindane diazocine **4**^a

^aThe structures optimized at the CASSCF(6,5)/6-31G level were used. ^bD. L. Beveridge and H. H. Jaffé, *J. Am. Chem. Soc.*, 1966, **88**, 1948–1953. ^cRef. 12

Table	S4	Pattern	of motion	of all normal	modes	s for	azobenzen	e 1 with	the	e cis
form	and	the	vibrational	frequencies	for	each	normal	mode	at	the
CASSC	F(10,	8)/cc-p\	/DZ level							

Normal mode No.	Vibrational frequency (cm ⁻¹)	Pattern of motion
1	31.4	Rotation of Ph
2	59.5	Rotation of Ph
3	63.8	Butterfly motion of Ph
4	155.0	Twist of N ₂
5	158.4	Butterfly motion of Ph
6	280.1	Butterfly motion of Ph
7	335.1	Wag of N ₂
8	445.5	Twist of Ph
9	448.1	Twist of Ph
10	456.5	Twist of Ph
11	484.0	Bend of Ph
12	538.1	Bend of Ph
13	592.2	Bend of Ph
14	632.2	Bend of Ph
15	671.6	Deformation of Ph
16	675.8	Deformation of Ph
17	740.5	Bend of Ph
18	767.1	Bend of Ph
19	771.9	Bend of Ph
20	795.3	Bend of H
21	833.8	Bend of H
22	860.2	Bend of H
23	940.7	Bend of H
24	943.4	Bend of H
25	952.2	Bend of H, Rotation of N ₂
26	1022.2	Bend of H
27	1039.0	Bend of H, Rotation of N ₂
28	1083.2	Deformation of Ph
29	1083.9	Deformation of Ph

30	1088.4	Bend of H
31	1089.6	Bend of H
32	1106.3	Bend of H
33	1107.2	Bend of H
34	1115.9	Deformation of Ph
35	1118.6	Deformation of Ph
36	1166.0	Deformation of Ph
37	1168.0	Deformation of Ph
38	1206.5	Deformation of Ph
39	1211.9	Deformation of Ph
40	1224.0	Deformation of Ph
41	1271.7	Rocking of H
42	1274.0	Rocking of H
43	1296.3	Deformation of Ph
44	1322.4	Rocking of H
45	1327.0	Rocking of H
46	1435.8	Rocking of H
47	1440.9	Rocking of H
48	1585.8	Rocking of H, Stretch of N ₂
49	1589.2	Rocking of H, Stretch of N_2
50	1600.5	Rocking of H, Stretch of N_2
51	1636.5	Rocking of H
52	1651.2	Rocking of H
53	1776.1	Stretch of Ph CC
54	1783.8	Stretch of Ph CC
55	1794.3	Stretch of Ph CC
56	1801.0	Stretch of Ph CC
57	3337.6	Stretch of Ph CH
58	3338.4	Stretch of Ph CH
59	3348.3	Stretch of Ph CH
60	3349.4	Stretch of Ph CH
61	3358.7	Stretch of Ph CH
62	3359.8	Stretch of Ph CH

63	3368.4	Stretch of Ph CH
64	3369.4	Stretch of Ph CH
65	3375.8	Stretch of Ph CH
66	3377.0	Stretch of Ph CH

Tab	le S5	Patte	ern of	motion of a	ll normal mod	les fo	or diind	lane diazo	ocine 4	with	the
cis	form	and	the	vibrational	frequencies	for	each	normal	mode	at	the
CAS	CASSCF(6,5)/6-31G level										

Normal mode No.	Vibrational frequency (cm ⁻¹)	Pattern of motion
1	54.3	Butterfly motion of 6-membered ring
2	81.5	Rotation of 6-membered ring
3	140.2	Twist of 5-membered ring
4	166.7	Twist of 5-membered ring
5	190.1	Twist of N ₂
6	212.8	Butterfly motion of 6-membered ring
7	254.5	Bend of 5-membered ring
8	256.4	Bend of 5-membered ring
9	280.7	Deformation of 8-membered ring
10	310.5	Bend of 5-membered ring
11	355.7	Butterfly motion of 6-membered ring
12	426.1	Bend of 8-membered ring
13	436.0	Bend of 6-membered ring
14	451.3	Bend of 6-membered ring
15	502.7	Deformation of 6-membered ring
16	544.5	Bend of 6-membered ring
17	551.3	Bend of 6-membered ring
18	567.3	Bend of 6-membered ring
19	599.9	Bend of 5 and 6-membered rings
20	612.2	Bend of 6-membered ring
21	616.3	Bend of 6-membered ring
22	652.7	Bend of 6-membered ring
23	663.8	Bend of 6-membered ring, Deformation of
		5-membered ring, Twist of N_2
24	672.1	Deformation of 5 and 6-membered rings
25	693.3	Deformation of 5 and 6-membered rings
26	731.2	Deformation of 5 and 6-membered rings
27	775.5	Deformation of 5 and 6-membered rings
28	808.7	Deformation of 5 and 6-membered rings

29	853.3	Deformation of 5 and 6-membered rings,
		Rocking of 6-membered ring H
30	865.2	Deformation of 5 and 6-membered rings,
		Rocking of 6-membered ring H
31	898.8	Deformation of 5 and 6-membered rings,
		Rocking of 6-membered ring H
32	908.3	Deformation of 5 and 6-membered rings,
		Rocking of 6-membered ring H
33	924.1	Bend of 6-membered ring H
34	933.5	Deformation of 5 and 6-membered rings
35	951.6	Deformation of 5 and 6-membered rings
36	985.3	Deformation of 5 and 6-membered rings
37	986.9	Stretch of CC
38	1012.8	Stretch of CC
39	1047.9	Stretch of CC
40	1051.5	Stretch of CC
41	1062.4	Stretch of CC
42	1069.9	Bend of 6-membered ring H
43	1077.4	Bend of 6-membered ring H
44	1112.2	Stretch of CC
45	1142.8	Stretch of CC
46	1157.4	Bend of 6-membered ring H
47	1162.3	Bend of 6-membered ring H
48	1172.7	Stretch of CC
49	1186.0	Stretch of CC
50	1189.6	Stretch of CC
51	1221.3	Stretch of CC
52	1270.9	Deformation of 5 and 6-membered rings
53	1284.0	Deformation of 5 and 6-membered rings
54	1289.9	Stretch of CC
55	1291.4	Bend of 6-membered ring H
56	1295.7	Stretch of CC
57	1299.9	Deformation of 5 and 6-membered rings

58	1305.2	Stretch of CC
59	1318.7	Stretch of CC
60	1338.8	Deformation of 5 and 6-membered rings
61	1347.9	Deformation of 5 and 6-membered rings
62	1381.7	Stretch of CC
63	1386.7	Stretch of CC
64	1395.3	Stretch of CC
65	1407.0	Stretch of CC
66	1421.1	Bend of 5-membered ring H
67	1437.1	Bend of 5-membered ring H
68	1458.6	Bend of 5-membered ring H
69	1471.0	Bend of 5-membered ring H
70	1480.7	Bend of 5-membered ring H
71	1489.9	Bend of 5-membered ring H
72	1501.9	Bend of 5-membered ring H
73	1546.6	Bend of 5-membered ring H
74	1603.2	Stretch of CC
75	1620.1	Stretch of CC
76	1635.1	Rocking of 6-membered ring H
77	1644.5	Rocking of 6-membered ring H
78	1646.4	Bend of 5-membered ring H
79	1650.1	Bend of 5-membered ring H
80	1657.0	Bend of 5-membered ring H
81	1664.0	Bend of 5-membered ring H
82	1704.7	Stretch of N ₂
83	1776.8	Stretch of CC
84	1796.7	Stretch of CC
85	1806.5	Stretch of CC
86	1809.4	Stretch of CC
87	3138.3	Stretch of CH
88	3174.2	Stretch of CH
89	3182.8	Stretch of CH
90	3197.1	Stretch of CH

91	3207.5	Stretch of CH
92	3225.2	Stretch of CH
93	3243.0	Stretch of CH
94	3245.1	Stretch of CH
95	3264.9	Stretch of CH
96	3285.7	Stretch of CH
97	3355.8	Stretch of CH
98	3356.0	Stretch of CH
99	3374.8	Stretch of CH
100	3378.1	Stretch of CH
101	3394.0	Stretch of CH
102	3401.0	Stretch of CH



Fig. S1 Orbitals constituting the active space for the CASSCF calculations given at the equilibrium geometry with the *cis* form for azobenzene **1**; two π orbitals of the Ph groups, π orbital of the N₂, two nonbonding orbitals of the N atoms, π^* orbital of the N₂ and two π^* orbitals of the Ph groups for eight orbitals and the π orbital of the N₂, two nonbonding orbitals of the N atoms, π^* orbital of the N₂ and one π^* orbital of the Ph group for five orbitals.



Fig. S2 Orbitals constituting the active space for the CASSCF calculations given at the equilibrium geometry with the *cis* form for diindane diazocine **4**; two π orbitals of the six-membered rings, π orbital of the N₂, two nonbonding orbitals of the N atoms, π^* orbital of the N₂ and two π^* orbitals of the six-membered rings for eight orbitals and the π orbital of the N₂, two nonbonding orbitals of the N atoms, π^* orbital of the N₂ and one π^* orbital of the six-membered ring for five orbitals.



Fig. S3 Optimized structure of the transition state TS'-CW by the clockwise rotation of the -N=N- moiety in the ground state (S₀) at the CASSCF(6,5)/6-31G level for diindane diazocine **4**. The imaginary frequency (cm⁻¹), its displacement vector and energies (kcal/mol) at the CASSCF(6,5)/6-31G and CAS(6,5)PT2/cc-pVDZ levels relative to those of the *cis* form were presented together.



Fig. S4 Changes in the ratio of the kinetic energy of the N atoms in the isomerization of $cis \rightarrow trans$ by the clockwise (CW) and counterclockwise (CCW) rotations for azobenzene 1 and diindane diazocine 4. Legend: N¹ [red]; N² [blue]; N₂ [black].



Fig. S5 Relative populations obtained from an ensemble (thin lines) and global fits (thick lines) to the populations in the reactions of $cis \rightarrow cis$ and $cis \rightarrow trans$ by both clockwise (CW) and counterclockwise (CCW) rotations after the S₁ excitation for azobenzene **1** and diindane diazocine **4**.



Fig. S6 Activity of all normal modes obtained from an ensemble in the reactions of $cis \rightarrow cis$ by both clockwise (CW) and counterclockwise (CCW) rotations after the internal conversion to the S₀ state (100–1000 fs) for azobenzene **1** and diindane diazocine **4**.

1 (<i>cis</i> , level 1)
N 0.631811 -1.957893 0.017204
N -0.627430 -1.961308 -0.024043
C 1.441802 -0.767429 0.099838
C -1. 442906 -0. 771765 -0. 094977
C -2. 488472 -0. 674242 0. 801911
C -3. 371452 O. 415298 O. 725553
C -3. 217577 1. 356839 -0. 261196
C -2.175432 1.231499 -1.194579
C -1. 293283 0. 184911 -1. 116735
H -2. 621006 -1. 438235 1. 542725
H -4. 173157 0. 496426 1. 433604
H -3. 896651 2. 184332 -0. 331133
H -2.069914 1.960635 -1.974361
H -0. 499886 0. 088791 -1. 830819
C 2.486274 -0.662617 -0.807385
C 3.359454 0.410710 -0.731696
C 3. 212283 1. 358494 0. 272446
C 2.187984 1.228309 1.199079
C 1.297500 0.167899 1.114911
H 2.609806 -1.423941 -1.552449
H 4.158809 0.498054 -1.441645
H 3.895616 2.182659 0.338860
H 2.079861 1.949088 1.986114
H 0 508795 0 069171 1 833948
1 (<i>trans</i> , level 1)
1 (<i>trans</i> , level 1) N -0. 388629 0. 480109 0. 000009
1 (<i>trans</i> , level 1) N -0. 388629 0. 480109 0. 000009 N 0. 395269 -0. 469761 -0. 000047
1 (<i>trans</i> , level 1) N -0. 388629 0. 480109 0. 000009 N 0. 395269 -0. 469761 -0. 000047 C 1. 786439 -0. 177038 -0. 000020
1 (<i>trans</i> , level 1) N -0. 388629 0. 480109 0. 000009 N 0. 395269 -0. 469761 -0. 000047 C 1. 786439 -0. 177038 -0. 000020 C -1. 781876 0. 181674 0. 000004
1 (<i>trans</i> , level 1) N -0. 388629 0. 480109 0. 000009 N 0. 395269 -0. 469761 -0. 000047 C 1. 786439 -0. 177038 -0. 000020 C -1. 781876 0. 181674 0. 000004 C -2. 636232 1. 280063 0. 000037
1 (<i>trans</i> , level 1) N -0. 388629 0. 480109 0. 000009 N 0. 395269 -0. 469761 -0. 000047 C 1. 786439 -0. 177038 -0. 000020 C -1. 781876 0. 181674 0. 000004 C -2. 636232 1. 280063 0. 000037 C -4. 016094 1. 087051 0. 000035
1 (<i>trans</i> , level 1) N -0. 388629 0. 480109 0. 000009 N 0. 395269 -0. 469761 -0. 000047 C 1. 786439 -0. 177038 -0. 000020 C -1. 781876 0. 181674 0. 000004 C -2. 636232 1. 280063 0. 000037 C -4. 016094 1. 087051 0. 000035 C -4. 536617 -0. 191264 0. 000003
1 (<i>trans</i> , level 1) N -0. 388629 0. 480109 0. 000009 N 0. 395269 -0. 469761 -0. 000047 C 1. 786439 -0. 177038 -0. 000020 C -1. 781876 0. 181674 0. 000004 C -2. 636232 1. 280063 0. 000037 C -4. 016094 1. 087051 0. 000035 C -4. 536617 -0. 191264 0. 000003 C -3. 680760 -1. 298996 -0. 000029
1 (<i>trans</i> , level 1) N -0. 388629 0. 480109 0. 000009 N 0. 395269 -0. 469761 -0. 000047 C 1. 786439 -0. 177038 -0. 000020 C -1. 781876 0. 181674 0. 000004 C -2. 636232 1. 280063 0. 000037 C -4. 016094 1. 087051 0. 000035 C -4. 536617 -0. 191264 0. 000003 C -3. 680760 -1. 298996 -0. 000029 C -2. 302176 -1. 118836 -0. 000030
1 (<i>trans</i> , level 1) N -0. 388629 0. 480109 0. 000009 N 0. 395269 -0. 469761 -0. 000047 C 1. 786439 -0. 177038 -0. 000020 C -1. 781876 0. 181674 0. 000004 C -2. 636232 1. 280063 0. 000037 C -4. 016094 1. 087051 0. 000035 C -4. 536617 -0. 191264 0. 000003 C -3. 680760 -1. 298996 -0. 000029 C -2. 302176 -1. 118836 -0. 000030 H -2 211149 2 264065 0. 000063
<pre>1 (trans, level 1) N -0.388629 0.480109 0.000009 N 0.395269 -0.469761 -0.000047 C 1.786439 -0.177038 -0.000020 C -1.781876 0.181674 0.000004 C -2.636232 1.280063 0.000037 C -4.016094 1.087051 0.000035 C -4.536617 -0.191264 0.000003 C -3.680760 -1.298996 -0.000029 C -2.302176 -1.118836 -0.000030 H -2.211149 2.264065 0.000063 H -4.671826 1.936362 0.000060</pre>
<pre>1 (trans, level 1) N -0.388629 0.480109 0.000009 N 0.395269 -0.469761 -0.000047 C 1.786439 -0.177038 -0.000020 C -1.781876 0.181674 0.000004 C -2.636232 1.280063 0.000037 C -4.016094 1.087051 0.000035 C -4.536617 -0.191264 0.000003 C -3.680760 -1.298996 -0.000029 C -2.302176 -1.118836 -0.000030 H -2.211149 2.264065 0.000063 H -4.671826 1.936362 0.000060 H -5 599715 -0.338981 0.000003</pre>
<pre>1 (trans, level 1) N -0.388629 0.480109 0.000009 N 0.395269 -0.469761 -0.000047 C 1.786439 -0.177038 -0.000020 C -1.781876 0.181674 0.000004 C -2.636232 1.280063 0.000037 C -4.016094 1.087051 0.000035 C -4.536617 -0.191264 0.000003 C -3.680760 -1.298996 -0.000029 C -2.302176 -1.118836 -0.000030 H -2.211149 2.264065 0.000063 H -4.671826 1.936362 0.000060 H -5.599715 -0.338981 0.000003 H -4.089055 -2.291350 -0.000053</pre>
1 $(trans, eve 1)$ N -0. 388629 0. 480109 0. 000009 N 0. 395269 -0. 469761 -0. 000047 C 1. 786439 -0. 177038 -0. 000020 C -1. 781876 0. 181674 0. 000004 C -2. 636232 1. 280063 0. 000037 C -4. 016094 1. 087051 0. 000035 C -4. 536617 -0. 191264 0. 000003 C -3. 680760 -1. 298996 -0. 000029 C -2. 302176 -1. 118836 -0. 000030 H -2. 211149 2. 264065 0. 000063 H -4. 671826 1. 936362 0. 000060 H -5. 599715 -0. 338981 0. 000003 H -4. 089055 -2. 291350 -0. 000053 H -1 634622 -1 955575 -0. 000054
1 $(trans, evel 1)$ N -0. 388629 0. 480109 0. 000009 N 0. 395269 -0. 469761 -0. 000047 C 1. 786439 -0. 177038 -0. 000020 C -1. 781876 0. 181674 0. 000004 C -2. 636232 1. 280063 0. 000037 C -4. 016094 1. 087051 0. 000035 C -4. 536617 -0. 191264 0. 000003 C -3. 680760 -1. 298996 -0. 000029 C -2. 302176 -1. 118836 -0. 000030 H -2. 211149 2. 264065 0. 000063 H -4. 671826 1. 936362 0. 000063 H -4. 089055 -2. 291350 -0. 000053 H -1. 634622 -1. 955575 -0. 000054 C -2. 632481 -1. 275821 0. 000033
1 $(trans, level 1)$ N -0. 388629 0. 480109 0. 000009 N 0. 395269 -0. 469761 -0. 000047 C 1. 786439 -0. 177038 -0. 000020 C -1. 781876 0. 181674 0. 000004 C -2. 636232 1. 280063 0. 000037 C -4. 016094 1. 087051 0. 000035 C -4. 536617 -0. 191264 0. 000003 C -3. 680760 -1. 298996 -0. 000029 C -2. 302176 -1. 118836 -0. 000030 H -2. 211149 2. 264065 0. 000063 H -4. 671826 1. 936362 0. 000063 H -4. 671826 1. 936362 0. 000063 H -4. 089055 -2. 291350 -0. 000053 H -1. 634622 -1. 955575 -0. 000054 C 2. 632481 -1. 275821 0. 000033 C 4. 007581 -1 092703 0. 000061
1 $(trans, level 1)$ N -0. 388629 0. 480109 0. 000009 N 0. 395269 -0. 469761 -0. 000047 C 1. 786439 -0. 177038 -0. 000020 C -1. 781876 0. 181674 0. 000004 C -2. 636232 1. 280063 0. 000037 C -4. 016094 1. 087051 0. 000035 C -4. 536617 -0. 191264 0. 000003 C -3. 680760 -1. 298996 -0. 000029 C -2. 302176 -1. 118836 -0. 000030 H -2. 211149 2. 264065 0. 000063 H -4. 671826 1. 936362 0. 000063 H -4. 671826 1. 936362 0. 000063 H -4. 089055 -2. 291350 -0. 000053 H -1. 634622 -1. 955575 -0. 000054 C 2. 632481 -1. 275821 0. 000033 C 4. 007581 -1. 092703 0. 000061 C 4. 532387 0. 191110 0. 000027
1 $(trans, eve 1)$ N -0. 388629 0. 480109 0. 000009 N 0. 395269 -0. 469761 -0. 000047 C 1. 786439 -0. 177038 -0. 000020 C -1. 781876 0. 181674 0. 000004 C -2. 636232 1. 280063 0. 000037 C -4. 016094 1. 087051 0. 000035 C -4. 536617 -0. 191264 0. 000003 C -3. 680760 -1. 298996 -0. 000029 C -2. 302176 -1. 118836 -0. 000030 H -2. 211149 2. 264065 0. 000063 H -4. 671826 1. 936362 0. 000060 H -5. 599715 -0. 338981 0. 000003 H -4. 089055 -2. 291350 -0. 000053 H -1. 634622 -1. 955575 -0. 000054 C 2. 632481 -1. 275821 0. 000033 C 4. 007581 -1. 092703 0. 000061 C 4. 532387 0. 191110 0. 000027 C 3 681125 1 291729 -0. 000032
1 $(trans, evel 1)$ N -0. 388629 0. 480109 0. 000009 N 0. 395269 -0. 469761 -0. 000047 C 1. 786439 -0. 177038 -0. 000020 C -1. 781876 0. 181674 0. 000004 C -2. 636232 1. 280063 0. 000037 C -4. 016094 1. 087051 0. 000035 C -4. 536617 -0. 191264 0. 000003 C -3. 680760 -1. 298996 -0. 000029 C -2. 302176 -1. 118836 -0. 000030 H -2. 211149 2. 264065 0. 000063 H -4. 671826 1. 936362 0. 000063 H -4. 089055 -2. 291350 -0. 000053 H -1. 634622 -1. 955575 -0. 000054 C 2. 632481 -1. 275821 0. 000033 C 4. 007581 -1. 092703 0. 000061 C 4. 532387 0. 191110 0. 000027 C 3. 681125 1. 291729 -0. 000032 C 2 308837 1 113233 -0. 000055
1 $(trans, level 1)$ N -0. 388629 0. 480109 0. 000009 N 0. 395269 -0. 469761 -0. 000047 C 1. 786439 -0. 177038 -0. 000020 C -1. 781876 0. 181674 0. 000004 C -2. 636232 1. 280063 0. 000037 C -4. 016094 1. 087051 0. 000035 C -4. 536617 -0. 191264 0. 000003 C -3. 680760 -1. 298996 -0. 000029 C -2. 302176 -1. 118836 -0. 000030 H -2. 211149 2. 264065 0. 000063 H -4. 671826 1. 936362 0. 000063 H -4. 671826 1. 936362 0. 000063 H -4. 089055 -2. 291350 -0. 000053 H -1. 634622 -1. 955575 -0. 000054 C 2. 632481 -1. 275821 0. 000033 C 4. 007581 -1. 092703 0. 000061 C 4. 532387 0. 191110 0. 000027 C 3. 681125 1. 291729 -0. 000032 C 2. 308837 1. 113233 -0. 000055 H 2 200746 -2 256973 0. 000052
1 $(trans, evel 1)$ N -0. 388629 0. 480109 0. 000009 N 0. 395269 -0. 469761 -0. 000047 C 1. 786439 -0. 177038 -0. 000020 C -1. 781876 0. 181674 0. 000004 C -2. 636232 1. 280063 0. 000037 C -4. 016094 1. 087051 0. 000035 C -4. 536617 -0. 191264 0. 000003 C -3. 680760 -1. 298996 -0. 000029 C -2. 302176 -1. 118836 -0. 000030 H -2. 211149 2. 264065 0. 000063 H -4. 671826 1. 936362 0. 000063 H -4. 671826 1. 936362 0. 000003 H -4. 089055 -2. 291350 -0. 000053 H -1. 634622 -1. 955575 -0. 000054 C 2. 632481 -1. 275821 0. 000033 C 4. 007581 -1. 092703 0. 000061 C 4. 532387 0. 191110 0. 000027 C 3. 681125 1. 291729 -0. 000032 C 2. 308837 1. 113233 -0. 000055 H 2. 200746 -2. 256973 0. 000052 H 4. 661283 -1 943231 0. 000106
1 $(trans, evel 1)$ N -0. 388629 0. 480109 0. 000009 N 0. 395269 -0. 469761 -0. 000047 C 1. 786439 -0. 177038 -0. 000020 C -1. 781876 0. 181674 0. 000004 C -2. 636232 1. 280063 0. 000037 C -4. 016094 1. 087051 0. 000035 C -4. 536617 -0. 191264 0. 000003 C -3. 680760 -1. 298996 -0. 000029 C -2. 302176 -1. 118836 -0. 000030 H -2. 211149 2. 264065 0. 000063 H -4. 671826 1. 936362 0. 000063 H -4. 671826 1. 936362 0. 000003 H -4. 089055 -2. 291350 -0. 000053 H -1. 634622 -1. 955575 -0. 000054 C 2. 632481 -1. 275821 0. 000033 C 4. 007581 -1. 092703 0. 000061 C 4. 532387 0. 191110 0. 000027 C 3. 681125 1. 291729 -0. 000032 C 2. 308837 1. 113233 -0. 000055 H 2. 200746 -2. 256973 0. 000052 H 4. 661283 -1. 943231 0. 000106
1 $(trans, evel 1)$ N -0. 388629 0. 480109 0. 000009 N 0. 395269 -0. 469761 -0. 000047 C 1. 786439 -0. 177038 -0. 000020 C -1. 781876 0. 181674 0. 000004 C -2. 636232 1. 280063 0. 000037 C -4. 016094 1. 087051 0. 000035 C -4. 536617 -0. 191264 0. 000003 C -3. 680760 -1. 298996 -0. 000029 C -2. 302176 -1. 118836 -0. 000030 H -2. 211149 2. 264065 0. 000063 H -4. 671826 1. 936362 0. 000060 H -5. 599715 -0. 338981 0. 000033 H -4. 089055 -2. 291350 -0. 000053 H -1. 634622 -1. 955575 -0. 000054 C 2. 632481 -1. 275821 0. 000033 C 4. 007581 -1. 092703 0. 000061 C 4. 532387 0. 191110 0. 000027 C 3. 681125 1. 291729 -0. 000032 C 2. 308837 1. 113233 -0. 000055 H 2. 200746 -2. 256973 0. 000052 H 4. 661283 -1. 943231 0. 000106 H 5. 595650 0. 336740 0. 000045

1 (CI-CW, le	evel 1)	
N 0. 506765	1.116972	0. 770549
N -0.598311	1. 505492	0. 181067
C 1.627903	0. 493124	0. 280292
C -1.681541	0. 577447	0. 139287
C -2.810184	1.012571	-0. 543745
C -3.909545	0. 178896	-0. 665770
C -3.885690	-1. 085799	-0. 093063
C -2.761763	-1. 513640	0. 602122
C -1.657501	-0. 685300	0. 721539
H -2.805928	1. 997242	-0. 966969
H -4. 778793	0. 513623	-1. 197257
H -4. 738116	-1. 731163	-0. 181741
H -2. 747143	-2. 487192	1. 052086
H -0. 794949	-1. 008045	1. 268779
C 2.684197	0. 213216	1. 182124
C 3.817606	-0. 402871	0. 733343
C 3.953794	-0. 760089	-0. 621887
C 2.936387	-0. 485209	-1. 502477
C 1.763326	0. 141534	-1.066474
H 2.571363	0. 497751	2. 209188
H 4. 615032	-0. 613916	1. 419493
H 4.850757	-1. 240954	-0. 959982
H 3.032001	-0. 748529	-2. 538290
H 0.974676	0.360651	-1.758364
1 (CI-CCW,	evel 1)	
1 (CI-CCW, N -0.388629	evel 1) 0.480109	0. 000009
1 (CI-CCW, N -0. 388629 N 0. 395269	evel 1) 0.480109 -0.469761	0. 000009 -0. 000047
1 (CI-CCW, I N -0. 388629 N 0. 395269 C 1. 786439	evel 1) 0. 480109 -0. 469761 -0. 177038	0. 000009 -0. 000047 -0. 000020
1 (CI-CCW, I N -0. 388629 N 0. 395269 C 1. 786439 C -1. 781876	evel 1) 0. 480109 -0. 469761 -0. 177038 0. 181674	0. 000009 -0. 000047 -0. 000020 0. 000004
1 (CI-CCW, I N -0.388629 N 0.395269 C 1.786439 C -1.781876 C -2.636232	evel 1) 0. 480109 -0. 469761 -0. 177038 0. 181674 1. 280063	0. 000009 -0. 000047 -0. 000020 0. 000004 0. 000037
1 (CI-CCW, I N -0.388629 C 1.786439 C -1.781876 C -2.636232 C -4.016094	evel 1) 0. 480109 -0. 469761 -0. 177038 0. 181674 1. 280063 1. 087051	0. 000009 -0. 000047 -0. 000020 0. 000004 0. 000037 0. 000035
1 (CI-CCW, I N -0. 388629 N 0. 395269 C 1. 786439 C -1. 781876 C -2. 636232 C -4. 016094 C -4. 536617	evel 1) 0. 480109 -0. 469761 -0. 177038 0. 181674 1. 280063 1. 087051 -0. 191264	0. 000009 -0. 000047 -0. 000020 0. 000004 0. 000037 0. 000035 0. 000003
1 (CI-CCW, I N -0.388629 N 0.395269 C 1.786439 C -1.781876 C -2.636232 C -4.016094 C -4.536617 C -3.680760	evel 1) 0. 480109 -0. 469761 -0. 177038 0. 181674 1. 280063 1. 087051 -0. 191264 -1. 298996	0. 000009 -0. 000047 -0. 000020 0. 000004 0. 000037 0. 000035 0. 000003 -0. 000029
1 (CI-CCW, I N -0.388629 C 1.786439 C -1.781876 C -2.636232 C -4.016094 C -4.536617 C -3.680760 C -2.302176	evel 1) 0. 480109 -0. 469761 -0. 177038 0. 181674 1. 280063 1. 087051 -0. 191264 -1. 298996 -1. 118836	0.000009 -0.000047 -0.000020 0.000037 0.000035 0.000033 -0.000029 -0.000030
1 (CI-CCW, I N -0.388629 C 1.786439 C -1.781876 C -2.636232 C -4.016094 C -4.536617 C -3.680760 C -2.302176 H -2.211149	evel 1) 0. 480109 -0. 469761 -0. 177038 0. 181674 1. 280063 1. 087051 -0. 191264 -1. 298996 -1. 118836 2. 264065	0.000009 -0.000047 -0.000020 0.000004 0.000037 0.000035 0.000003 -0.000029 -0.000030 0.000063
1 (CI-CCW, I N -0. 388629 N 0. 395269 C 1. 786439 C -1. 781876 C -2. 636232 C -4. 016094 C -4. 536617 C -3. 680760 C -2. 302176 H -2. 211149 H -4. 671826	evel 1) 0. 480109 -0. 469761 -0. 177038 0. 181674 1. 280063 1. 087051 -0. 191264 -1. 298996 -1. 118836 2. 264065 1. 936362	0.000009 -0.000047 -0.000020 0.000004 0.000037 0.000035 0.000003 -0.000029 -0.000030 0.000063 0.000060
1 (CI-CCW, I N -0. 388629 C 1. 786439 C -1. 781876 C -2. 636232 C -4. 016094 C -4. 536617 C -3. 680760 C -2. 302176 H -2. 211149 H -4. 671826 H -5. 599715	evel 1) 0. 480109 -0. 469761 -0. 177038 0. 181674 1. 280063 1. 087051 -0. 191264 -1. 298996 -1. 118836 2. 264065 1. 936362 -0. 338981 2. 201250	0. 000009 -0. 000047 -0. 000020 0. 000037 0. 000035 0. 000033 -0. 000029 -0. 000030 0. 000063 0. 000063 0. 000063
1 (CI-CCW, I N -0.388629 C 1.786439 C -1.781876 C -2.636232 C -4.016094 C -4.536617 C -3.680760 C -2.302176 H -2.211149 H -4.671826 H -5.599715 H -4.089055	evel 1) 0. 480109 -0. 469761 -0. 177038 0. 181674 1. 280063 1. 087051 -0. 191264 -1. 298996 -1. 118836 2. 264065 1. 936362 -0. 338981 -2. 291350 1. 055575	0. 000009 -0. 000047 -0. 000020 0. 000037 0. 000035 0. 000033 -0. 000029 -0. 000030 0. 000063 0. 000063 0. 000063 0. 000053 -0. 000053
1 (CI-CCW, I N -0.388629 C 1.786439 C -1.781876 C -2.636232 C -4.016094 C -4.536617 C -3.680760 C -2.302176 H -2.211149 H -4.671826 H -5.599715 H -4.089055 H -1.634622	evel 1) 0. 480109 -0. 469761 -0. 177038 0. 181674 1. 280063 1. 087051 -0. 191264 -1. 298996 -1. 118836 2. 264065 1. 936362 -0. 338981 -2. 291350 -1. 955575 1. 925221	0.000009 -0.000047 -0.000020 0.000037 0.000035 0.000033 -0.000029 -0.000030 0.000063 0.000063 0.000063 -0.000053 -0.000054 -0.000054
1 (CI-CCW, I N -0. 388629 C 1. 786439 C -1. 781876 C -2. 636232 C -4. 016094 C -4. 536617 C -3. 680760 C -2. 302176 H -2. 211149 H -4. 671826 H -5. 599715 H -1. 634622 C 2. 632481	evel 1) 0. 480109 -0. 469761 -0. 177038 0. 181674 1. 280063 1. 087051 -0. 191264 -1. 298996 -1. 118836 2. 264065 1. 936362 -0. 338981 -2. 291350 -1. 955575 -1. 275821 1. 002722	0.000009 -0.000047 -0.000020 0.0000037 0.000035 0.000003 -0.000029 -0.000029 -0.000030 0.000060 0.000063 -0.000053 -0.000054 0.000054
1 (CI-CCW, I N -0.388629 C 1.786439 C -1.781876 C -2.636232 C -4.016094 C -4.536617 C -3.680760 C -2.302176 H -2.211149 H -4.671826 H -5.599715 H -4.089055 H -1.634622 C 2.632481 C 4.007581 C 4.007581 C 4.52027	evel 1) 0. 480109 -0. 469761 -0. 177038 0. 181674 1. 280063 1. 087051 -0. 191264 -1. 298996 -1. 118836 2. 264065 1. 936362 -0. 338981 -2. 291350 -1. 955575 -1. 275821 -1. 092703	0. 000009 -0. 000047 -0. 000020 0. 000037 0. 000035 0. 000033 -0. 000029 -0. 000029 -0. 000033 0. 000063 0. 000053 -0. 000053 -0. 000054 0. 000054 0. 000054 0. 000061 0. 000057
$\begin{array}{cccccccccccccccccccccccccccccccccccc$	evel 1) 0. 480109 -0. 469761 -0. 177038 0. 181674 1. 280063 1. 087051 -0. 191264 -1. 298996 -1. 118836 2. 264065 1. 936362 -0. 338981 -2. 291350 -1. 275821 -1. 092703 0. 191110 1. 201722	0. 000009 -0. 000047 -0. 000020 0. 000037 0. 000035 0. 000033 -0. 000029 -0. 000030 0. 000063 0. 000063 0. 000053 -0. 000053 -0. 000054 0. 000054 0. 000057 0. 000027 0. 000027
1 (CI-CCW, I N -0.388629 N 0.395269 C 1.786439 C -1.781876 C -2.636232 C -4.016094 C -4.536617 C -3.680760 C -2.302176 H -2.211149 H -4.671826 H -5.599715 H -1.634622 C 2.632481 C 4.007581 C 4.532387 C 3.681125	evel 1) 0. 480109 -0. 469761 -0. 177038 0. 181674 1. 280063 1. 087051 -0. 191264 -1. 298996 -1. 118836 2. 264065 1. 936362 -0. 338981 -2. 291350 -1. 955575 -1. 275821 -1. 092703 0. 191110 1. 291729 1. 112222	0. 000009 -0. 000047 -0. 000020 0. 000037 0. 000035 0. 000033 -0. 000029 -0. 000029 -0. 000030 0. 000063 0. 000063 -0. 000053 -0. 000054 0. 000054 0. 000054 0. 000027 -0. 000032 -0. 000055 -0. 000555 -0.
<pre>1 (CI-CCW, I N -0. 388629 C 1. 786439 C -1. 781876 C -2. 636232 C -4. 016094 C -4. 536617 C -3. 680760 C -2. 302176 H -2. 211149 H -4. 671826 H -5. 599715 H -4. 089055 H -1. 634622 C 2. 632481 C 4. 007581 C 4. 532387 C 3. 681125 C 2. 308837 H 2. 200746</pre>	evel 1) 0. 480109 -0. 469761 -0. 177038 0. 181674 1. 280063 1. 087051 -0. 191264 -1. 298996 -1. 298996 -1. 298996 2. 264065 1. 936362 -0. 338981 -2. 291350 -1. 955575 -1. 275821 -1. 092703 0. 191110 1. 291729 1. 113233 -2. 256972	0. 000009 -0. 000047 -0. 000020 0. 000037 0. 000035 0. 000033 -0. 000029 -0. 000030 0. 000063 0. 000063 0. 000053 -0. 000054 0. 000055 0. 000055 0. 000055
$\begin{array}{cccccccccccccccccccccccccccccccccccc$	evel 1) 0. 480109 -0. 469761 -0. 177038 0. 181674 1. 280063 1. 087051 -0. 191264 -1. 298996 -1. 118836 2. 264065 1. 936362 -0. 338981 -2. 291350 -1. 955575 -1. 275821 -1. 092703 0. 191110 1. 291729 1. 113233 -2. 256973 -1. 042221	0. 000009 -0. 000047 -0. 000020 0. 000037 0. 000035 0. 000033 -0. 000029 -0. 000029 -0. 000030 0. 000063 0. 000063 -0. 000053 -0. 000054 0. 000027 -0. 000027 -0. 000055 0. 000055 0. 000052
$\begin{array}{ccccccc} 1 & (CI-CCW, & \\ N & -0. & 388629 \\ N & 0. & 395269 \\ \hline C & 1. & 786439 \\ \hline C & -1. & 781876 \\ \hline C & -2. & 636232 \\ \hline C & -4. & 016094 \\ \hline C & -4. & 536617 \\ \hline C & -3. & 680760 \\ \hline C & -2. & 302176 \\ \hline H & -2. & 211149 \\ \hline H & -2. & 637826 \\ \hline H & -2. & 630765 \\ \hline H & -1. & 634622 \\ \hline C & 2. & 632481 \\ \hline C & 4. & 007581 \\ \hline C & 4. & 532387 \\ \hline C & 3. & 681125 \\ \hline C & 2. & 308837 \\ \hline H & 2. & 200746 \\ \hline H & 4. & 661283 \\ \hline H & 5. & 59556 \\ \hline \end{array}$	evel 1) 0. 480109 -0. 469761 -0. 177038 0. 181674 1. 280063 1. 087051 -0. 191264 -1. 298996 -1. 118836 2. 264065 1. 936362 -0. 338981 -2. 291350 -1. 275821 -1. 092703 0. 191110 1. 291729 1. 113233 -2. 256973 -1. 943231 0. 226740	0. 000009 -0. 000047 -0. 000020 0. 000037 0. 000035 0. 000033 -0. 000029 -0. 000030 0. 000063 0. 000063 0. 000053 -0. 000054 0. 000054 0. 000032 -0. 000055 0. 000052 0. 000052 0. 000054
1 (CI-CCW, I N -0.388629 N 0.395269 C 1.786439 C -1.781876 C -2.636232 C -4.016094 C -4.536617 C -3.680760 C -2.302176 H -2.211149 H -4.671826 H -5.599715 H -4.089055 H -1.634622 C 2.632481 C 4.007581 C 3.681125 C 2.308837 H 2.200746 H 4.661283 H 5.595650	evel 1) 0. 480109 -0. 469761 -0. 177038 0. 181674 1. 280063 1. 087051 -0. 191264 -1. 298996 -1. 118836 2. 264065 1. 936362 -0. 338981 -2. 291350 -1. 955575 -1. 275821 -1. 092703 0. 191110 1. 291729 1. 113233 -2. 256973 -1. 943231 0. 336740 2. 284142	0. 000009 -0. 000047 -0. 000020 0. 000037 0. 000035 0. 000033 -0. 000029 -0. 000029 -0. 000030 0. 000063 0. 000063 0. 000053 -0. 000054 0. 000055 0. 000055 0. 000052 0. 000052 0. 000052 0. 000052 0. 000052 0. 000052 0. 000052 0. 000055 0. 000052 0. 000055 0. 00055 0. 00055

1 (<i>cis</i> , level 1)	1 (CI-CW, level 1)	1 (<i>cis</i> , level 2)
N 0.631811 -1.957893 0.017204	N 0.506765 1.116972 0.770549	N -0. 619108 2. 035075 0. 042041
N -0.627430 -1.961308 -0.024043	N -0.598311 1.505492 0.181067	N 0.598873 2.037980 -0.006232
C 1.441802 -0.767429 0.099838	C 1. 627903 0. 493124 0. 280292	C -1.363185 0.804103 0.104468
C -1. 442906 -0. 771765 -0. 094977	C -1. 681541 0. 577447 0. 139287	C 1.347591 0.808198 -0.092451
6 -2 488472 -0 674242 0 801911	C -2 810184 1 012571 -0 543745	C 2 296877 0 562494 0 897656
$C = 3 \ 371452 \ 0 \ 415208 \ 0 \ 725553$	$C_{-3} = 0.00545 = 0.178896 = 0.665770$	$C_{110307} = 0.550834 = 0.806378$
	C = 3.863030 = 1.063733 = 0.033003	
G -2. 1/5432 1. 231499 -1. 194579	G -2. /61/63 -1. 513640 0. 602122	6 2.109003 -1.135462 -1.298276
C -1. 293283 0. 184911 -1. 116735	C -1.65/501 -0.685300 0.721539	C 1.268688 -0.028870 -1.210549
H -2.621006 -1.438235 1.542725	H -2.805928 1.997242 -0.966969	H 2. 387222 1. 242597 1. 722483
H -4. 173157 0. 496426 1. 433604	H -4. 778793 0. 513623 -1. 197257	H 3. 835131 -0. 755412 1. 581424
H -3. 896651 2. 184332 -0. 331133	H -4. 738116 -1. 731163 -0. 181741	H 3. 668341 -2. 261614 -0. 353314
H -2.069914 1.960635 -1.974361	H -2.747143 -2.487192 1.052086	H 2. 049660 -1. 780763 -2. 153117
H -0. 499886 0. 088791 -1. 830819	H -0. 794949 -1. 008045 1. 268779	H 0.569035 0.183527 -1.993633
C 2.486274 -0.662617 -0.807385	C 2.684197 0.213216 1.182124	C -2. 323375 0. 591144 -0. 856274
C 3.359454 0.410710 -0.731696	C 3.817606 -0.402871 0.733343	C -3. 138423 -0. 546242 -0. 795529
C 3. 212283 1. 358494 0. 272446	C 3.953794 -0.760089 -0.621887	C -3. 013809 -1. 431920 0. 248362
C 2.187984 1.228309 1.199079	C 2.936387 -0.485209 -1.502477	C -2.068264 -1.191147 1.256001
C 1.297500 0.167899 1.114911	C 1. 763326 0. 141534 -1. 066474	C -1.245178 -0.080398 1.189810
H 2.609806 -1.423941 -1.552449	H 2, 571363 0, 497751 2, 209188	H -2. 443651 1. 303627 -1. 649410
H 4 158809 0 498054 -1 441645	H 4 615032 -0 613916 1 419493	H -3 869450 -0 712357 -1 562961
H 3 895616 2 182659 0 338860	H 4 $850757 -1 240954 -0 959982$	H -3 644274 -2 298188 0 302521
H 2 070861 1 040088 1 086114	H 3 032001 $-0.748529 -2.538290$	H = 1.982320 = 1.868899 = 2.083072
	H = 0.074676 = 0.260651 = 1.759264	H = 0.527145 0.110199 1.061270
11 0.000700 0.000171 1.000040	1 0.374070 0.300031 1.730304	11 0. 52/145 0. 110100 1. 5015/5
1 (trans level 1)	1 (CI-CCW level 1)	1 (trans evel 2)
1 (<i>trans</i> , level 1)	1 (CI-CCW, level 1) N -0.289620, 0.480100, 0.000000	1 (<i>trans</i> , level 2)
1 (<i>trans</i> , level 1) N -0. 388629 0. 480109 0. 000009 N 0. 205260 -0. 460761 -0. 000047	1 (CI-CCW, level 1) N -0.388629 0.480109 0.000009 N 0.205260 -0.460761 -0.000047	1 (<i>trans</i> , level 2) N 0.371160 -0.481280 0.000079 N -0.272044 0.484552 0.000117
1 (<i>trans</i> , level 1) N -0. 388629 0. 480109 0. 000009 N 0. 395269 -0. 469761 -0. 000047	1 (CI-CCW, level 1) N -0.388629 0.480109 0.000009 N 0.395269 -0.469761 -0.000047	1 (<i>trans</i> , level 2) N 0.371160 -0.481280 0.000079 N -0.372044 0.484552 0.000117
1 (<i>trans</i> , level 1) N -0.388629 0.480109 0.000009 N 0.395269 -0.469761 -0.000047 C 1.786439 -0.177038 -0.000020	1 (CI-CCW, level 1) N -0.388629 0.480109 0.000009 N 0.395269 -0.469761 -0.000047 C 1.786439 -0.177038 -0.000020	1 (<i>trans</i> , level 2) N 0.371160 -0.481280 0.000079 N -0.372044 0.484552 0.000117 C -1.761568 0.186576 0.000051
1 (<i>trans</i> , level 1) N -0. 388629 0. 480109 0. 000009 N 0. 395269 -0. 469761 -0. 000047 C 1. 786439 -0. 177038 -0. 000020 C -1. 781876 0. 181674 0. 000004	1 (CI-CCW, level 1) N -0. 388629 0. 480109 0. 000009 N 0. 395269 -0. 469761 -0. 000047 C 1. 786439 -0. 177038 -0. 000020 C -1. 781876 0. 181674 0. 000004	1 (<i>trans</i> , level 2) N 0.371160 -0.481280 0.000079 N -0.372044 0.484552 0.000117 C -1.761568 0.186576 0.000051 C 1.762273 -0.183162 0.000019
1 (<i>trans</i> , level 1) N -0. 388629 0. 480109 0. 000009 N 0. 395269 -0. 469761 -0. 000047 C 1. 786439 -0. 177038 -0. 000020 C -1. 781876 0. 181674 0. 000004 C -2. 636232 1. 280063 0. 000037	1 (CI-CCW, level 1) N -0.388629 0.480109 0.000009 N 0.395269 -0.469761 -0.000047 C 1.786439 -0.177038 -0.000020 C -1.781876 0.181674 0.000004 C -2.636232 1.280063 0.000037	1 (<i>trans</i> , level 2) N 0.371160 -0.481280 0.000079 N -0.372044 0.484552 0.000117 C -1.761568 0.186576 0.000051 C 1.762273 -0.183162 0.000019 C 2.605905 -1.273521 0.000742
 (trans, level 1) N -0. 388629 0. 480109 0. 000009 N 0. 395269 -0. 469761 -0. 000047 C 1. 786439 -0. 177038 -0. 000020 C -1. 781876 0. 181674 0. 000004 C -2. 636232 1. 280063 0. 000037 C -4. 016094 1. 087051 0. 000035 	1 (CI-CCW, level 1) N -0.388629 0.480109 0.000009 N 0.395269 -0.469761 -0.000047 C 1.786439 -0.177038 -0.000020 C -1.781876 0.181674 0.000004 C -2.636232 1.280063 0.000037 C -4.016094 1.087051 0.000035	1 (trans, level 2) N 0.371160 -0.481280 0.000079 N -0.372044 0.484552 0.000117 C -1.761568 0.186576 0.000051 C 1.762273 -0.183162 0.000019 C 2.605905 -1.273521 0.000742 C 3.991305 -1.097305 0.000742
<pre>1 (trans, level 1) N -0.388629 0.480109 0.000009 N 0.395269 -0.469761 -0.000047 C 1.786439 -0.177038 -0.000020 C -1.781876 0.181674 0.000004 C -2.636232 1.280063 0.000037 C -4.016094 1.087051 0.000035 C -4.536617 -0.191264 0.000003</pre>	 (CI-CCW, level 1) -0.388629 0.480109 0.000009 0.395269 -0.469761 -0.000047 1.786439 -0.177038 -0.000020 -1.781876 0.181674 0.000004 -2.636232 1.280063 0.000037 -4.016094 1.087051 0.000035 -4.536617 -0.191264 0.000003 	1 (trans, level 2) N 0.371160 -0.481280 0.000079 N -0.372044 0.484552 0.000117 C -1.761568 0.186576 0.000051 C 1.762273 -0.183162 0.000019 C 2.605905 -1.273521 0.000742 C 3.991305 -1.097305 0.000742 C 4.524192 0.187629 -0.000042
 (trans, level 1) N -0.388629 0.480109 0.000009 N 0.395269 -0.469761 -0.000047 C 1.786439 -0.177038 -0.000020 C -1.781876 0.181674 0.000004 C -2.636232 1.280063 0.000037 C -4.016094 1.087051 0.000035 C -3.680760 -1.298996 -0.000029 	$ 1 (CI-CCW, \ \ level \ 1) \\ N -0. \ 388629 0. \ 480109 0. \ 000009 \\ N 0. \ 395269 -0. \ 469761 -0. \ 000047 \\ C 1. \ 786439 -0. \ 177038 -0. \ 000020 \\ C -1. \ 781876 0. \ 181674 0. \ 000004 \\ C -2. \ 636232 1. \ 280063 0. \ 000037 \\ C -4. \ 016094 1. \ 087051 0. \ 0000035 \\ C -4. \ 536617 -0. \ 191264 0. \ 000003 \\ C -3. \ 680760 -1. \ 298996 -0. \ 000029 \\ $	 (trans, level 2) 0.371160 -0.481280 0.000079 -0.372044 0.484552 0.000117 -1.761568 0.186576 0.000051 1.762273 -0.183162 0.000019 2.605905 -1.273521 0.000742 3.991305 -1.097305 0.000742 4.524192 0.187629 -0.000042 3.666368 1.297079 -0.000813
<pre>1 (trans, level 1) N -0.388629 0.480109 0.000009 N 0.395269 -0.469761 -0.000047 C 1.786439 -0.177038 -0.000020 C -1.781876 0.181674 0.000004 C -2.636232 1.280063 0.000037 C -4.016094 1.087051 0.000035 C -4.536617 -0.191264 0.000003 C -3.680760 -1.298996 -0.000029 C -2.302176 -1.118836 -0.000030</pre>	$ 1 (CI-CCW, \ level 1) \\ N -0. \ 388629 0. \ 480109 0. \ 000009 \\ N 0. \ 395269 -0. \ 469761 -0. \ 000047 \\ C 1. \ 786439 -0. \ 177038 -0. \ 000020 \\ C -1. \ 781876 0. \ 181674 0. \ 000004 \\ C -2. \ 636232 1. \ 280063 0. \ 000037 \\ C -4. \ 016094 1. \ 087051 0. \ 000035 \\ C -4. \ 536617 -0. \ 191264 0. \ 000003 \\ C -3. \ 680760 -1. \ 298996 -0. \ 000029 \\ C -2. \ 302176 -1. \ 118836 -0. \ 000030 \\ \end{array} $	 (trans, level 2) 0. 371160 -0. 481280 0. 000079 0. 372044 0. 484552 0. 000117 1. 761568 0. 186576 0. 000051 1. 762273 -0. 183162 0. 000019 2. 605905 -1. 273521 0. 000742 3. 991305 -1. 097305 0. 000742 4. 524192 0. 187629 -0. 000042 3. 666368 1. 297079 -0. 000813 2. 289246 1. 119073 -0. 000776
<pre>1 (trans, level 1) N -0.388629 0.480109 0.000009 N 0.395269 -0.469761 -0.000047 C 1.786439 -0.177038 -0.000020 C -1.781876 0.181674 0.000004 C -2.636232 1.280063 0.000037 C -4.016094 1.087051 0.000035 C -4.536617 -0.191264 0.000003 C -3.680760 -1.298996 -0.000029 C -2.302176 -1.118836 -0.000030 H -2.211149 2.264065 0.000063</pre>	<pre>1 (CI-CCW, level 1) N -0.388629 0.480109 0.000009 N 0.395269 -0.469761 -0.000047 C 1.786439 -0.177038 -0.000020 C -1.781876 0.181674 0.000004 C -2.636232 1.280063 0.000037 C -4.016094 1.087051 0.000035 C -4.536617 -0.191264 0.000003 C -3.680760 -1.298996 -0.000029 C -2.302176 -1.118836 -0.000030 H -2.211149 2.264065 0.000063</pre>	 (trans, level 2) 0.371160 -0.481280 0.000079 -0.372044 0.484552 0.000117 -1.761568 0.186576 0.000051 1.762273 -0.183162 0.000019 2.605905 -1.273521 0.000742 3.991305 -1.097305 0.000742 4.524192 0.187629 -0.00042 3.666368 1.297079 -0.000813 2.289246 1.119073 -0.000776 H 2.177388 -2.256442 0.001323
<pre>1 (trans, level 1) N -0.388629 0.480109 0.000009 N 0.395269 -0.469761 -0.000047 C 1.786439 -0.177038 -0.000020 C -1.781876 0.181674 0.000004 C -2.636232 1.280063 0.000037 C -4.016094 1.087051 0.000035 C -4.536617 -0.191264 0.000003 C -3.680760 -1.298996 -0.000029 C -2.302176 -1.118836 -0.000030 H -2.211149 2.264065 0.000063 H -4.671826 1.936362 0.000060</pre>	$ 1 (CI-CCW, \ level 1) \\ N -0.\ 388629 0.\ 480109 0.\ 000009 \\ N 0.\ 395269 -0.\ 469761 -0.\ 000047 \\ C 1.\ 786439 -0.\ 177038 -0.\ 000020 \\ C -1.\ 781876 0.\ 181674 0.\ 000004 \\ C -2.\ 636232 1.\ 280063 0.\ 000037 \\ C -4.\ 016094 1.\ 087051 0.\ 000035 \\ C -4.\ 536617 -0.\ 191264 0.\ 000003 \\ C -3.\ 680760 -1.\ 298996 -0.\ 000029 \\ C -2.\ 302176 -1.\ 118836 -0.\ 000030 \\ H -2.\ 211149 2.\ 264065 0.\ 000063 \\ H -4.\ 671826 1.\ 936362 0.\ 000060 $	 (trans, level 2) N 0.371160 -0.481280 0.000079 N -0.372044 0.484552 0.000117 C -1.761568 0.186576 0.000051 C 1.762273 -0.183162 0.000019 C 2.605905 -1.273521 0.000742 C 3.991305 -1.097305 0.000742 C 4.524192 0.187629 -0.000042 C 3.666368 1.297079 -0.000813 C 2.289246 1.119073 -0.000776 H 2.177388 -2.256442 0.001323 H 4.638571 -1.952639 0.001333
<pre>1 (trans, level 1) N -0.388629 0.480109 0.000009 N 0.395269 -0.469761 -0.000047 C 1.786439 -0.177038 -0.000020 C -1.781876 0.181674 0.000004 C -2.636232 1.280063 0.000037 C -4.016094 1.087051 0.000035 C -4.536617 -0.191264 0.000003 C -3.680760 -1.298996 -0.000029 C -2.302176 -1.118836 -0.000030 H -2.211149 2.264065 0.000063 H -4.671826 1.936362 0.000060 H -5.599715 -0.338981 0.000003</pre>	$ 1 (CI-CCW, \ \ level \ 1) \\ N -0.\ 388629 0.\ 480109 0.\ 000009 \\ N 0.\ 395269 -0.\ 469761 -0.\ 000047 \\ C 1.\ 786439 -0.\ 177038 -0.\ 000020 \\ C -1.\ 781876 0.\ 181674 0.\ 000004 \\ C -2.\ 636232 1.\ 280063 0.\ 000037 \\ C -4.\ 016094 1.\ 087051 0.\ 000003 \\ C -4.\ 536617 -0.\ 191264 0.\ 000003 \\ C -3.\ 680760 -1.\ 298996 -0.\ 000029 \\ C -2.\ 302176 -1.\ 118836 -0.\ 000003 \\ H -2.\ 211149 2.\ 264065 0.\ 000063 \\ H -4.\ 671826 1.\ 936362 0.\ 000060 \\ H -5.\ 599715 -0.\ 338981 0.\ 000003 $	 (trans, level 2) N 0.371160 -0.481280 0.000079 N -0.372044 0.484552 0.000117 C -1.761568 0.186576 0.000051 C 1.762273 -0.183162 0.000742 C 3.991305 -1.273521 0.000742 C 4.524192 0.187629 -0.000042 C 3.666368 1.297079 -0.000813 C 2.289246 1.119073 -0.000776 H 2.177388 -2.256442 0.001323 H 4.638571 -1.952639 0.001333 H 5.587626 0.331068 -0.00085
<pre>1 (trans, level 1) N -0.388629 0.480109 0.000009 N 0.395269 -0.469761 -0.000047 C 1.786439 -0.177038 -0.000020 C -1.781876 0.181674 0.000004 C -2.636232 1.280063 0.000037 C -4.016094 1.087051 0.000035 C -4.536617 -0.191264 0.000003 C -3.680760 -1.298996 -0.000029 C -2.302176 -1.118836 -0.000030 H -2.211149 2.264065 0.000063 H -4.671826 1.936362 0.000060 H -5.599715 -0.338981 0.000003</pre>	$ 1 (CI-CCW, \ \ level \ 1) \\ N -0. \ 388629 0. \ 480109 0. \ 000009 \\ N 0. \ 395269 -0. \ 469761 -0. \ 000047 \\ C 1. \ 786439 -0. \ 177038 -0. \ 000020 \\ C -1. \ 781876 0. \ 181674 0. \ 000003 \\ C -2. \ 636232 1. \ 280063 0. \ 000037 \\ C -4. \ 016094 1. \ 087051 0. \ 000003 \\ C -4. \ 536617 -0. \ 191264 0. \ 000003 \\ C -3. \ 680760 -1. \ 298996 -0. \ 000029 \\ C -2. \ 302176 -1. \ 118836 -0. \ 000003 \\ H -2. \ 211149 2. \ 264065 0. \ 000063 \\ H -4. \ 671826 1. \ 936362 0. \ 000063 \\ H -4. \ 671826 1. \ 936362 0. \ 000003 \\ H -4. \ 671826 1. \ 936362 0. \ 000003 \\ H -4. \ 089055 -2. \ 291350 -0. \ 000053 \\ \end{array} $	 (trans, level 2) 0.371160 -0.481280 0.000079 N -0.372044 0.484552 0.000117 C -1.761568 0.186576 0.000051 C 1.762273 -0.183162 0.000019 C 2.605905 -1.273521 0.000742 C 3.991305 -1.097305 0.000742 C 4.524192 0.187629 -0.000442 C 3.666368 1.297079 -0.000813 C 2.289246 1.119073 -0.000776 H 2.177388 -2.256442 0.001323 H 4.638571 -1.952639 0.001333 H 5.587626 0.331068 -0.00085 H 4.075229 2.289222 -0.001439
1 $(trans, level 1)$ N -0. 388629 0. 480109 0. 000009 N 0. 395269 -0. 469761 -0. 000047 C 1. 786439 -0. 177038 -0. 000020 C -1. 781876 0. 181674 0. 000004 C -2. 636232 1. 280063 0. 000037 C -4. 016094 1. 087051 0. 000035 C -4. 536617 -0. 191264 0. 000003 C -3. 680760 -1. 298996 -0. 000029 C -2. 302176 -1. 118836 -0. 000030 H -2. 211149 2. 264065 0. 000063 H -4. 671826 1. 936362 0. 000060 H -5. 599715 -0. 338981 0. 000003 H -4. 089055 -2. 291350 -0. 000053 H -1. 634622 -1. 955575 -0. 000054	$ 1 (CI-CCW, \ evel 1) \\ N -0. 388629 0. 480109 0. 000009 \\ N 0. 395269 -0. 469761 -0. 000047 \\ C 1. 786439 -0. 177038 -0. 000020 \\ C -1. 781876 0. 181674 0. 000004 \\ C -2. 636232 1. 280063 0. 000037 \\ C -4. 016094 1. 087051 0. 000035 \\ C -4. 536617 -0. 191264 0. 000003 \\ C -3. 680760 -1. 298996 -0. 000029 \\ C -2. 302176 -1. 118836 -0. 000030 \\ H -2. 211149 2. 264065 0. 000063 \\ H -4. 671826 1. 936362 0. 000063 \\ H -4. 671826 1. 936362 0. 000003 \\ H -4. 089055 -2. 291350 -0. 000053 \\ H -1. 634622 -1. 955575 -0. 000054 \\ $	 (trans, level 2) 0. 371160 -0. 481280 0. 000079 N -0. 372044 0. 484552 0. 000117 C -1. 761568 0. 186576 0. 000051 C 1. 762273 -0. 183162 0. 000019 C 2. 605905 -1. 273521 0. 000742 C 3. 991305 -1. 097305 0. 000742 C 4. 524192 0. 187629 -0. 000042 C 3. 666368 1. 297079 -0. 000813 C 2. 289246 1. 119073 -0. 000776 H 2. 177388 -2. 256442 0. 001323 H 4. 638571 -1. 952639 0. 001333 H 5. 587626 0. 331068 -0. 000085 H 4. 075229 2. 289222 -0. 001439 H 1. 625031 1. 957618 -0. 001346
1 (<i>trans</i> , level 1) N -0.388629 0.480109 0.000009 N 0.395269 -0.469761 -0.000047 C 1.786439 -0.177038 -0.000020 C -1.781876 0.181674 0.000004 C -2.636232 1.280063 0.000037 C -4.016094 1.087051 0.000035 C -4.536617 -0.191264 0.000003 C -3.680760 -1.298996 -0.000029 C -2.302176 -1.118836 -0.000030 H -2.211149 2.264065 0.000063 H -4.671826 1.936362 0.000063 H -4.089055 -2.291350 -0.000053 H -1.634622 -1.955575 -0.000054 C 2.632481 -1.275821 0.000033	$ 1 (CI-CCW, \ evel 1) \\ N -0. 388629 0. 480109 0. 000009 \\ N 0. 395269 -0. 469761 -0. 000047 \\ C 1. 786439 -0. 177038 -0. 000020 \\ C -1. 781876 0. 181674 0. 000004 \\ C -2. 636232 1. 280063 0. 000037 \\ C -4. 016094 1. 087051 0. 000035 \\ C -4. 536617 -0. 191264 0. 000003 \\ C -3. 680760 -1. 298996 -0. 000029 \\ C -2. 302176 -1. 118836 -0. 000030 \\ H -2. 211149 2. 264065 0. 000063 \\ H -4. 671826 1. 936362 0. 000063 \\ H -5. 599715 -0. 338981 0. 000003 \\ H -4. 089055 -2. 291350 -0. 000053 \\ H -1. 634622 -1. 955575 -0. 000054 \\ C 2. 632481 -1. 275821 0. 000033 \\ $	 (trans, level 2) 0. 371160 -0. 481280 0.000079 N -0. 372044 0.484552 0.000117 C -1. 761568 0.186576 0.000051 C 1. 762273 -0.183162 0.000019 C 2.605905 -1.273521 0.000742 C 3.991305 -1.097305 0.000742 C 4.524192 0.187629 -0.000422 C 3.666368 1.297079 -0.000813 C 2.289246 1.119073 -0.000776 H 2.177388 -2.256442 0.001323 H 4.638571 -1.952639 0.001333 H 5.587626 0.331068 -0.00085 H 4.075229 2.289222 -0.001439 H 1.625031 1.957618 -0.001346 C -2.606579 1.270992 0.000778
1 $(trans, level 1)$ N -0. 388629 0. 480109 0. 000009 N 0. 395269 -0. 469761 -0. 000047 C 1. 786439 -0. 177038 -0. 000020 C -1. 781876 0. 181674 0. 000004 C -2. 636232 1. 280063 0. 000037 C -4. 016094 1. 087051 0. 000035 C -4. 536617 -0. 191264 0. 000003 C -3. 680760 -1. 298996 -0. 000029 C -2. 302176 -1. 118836 -0. 000030 H -2. 211149 2. 264065 0. 000063 H -4. 671826 1. 936362 0. 000063 H -4. 089055 -2. 291350 -0. 000053 H -4. 089055 -2. 291350 -0. 000053 H -1. 634622 -1. 955575 -0. 000054 C 2. 632481 -1. 275821 0. 000033 C 4. 007581 -1. 092703 0. 000061	$\begin{array}{llllllllllllllllllllllllllllllllllll$	 (trans, level 2) 0.371160 -0.481280 0.000079 N -0.372044 0.484552 0.000117 C -1.761568 0.186576 0.000051 C 1.762273 -0.183162 0.000019 C 2.605905 -1.273521 0.000742 C 3.991305 -1.097305 0.000742 C 4.524192 0.187629 -0.000042 C 3.666368 1.297079 -0.000813 C 2.289246 1.119073 -0.000776 H 2.177388 -2.256442 0.001323 H 4.638571 -1.952639 0.001333 H 5.587626 0.331068 -0.00085 H 4.075229 2.289222 -0.001439 H 1.625031 1.957618 -0.001346 C -2.606579 1.270992 0.000778 C -3.996486 1.087357 0.000750
1 $(trans, level 1)$ N -0. 388629 0. 480109 0. 000009 N 0. 395269 -0. 469761 -0. 000047 C 1. 786439 -0. 177038 -0. 000020 C -1. 781876 0. 181674 0. 000004 C -2. 636232 1. 280063 0. 000037 C -4. 016094 1. 087051 0. 000035 C -4. 536617 -0. 191264 0. 000003 G -3. 680760 -1. 298996 -0. 000029 C -2. 302176 -1. 118836 -0. 000030 H -2. 211149 2. 264065 0. 000063 H -4. 671826 1. 936362 0. 000063 H -4. 671826 1. 936362 0. 000063 H -4. 089055 -2. 291350 -0. 000053 H -1. 634622 -1. 955575 -0. 000054 C 2. 632481 -1. 275821 0. 000033 C 4. 007581 -1. 092703 0. 000061 C 4. 532387 0. 191110 0.000027	1 (CI-CCW, level 1) N -0.388629 0.480109 0.000009 N 0.395269 -0.469761 -0.000047 C 1.786439 -0.177038 -0.000020 C -1.781876 0.181674 0.000004 C -2.636232 1.280063 0.000037 C -4.016094 1.087051 0.000035 C -4.536617 -0.191264 0.000003 C -3.680760 -1.298996 -0.000029 C -2.302176 -1.118836 -0.000003 H -2.211149 2.264065 0.000063 H -4.671826 1.936362 0.000063 H -4.671826 1.936362 0.000063 H -1.634622 -1.955575 -0.000053 H -1.634622 -1.955575 -0.000054 C 2.632481 -1.275821 0.000033 C 4.007581 -1.092703 0.000061 C 4.532387 0.191110 0.000027	 (trans, level 2) N 0.371160 -0.481280 0.000079 N -0.372044 0.484552 0.000117 C -1.761568 0.186576 0.000051 C 1.762273 -0.183162 0.000742 C 3.991305 -1.273521 0.000742 C 3.991305 -1.097305 0.000742 C 4.524192 0.187629 -0.000042 C 3.666368 1.297079 -0.000813 C 2.289246 1.119073 -0.000776 H 2.177388 -2.256442 0.001323 H 4.638571 -1.952639 0.001333 H 5.587626 0.331068 -0.00085 H 4.075229 2.289222 -0.001439 H 1.625031 1.957618 -0.001346 C -2.606579 1.270992 0.000778 C -3.996486 1.087357 0.000750 C -4.520201 -0.181667 -0.000044
1 $(trans, level 1)$ N -0.388629 0.480109 0.000009 N 0.395269 -0.469761 -0.000047 C 1.786439 -0.177038 -0.000020 C -1.781876 0.181674 0.000004 C -2.636232 1.280063 0.000037 C -4.016094 1.087051 0.000035 C -4.536617 -0.191264 0.000003 C -3.680760 -1.298996 -0.000029 C -2.302176 -1.118836 -0.000030 H -2.211149 2.264065 0.000063 H -4.671826 1.936362 0.000063 H -4.089055 -2.291350 -0.000053 H -1.634622 -1.955575 -0.000054 C 2.632481 -1.275821 0.000033 G 4.007581 -1.092703 0.000061 C 4.532387 0.191110 0.000027 C 3.681125 1.291729 -0.000033	1 (CI-CCW, level 1) N -0.388629 0.480109 0.000009 N 0.395269 -0.469761 -0.000047 C 1.786439 -0.177038 -0.000020 C -1.781876 0.181674 0.000004 C -2.636232 1.280063 0.000037 C -4.016094 1.087051 0.000035 C -4.536617 -0.191264 0.000003 C -3.680760 -1.298996 -0.000029 C -2.302176 -1.118836 -0.000030 H -2.211149 2.264065 0.000063 H -4.671826 1.936362 0.000063 H -4.071826 1.936362 0.000063 H -4.089055 -2.291350 -0.000053 H -1.634622 -1.955575 -0.000054 C 2.632481 -1.275821 0.000033 C 4.007581 -1.092703 0.000061 C 4.532387 0.191110 0.000027 C 3.681125 1.291729 -0.000033	$\begin{array}{c ccccccccccccccccccccccccccccccccccc$
1 $(trans, level 1)$ N -0.388629 0.480109 0.000009 N 0.395269 -0.469761 -0.000047 C 1.786439 -0.177038 -0.000020 C -1.781876 0.181674 0.000004 C -2.636232 1.280063 0.000037 C -4.016094 1.087051 0.000035 C -4.536617 -0.191264 0.000003 C -3.680760 -1.298996 -0.000029 C -2.302176 -1.118836 -0.000030 H -2.211149 2.264065 0.000063 H -4.671826 1.936362 0.000063 H -4.089055 -2.291350 -0.000053 H -1.634622 -1.955575 -0.000054 C 2.632481 -1.275821 0.000033 C 4.007581 -1.092703 0.000061 C 4.532387 0.191110 0.000027 C 3.681125 1.291729 -0.000032 C 2.308837 1.113233 -0.00055	1 (CI-CCW, level 1) N -0.388629 0.480109 0.000009 N 0.395269 -0.469761 -0.000047 C 1.786439 -0.177038 -0.000020 C -1.781876 0.181674 0.000004 C -2.636232 1.280063 0.000037 C -4.016094 1.087051 0.000035 C -4.536617 -0.191264 0.000003 C -3.680760 -1.298996 -0.000029 C -2.302176 -1.118836 -0.000030 H -2.211149 2.264065 0.000063 H -4.671826 1.936362 0.000063 H -4.071826 1.936362 0.000003 H -4.089055 -2.291350 -0.000053 H -1.634622 -1.955575 -0.000054 C 2.632481 -1.275821 0.000033 C 4.007581 -1.092703 0.000061 C 4.532387 0.191110 0.000027 C 3.681125 1.291729 -0.000032 C 2.308837 1.113233 -0.000055	$\begin{array}{c ccccccccccccccccccccccccccccccccccc$
1 $(trans, level 1)$ N -0. 388629 0. 480109 0. 000009 N 0. 395269 -0. 469761 -0. 000047 C 1. 786439 -0. 177038 -0. 000020 C -1. 781876 0. 181674 0. 000004 C -2. 636232 1. 280063 0. 000037 C -4. 016094 1. 087051 0. 000035 C -4. 536617 -0. 191264 0. 000003 C -3. 680760 -1. 298996 -0. 000029 C -2. 302176 -1. 118836 -0. 000030 H -2. 211149 2. 264065 0. 000063 H -4. 671826 1. 936362 0. 000060 H -5. 599715 -0. 338981 0. 000003 H -4. 089055 -2. 291350 -0. 000053 H -1. 634622 -1. 955575 -0. 000054 C 2. 632481 -1. 275821 0. 000033 C 4. 007581 -1. 092703 0. 000061 C 4. 532387 0. 191110 0. 000027 C 3. 681125 1. 291729 -0. 00032 C 2. 308837 1. 113233 -0. 000055 H 2. 200746 -2. 256973 0. 000052	1 (CI-CCW, level 1) N -0.388629 0.480109 0.000009 N 0.395269 -0.469761 -0.000047 C 1.786439 -0.177038 -0.000020 C -1.781876 0.181674 0.000004 C -2.636232 1.280063 0.000037 C -4.016094 1.087051 0.000035 C -4.536617 -0.191264 0.000003 C -3.680760 -1.298996 -0.000029 C -2.302176 -1.118836 -0.000003 H -2.211149 2.264065 0.000063 H -4.671826 1.936362 0.000060 H -5.599715 -0.338981 0.000003 H -4.089055 -2.291350 -0.000053 H -1.634622 -1.955575 -0.000054 C 2.632481 -1.275821 0.000033 C 4.007581 -1.092703 0.000061 C 4.532387 0.191110 0.000027 C 3.681125 1.291729 -0.000032 C 2.308837 1.113233 -0.000055 H 2.200746 -2 256973 0.000052	$\begin{array}{cccccccccccccccccccccccccccccccccccc$
1 $(trans, level 1)$ N -0. 388629 0. 480109 0. 000009 N 0. 395269 -0. 469761 -0. 000047 C 1. 786439 -0. 177038 -0. 000020 C -1. 781876 0. 181674 0. 000004 C -2. 636232 1. 280063 0. 000037 C -4. 016094 1. 087051 0. 000035 C -4. 536617 -0. 191264 0. 000003 C -3. 680760 -1. 298996 -0. 000029 C -2. 302176 -1. 118836 -0. 000030 H -2. 211149 2. 264065 0. 000063 H -4. 671826 1. 936362 0. 000063 H -4. 671826 1. 936362 0. 000003 H -4. 089055 -2. 291350 -0. 000053 H -1. 634622 -1. 955575 -0. 000054 C 2. 632481 -1. 275821 0. 000033 C 4. 007581 -1. 092703 0. 000061 C 4. 532387 0. 191110 0. 000027 C 3. 681125 1. 291729 -0. 000032 C 2. 308837 1. 113233 -0. 000055 H 2. 200746 -2. 256973 0. 000052 H 4. 661283 -1 943231 0. 000106	1 (CI-CCW, level 1) N -0.388629 0.480109 0.000009 N 0.395269 -0.469761 -0.000047 C 1.786439 -0.177038 -0.000020 C -1.781876 0.181674 0.000004 C -2.636232 1.280063 0.000037 C -4.016094 1.087051 0.000035 C -4.536617 -0.191264 0.000003 C -3.680760 -1.298996 -0.000029 C -2.302176 -1.118836 -0.000003 H -2.211149 2.264065 0.000063 H -4.671826 1.936362 0.000063 H -4.671826 1.936362 0.0000053 H -1.634622 -1.955575 -0.000053 H -1.634622 -1.955575 -0.000054 C 2.632481 -1.275821 0.000033 C 4.007581 -1.092703 0.000061 C 4.532387 0.191110 0.000027 C 3.681125 1.291729 -0.000032 C 2.308837 1.113233 -0.000055 H 2.200746 -2.256973 0.000052 H 4.661283 -1.943231 0.00116	1 (<i>trans</i> , level 2) N 0.371160 -0.481280 0.00079 N -0.372044 0.484552 0.000117 C -1.761568 0.186576 0.000051 C 1.762273 -0.183162 0.000742 C 3.991305 -1.273521 0.000742 C 4.524192 0.187629 -0.000042 C 3.666368 1.297079 -0.000813 C 2.289246 1.119073 -0.000776 H 2.177388 -2.256442 0.001323 H 4.638571 -1.952639 0.001333 H 5.587626 0.331068 -0.000855 H 4.075229 2.289222 -0.001439 H 1.625031 1.957618 -0.001346 C -2.606579 1.270992 0.000778 C -3.996486 1.087357 0.000750 C -4.520201 -0.181667 -0.000844 C -3.661058 -1.296042 -0.000813 C -2.291092 -1.119919 -0.000760 H -2.184186 2.256447 0.00134
1 $(trans, level 1)$ N -0.388629 0.480109 0.000009 N 0.395269 -0.469761 -0.000047 C 1.786439 -0.177038 -0.000020 C -1.781876 0.181674 0.000004 C -2.636232 1.280063 0.000037 C -4.016094 1.087051 0.000035 C -4.536617 -0.191264 0.000003 C -3.680760 -1.298996 -0.000029 C -2.302176 -1.118836 -0.000030 H -2.211149 2.264065 0.000063 H -4.671826 1.936362 0.000063 H -4.089055 -2.291350 -0.000053 H -1.634622 -1.955575 -0.000054 C 2.632481 -1.275821 0.000033 C 4.007581 -1.092703 0.000061 C 4.532387 0.191110 0.000027 C 3.681125 1.291729 -0.000032 C 2.308837 1.113233 -0.000055 H 2.200746 -2.256973 0.000052 H 4.661283 -1.943231 0.00106 H 5.595650 0.336740 0.000045	1 (CI-CCW, level 1) N -0.388629 0.480109 0.000009 N 0.395269 -0.469761 -0.000047 C 1.786439 -0.177038 -0.000020 C -1.781876 0.181674 0.000004 C -2.636232 1.280063 0.000037 C -4.016094 1.087051 0.000035 C -4.536617 -0.191264 0.000003 C -3.680760 -1.298996 -0.000029 C -2.302176 -1.118836 -0.000030 H -2.211149 2.264065 0.000063 H -4.671826 1.936362 0.000063 H -4.671826 1.936362 0.000003 H -4.089055 -2.291350 -0.000053 H -1.634622 -1.955575 -0.000054 C 2.632481 -1.275821 0.000033 C 4.007581 -1.092703 0.000061 C 4.532387 0.191110 0.000027 C 3.681125 1.291729 -0.000032 C 2.308837 1.113233 -0.000055 H 2.200746 -2.256973 0.000052 H 4.661283 -1.943231 0.000106 H 5 595650 0.336740 0.000045	$\begin{array}{cccccccccccccccccccccccccccccccccccc$
1 $(trans, level 1)$ N -0.388629 0.480109 0.000009 N 0.395269 -0.469761 -0.000047 C 1.786439 -0.177038 -0.000020 C -1.781876 0.181674 0.000004 C -2.636232 1.280063 0.000037 C -4.016094 1.087051 0.000035 C -4.536617 -0.191264 0.000003 C -3.680760 -1.298996 -0.000029 C -2.302176 -1.118836 -0.000030 H -2.211149 2.264065 0.000063 H -4.671826 1.936362 0.000063 H -4.671826 1.936362 0.0000053 H -4.089055 -2.291350 -0.000053 H -1.634622 -1.955575 -0.000054 C 2.632481 -1.275821 0.000033 C 4.007581 -1.092703 0.000061 C 4.532387 0.191110 0.000027 C 3.681125 1.291729 -0.000032 C 2.308837 1.113233 -0.000055 H 2.200746 -2.256973 0.000052 H 4.661283 -1.943231 0.000106 H 5.595650 0.336740 0.000045 H 4.098071 2.394142 -0.00065	1 (CI-CCW, level 1) N -0.388629 0.480109 0.000009 N 0.395269 -0.469761 -0.000047 C 1.786439 -0.177038 -0.000020 C -1.781876 0.181674 0.000004 C -2.636232 1.280063 0.000037 C -4.016094 1.087051 0.000035 C -4.536617 -0.191264 0.000003 C -3.680760 -1.298996 -0.000029 C -2.302176 -1.118836 -0.000030 H -2.211149 2.264065 0.000063 H -4.671826 1.936362 0.000063 H -4.671826 1.936362 0.000063 H -4.089055 -2.291350 -0.000053 H -1.634622 -1.955575 -0.000054 C 2.632481 -1.275821 0.000033 C 4.007581 -1.092703 0.000061 C 4.532387 0.191110 0.000027 C 3.681125 1.291729 -0.000032 C 2.308837 1.113233 -0.000055 H 2.200746 -2.256973 0.000052 H 4.661283 -1.943231 0.000106 H 5.595650 0.336740 0.000045 H 4.089071 2.284142 -0.000052	1 (<i>trans</i> , level 2) N 0.371160 -0.481280 0.00079 N -0.372044 0.484552 0.000117 C -1.761568 0.186576 0.000051 C 1.762273 -0.183162 0.000742 C 3.991305 -1.097305 0.000742 C 3.991305 -1.097305 0.000742 C 4.524192 0.187629 -0.000442 C 3.666368 1.297079 -0.000813 C 2.289246 1.119073 -0.000776 H 2.177388 -2.256442 0.001323 H 4.638571 -1.952639 0.001333 H 5.587626 0.331068 -0.000855 H 4.075229 2.289222 -0.001439 H 1.625031 1.957618 -0.001346 C -2.606579 1.270992 0.000778 C -3.996486 1.087357 0.000750 C -4.520201 -0.181667 -0.000444 C -3.661058 -1.296042 -0.00813 C -2.291092 -1.119919 -0.000760 H -2.184186 2.256447 0.001376 H -4.644111 1.942440 0.001341 H -5.583176 -0.328536 -0.000922 H -4.073545 -2.266400 0.001445
1 $(trans, level 1)$ N -0.388629 0.480109 0.000009 N 0.395269 -0.469761 -0.000047 C 1.786439 -0.177038 -0.000020 C -1.781876 0.181674 0.000004 C -2.636232 1.280063 0.000037 C -4.016094 1.087051 0.000035 C -4.536617 -0.191264 0.000003 C -3.680760 -1.298996 -0.000029 C -2.302176 -1.118836 -0.000030 H -2.211149 2.264065 0.000063 H -4.671826 1.936362 0.000060 H -5.599715 -0.338981 0.000003 H -4.089055 -2.291350 -0.000053 H -1.634622 -1.955575 -0.000054 C 2.632481 -1.275821 0.000033 C 4.007581 -1.092703 0.000061 C 4.532387 0.191110 0.000027 C 3.681125 1.291729 -0.000032 C 2.308837 1.113233 -0.000055 H 2.200746 -2.256973 0.000055 H 4.661283 -1.943231 0.000106 H 5.595650 0.336740 0.000045 H 4.089071 2.284143 -0.00062	1 (CI-CCW, level 1) N -0.388629 0.480109 0.000009 N 0.395269 -0.469761 -0.000047 C 1.786439 -0.177038 -0.000020 C -1.781876 0.181674 0.000004 C -2.636232 1.280063 0.000037 C -4.016094 1.087051 0.000035 C -4.536617 -0.191264 0.000003 C -3.680760 -1.298996 -0.000029 C -2.302176 -1.118836 -0.000030 H -2.211149 2.264065 0.000063 H -4.671826 1.936362 0.000063 H -4.671826 1.936362 0.0000053 H -4.089055 -2.291350 -0.000053 H -1.634622 -1.955575 -0.000054 C 2.632481 -1.275821 0.000033 C 4.007581 -1.092703 0.000061 C 4.532387 0.191110 0.000027 C 3.681125 1.291729 -0.000032 C 2.308837 1.113233 -0.000055 H 2.200746 -2.256973 0.000055 H 4.661283 -1.943231 0.000106 H 5.595650 0.336740 0.000045 H 4.089071 2.284143 -0.000062	$\begin{array}{c} 1 & (trans, \ evel \ 2) \\ N & 0. 371160 & -0. 481280 & 0. 000079 \\ N & -0. 372044 & 0. 484552 & 0. 000117 \\ C & -1. 761568 & 0. 186576 & 0. 000051 \\ C & 1. 762273 & -0. 183162 & 0. 000742 \\ C & 3. 991305 & -1. 097305 & 0. 000742 \\ C & 3. 991305 & -1. 097305 & 0. 000742 \\ C & 3. 666368 & 1. 297079 & -0. 000813 \\ C & 2. 289246 & 1. 119073 & -0. 000776 \\ H & 2. 177388 & -2. 256442 & 0. 001323 \\ H & 4. 638571 & -1. 952639 & 0. 001333 \\ H & 5. 587626 & 0. 331068 & -0. 000855 \\ H & 4. 075229 & 2. 289222 & -0. 001439 \\ H & 1. 625031 & 1. 957618 & -0. 000778 \\ C & -2. 606579 & 1. 270992 & 0. 000778 \\ C & -3. 996486 & 1. 087357 & 0. 000750 \\ C & -4. 520201 & -0. 181667 & -0. 000044 \\ C & -3. 661058 & -1. 296042 & -0. 000813 \\ C & -2. 291092 & -1. 119919 & -0. 000760 \\ H & -2. 184186 & 2. 256447 & 0. 001376 \\ H & -4. 644111 & 1. 942440 & 0. 001341 \\ H & -5. 583176 & -0. 328536 & -0. 000092 \\ H & -4. 073545 & -2. 286490 & -0. 001446 \\ \end{array}$

1	(CI-CW, leve	el 2)	
Ν	0. 484624 -1	. 139007	-0. 724487
Ν	-0. 593621 -1	. 496790	-0. 123620
C	1.613206 -0	. 503408	-0. 259457
C	-1.656136 -0	. 580236	-0. 119856
С	-2.825796 -1	. 012842	0. 539517
С	-3.912690 -0	. 183826	0. 628930
С	-3.870768 1	. 096606	0.053400
С	-2. 738627 1	. 522570	-0. 604193
С	-1.620737 0	. 689772	-0. 700015
H	-2.835726 -1	. 997233	0.964139
H	-4.800180 -0	. 511629	1. 134262
H	-4. 727051 1	. 739128	0. 123256
Η	-2.709710 2	. 497768	-1.050287
H	-0. 746471 1	. 016607	-1.224665
C	2.663492 -0	. 257637	-1. 177389
С	3.812416	. 372802	-0. 750186
С	3.951103 0	. 770494	0. 593662
С	2.930232	. 523766	1. 476589
С	1.752899 -0	. 113442	1.060119
Η	2.545989 -0	. 572652	-2. 195222
Η	4.607035 0	. 558070	-1. 447086
Η	4.848706 1	. 258639	0.919319
Η	3.023164 0	. 817539	2. 504642
Η	0.965659 -0	. 303377	1.761663
1	(CI-CCW, le	vel 2)	
1 N	(CI-CCW, le ⁻ -0.485924 -1	vel 2) .108218	-0. 760617
1 N N	(CI-CCW, le -0.485924 -1 0.581186 -1	vel 2) . 108218 . 488350	-0. 760617 -0. 173042
1 N N C	(CI-CCW, let -0.485924 -1 0.581186 -1 1.670755 -C	vel 2) . 108218 . 488350 0. 580770	-0. 760617 -0. 173042 -0. 131621
1 N C C	(CI-CCW, let -0.485924 -1 0.581186 -1 1.670755 -C 2.800229 -1	vel 2) . 108218 . 488350 0. 580770 . 025320	-0. 760617 -0. 173042 -0. 131621 0. 515871
1 N C C	(CI-CCW, let -0. 485924 -1 0. 581186 -1 1. 670755 -C 2. 800229 -1 3. 919725 -C	vel 2) . 108218 . 488350 0. 580770 . 025320 0. 191134	-0. 760617 -0. 173042 -0. 131621 0. 515871 0. 636279
1 N C C C	(CI-CCW, let -0.485924 -1 0.581186 -1 1.670755 -C 2.800229 -1 3.919725 -C 3.897234 1	vel 2) . 108218 . 488350 0. 580770 . 025320 0. 191134 . 071683	-0. 760617 -0. 173042 -0. 131621 0. 515871 0. 636279 0. 097657
1 N C C C C	(CI-CCW, let -0. 485924 -1 0. 581186 -1 1. 670755 -C 2. 800229 -1 3. 919725 -C 3. 897234 1 2. 749449 1	vel 2) . 108218 . 488350 0. 580770 . 025320 0. 191134 . 071683 . 528593	-0. 760617 -0. 173042 -0. 131621 0. 515871 0. 636279 0. 097657 -0. 576730
1 N C C C C C C	(CI-CCW, let -0. 485924 -1 0. 581186 -1 1. 670755 -C 2. 800229 -1 3. 919725 -C 3. 897234 1 2. 749449 1 1. 641397 C	vel 2) . 108218 . 488350). 580770 0. 025320 0. 191134 . 071683 . 528593 0. 713542	-0. 760617 -0. 173042 -0. 131621 0. 515871 0. 636279 0. 097657 -0. 576730 -0. 694764
1 N C C C C C C H	(CI-CCW, let -0. 485924 -1 0. 581186 -1 1. 670755 -C 2. 800229 -1 3. 919725 -C 3. 897234 1 2. 749449 1 1. 641397 C 4. 753736 1	vel 2) . 108218 . 488350 . 580770 . 025320 . 191134 . 071683 . 528593 . 713542 . 712051	-0. 760617 -0. 173042 -0. 131621 0. 515871 0. 636279 0. 097657 -0. 576730 -0. 694764 0. 183534
1 N N C C C C C C H H	(CI-CCW, let -0. 485924 -1 0. 581186 -1 1. 670755 -C 2. 800229 -1 3. 919725 -C 3. 897234 1 2. 749449 1 1. 641397 C 4. 753736 1 2. 737864 2	vel 2) . 108218 . 488350 0. 580770 0. 025320 0. 191134 . 071683 . 528593 0. 713542 . 712051 2. 512908	-0. 760617 -0. 173042 -0. 131621 0. 515871 0. 636279 0. 097657 -0. 576730 -0. 694764 0. 183534 -1. 003045
1 N C C C C C C C H H H	(CI-CCW, let -0. 485924 -1 0. 581186 -1 1. 670755 -C 2. 800229 -1 3. 919725 -C 3. 897234 1 2. 749449 1 1. 641397 C 4. 753736 1 2. 737864 2 0. 768197 1	vel 2) . 108218 . 488350 0. 580770 0. 025320 0. 191134 . 071683 0. 713542 . 713542 . 712051 2. 512908 . 048684	-0. 760617 -0. 173042 -0. 131621 0. 515871 0. 636279 0. 097657 -0. 576730 -0. 694764 0. 183534 -1. 003045 -1. 215944
1 N N C C C C C C H H H C	(CI-CCW, let -0. 485924 -1 0. 581186 -1 1. 670755 -C 2. 800229 -1 3. 919725 -C 3. 897234 1 2. 749449 1 1. 641397 C 4. 753736 1 2. 737864 2 0. 768197 1 -1. 619481 -C	vel 2) . 108218 . 488350 0. 580770 0. 191134 . 071683 . 528593 0. 713542 . 712051 2. 512908 . 048684 0. 490521	-0. 760617 -0. 173042 -0. 131621 0. 515871 0. 636279 0. 097657 -0. 576730 -0. 694764 0. 183534 -1. 003045 -1. 215944 -0. 274144
1 N N C C C C C C H H H C C	(CI-CCW, let -0. 485924 -1 0. 581186 -1 1. 670755 -C 2. 800229 -1 3. 919725 -C 3. 897234 1 2. 749449 1 1. 641397 C 4. 753736 1 2. 737864 2 0. 768197 1 -1. 619481 -C -1. 760093 -C	vel 2) . 108218 . 488350 0. 580770 . 025320 0. 191134 . 071683 . 528593 0. 713542 . 712051 2. 512908 . 048684 0. 490521 0. 145229	-0. 760617 -0. 173042 -0. 131621 0. 515871 0. 636279 0. 097657 -0. 576730 -0. 694764 0. 183534 -1. 003045 -1. 215944 -0. 274144 1. 056747
1 N N C C C C C C C H H H C C C C	(CI-CCW, let -0. 485924 -1 0. 581186 -1 1. 670755 -C 2. 800229 -1 3. 919725 -C 3. 897234 1 2. 749449 1 1. 641397 C 4. 753736 1 2. 737864 2 0. 768197 1 -1. 619481 -C -1. 760093 -C -2. 938641 C	vel 2) . 108218 . 488350 0. 580770 0. 191134 . 071683 0. 713542 . 712051 2. 512908 . 048684 0. 490521 0. 145229 0. 476524	-0. 760617 -0. 173042 -0. 131621 0. 515871 0. 636279 0. 097657 -0. 576730 -0. 694764 0. 183534 -1. 003045 -1. 215944 -0. 274144 1. 056747 1. 493347
1 N N C C C C C C C H H H C C C C C C C C	(CI-CCW, let -0. 485924 -1 0. 581186 -1 1. 670755 -C 2. 800229 -1 3. 919725 -C 3. 897234 1 2. 749449 1 1. 641397 C 4. 753736 1 2. 737864 2 0. 768197 1 -1. 619481 -C -1. 760093 -C -2. 938641 C -3. 958353 C	 vel 2) . 108218 . 488350 . 580770 . 025320 . 191134 . 071683 . 528593 . 713542 . 712051 . 512908 . 048684 . 490521 . 145229 . 476524 . 751631 	-0. 760617 -0. 173042 -0. 131621 0. 515871 0. 636279 0. 097657 -0. 576730 -0. 694764 0. 183534 -1. 003045 -1. 215944 -0. 274144 1. 056747 1. 493347 0. 617605
1 N N C C C C C C H H H C C C C C	(CI-CCW, let -0. 485924 -1 0. 581186 -1 1. 670755 -C 2. 800229 -1 3. 919725 -C 3. 897234 1 2. 749449 1 1. 641397 C 4. 753736 1 2. 737864 2 0. 768197 1 -1. 619481 -C -1. 760093 -C -2. 938641 C -3. 958353 C -3. 817959 C	 vel 2) . 108218 . 488350 . 580770 . 025320 . 191134 . 071683 . 528593 . 713542 . 712051 . 512908 . 048684 . 490521 . 145229 . 476524 . 751631 . 399191 	-0. 760617 -0. 173042 -0. 131621 0. 515871 0. 636279 0. 097657 -0. 576730 -0. 694764 0. 183534 -1. 003045 -1. 215944 -0. 274144 1. 056747 1. 493347 0. 617605 -0. 738659
1 N N C C C C C C C C C C C C C C C C C	(CI-CCW, let -0. 485924 -1 0. 581186 -1 1. 670755 -C 2. 800229 -1 3. 919725 -C 3. 897234 1 2. 749449 1 1. 641397 C 4. 753736 1 2. 737864 2 0. 768197 1 -1. 619481 -C -1. 760093 -C -2. 938641 C -3. 958353 C -3. 817959 C -2. 667913 -C	 vel 2) . 108218 . 488350 . 580770 . 025320 . 191134 . 071683 . 528593 . 713542 . 713542 . 712051 . 512908 . 048684 . 490521 . 145229 . 446524 . 751631 . 399191 . 216096 	-0. 760617 -0. 173042 -0. 131621 0. 515871 0. 636279 0. 097657 -0. 576730 -0. 694764 0. 183534 -1. 003045 -1. 215944 -0. 274144 1. 056747 1. 493347 0. 617605 -0. 738659 -1. 184830
1 N N C C C C C C C H H H C C C C C C H H H C C C C C C H H H C C C C C C H H H C C C C C C H H C C C C C C C H C	(CI-CCW, let -0. 485924 -1 0. 581186 -1 1. 670755 -C 2. 800229 -1 3. 919725 -C 3. 897234 1 2. 749449 1 1. 641397 0 4. 753736 1 2. 737864 2 0. 768197 1 -1. 619481 -C -1. 760093 -C -2. 938641 0 -3. 958353 0 -3. 817959 0 -2. 667913 -C -4. 856913 1	 vel 2) . 108218 . 488350 . 580770 . 025320 . 191134 . 071683 . 528593 . 713542 . 712051 . 512908 . 048684 . 490521 . 145229 . 476524 . 751631 . 399191 . 216096 . 227678 	-0. 760617 -0. 173042 -0. 131621 0. 515871 0. 636279 0. 097657 -0. 576730 -0. 694764 0. 183534 -1. 003045 -1. 215944 -0. 274144 1. 056747 1. 493347 0. 617605 -0. 738659 -1. 184830 0. 958242
1 N N C C C C C C C H H H C C C C C C H H H C C C C C C H H H C C C C C C H H H C C C C C C H H C	(CI-CCW, let -0. 485924 -1 0. 581186 -1 1. 670755 -C 2. 800229 -1 3. 919725 -C 3. 897234 1 2. 749449 1 1. 641397 C 4. 753736 1 2. 737864 2 0. 768197 1 -1. 619481 -C -1. 760093 -C -2. 938641 C -3. 958353 C -3. 817959 C -2. 667913 -C -4. 856913 1 -4. 612052 C	 vel 2) . 108218 . 488350 . 580770 . 025320 . 191134 . 071683 . 528593 . 713542 . 712051 . 512908 . 048684 . 490521 . 145229 . 476524 . 751631 . 399191 . 216096 . 227678 . 606772 	-0. 760617 -0. 173042 -0. 131621 0. 515871 0. 636279 0. 097657 -0. 576730 -0. 694764 0. 183534 -1. 003045 -1. 215944 -0. 274144 1. 056747 1. 493347 0. 617605 -0. 738659 -1. 184830 0. 958242 -1. 429810
1 N N C C C C C C C H H H C C C C C C H H H C C C C C C H H H C C C C C C H	(CI-CCW, let -0. 485924 -1 0. 581186 -1 1. 670755 -C 2. 800229 -1 3. 919725 -C 3. 897234 1 2. 749449 1 1. 641397 C 4. 753736 1 2. 737864 2 0. 768197 1 -1. 619481 -C -1. 760093 -C -2. 938641 C -3. 958353 C -3. 817959 C -2. 667913 -C -4. 856913 1 -4. 612052 C -2. 548918 -C	 vel 2) .108218 .488350 .580770 .025320 .191134 .071683 .528593 .713542 .713542 .712051 .512908 .048684 .490521 .145229 .476524 .751631 .399191 .216096 .227678 .606772 .497761 	-0. 760617 -0. 173042 -0. 131621 0. 515871 0. 636279 0. 097657 -0. 576730 -0. 694764 0. 183534 -1. 003045 -1. 215944 -0. 274144 1. 056747 1. 493347 0. 617605 -0. 738659 -1. 184830 0. 958242 -1. 429810 -2. 212216
1 N N C C C C C C C H H H C C C C C C H	(CI-CCW, ler -0. 485924 -1 0. 581186 -1 1. 670755 -C 2. 800229 -1 3. 919725 -C 3. 897234 1 2. 749449 1 1. 641397 C 4. 753736 1 2. 737864 2 0. 768197 1 -1. 619481 -C -2. 938641 C -3. 958353 C -3. 817959 C -2. 667913 -C -4. 856913 1 -4. 612052 C -3. 033183 C	 vel 2) . 108218 . 488350 . 580770 . 025320 . 191134 . 071683 . 528593 . 713542 . 713542 . 712051 . 145229 . 440521 . 145229 . 4476524 . 751631 . 399191 . 216096 . 227678 . 606772 . 497761 . 735765 	-0. 760617 -0. 173042 -0. 131621 0. 515871 0. 636279 0. 097657 -0. 576730 -0. 694764 0. 183534 -1. 003045 -1. 215944 -0. 274144 1. 056747 1. 493347 0. 617605 -0. 738659 -1. 184830 0. 958242 -1. 429810 -2. 212216 2. 530470
1 N N C C C C C C H H H H C C C C C C H H H H H	(CI-CCW, let -0. 485924 -1 0. 581186 -1 1. 670755 -0 2. 800229 -1 3. 919725 -0 3. 897234 1 2. 749449 1 1. 641397 0 4. 753736 1 2. 737864 2 0. 768197 1 -1. 619481 -0 -1. 760093 -0 -2. 938641 0 -3. 958353 0 -2. 667913 -1 -4. 856913 1 -4. 612052 0 -3. 033183 0 -0. 973157 -0	 vel 2) . 108218 . 488350 . 580770 . 025320 . 191134 . 071683 . 528593 . 713542 . 712051 . 512908 . 048684 . 490521 . 145229 . 476524 . 751631 . 399191 . 216096 . 227678 . 606772 . 497761 . 735765 . 358583 	-0. 760617 -0. 173042 -0. 131621 0. 515871 0. 636279 0. 097657 -0. 576730 -0. 694764 0. 183534 -1. 003045 -1. 215944 -0. 274144 1. 056747 1. 493347 0. 617605 -0. 738659 -1. 184830 0. 958242 -1. 184830 0. 958242 -1. 429810 -2. 212216 2. 530470 1. 751862

I	(<i>cis</i> , lev	el 3)	
Ν	0. 617475	2. 033329	-0. 039966
Ν	-0. 599669	2.035111	0. 007645
С	1.364353	0. 805448	-0. 103587
С	-1.349180	0.807695	0. 094110
С	-2. 296391	0. 561174	-0. 898191
С	-3. 115142	-0. 560445	-0. 811003
С	-3. 026390	-1. 407099	0. 279355
С	-2. 113434	-1. 134331	1. 297957
С	-1. 272794	-0. 026986	1. 211243
Н	-2. 381513	1. 245805	-1. 731037
Н	-3. 833380	-0. 758926	-1. 595436
Н	-3. 672616	-2. 271770	0. 349727
Н	-2. 054393	-1. 782687	2. 161656
Н	-0. 571618	0. 188480	2.003756
С	2. 320147	0. 589826	0.859805
С	3. 133675	-0. 550658	0. 799787
С	3. 014347	-1. 432121	-0. 247613
С	2. 075271	-1. 184278	-1.260086
С	1. 251378	-0. 074040	-1.193245
Н	2. 433828	1. 304690	1.663470
Н	3.865633	-0. 722529	1.577660
Н	3. 649721	-2. 305897	-0. 301536
Н	1. 991649	-1.862937	-2. 098139
Н	0. 532995	0. 121582	-1.975067
1	(<i>trans</i> , I	evel 3)	
1 N	(<i>trans</i> , I 0.371853	evel 3) -0.478403	0. 000132
1 N N	(<i>trans</i> , I 0. 371853 -0. 373107	evel 3) -0.478403 0.485199	0. 000132 0. 000142
1 N N C	(<i>trans</i> , 0. 371853 -0. 373107 -1. 761991	evel 3) -0. 478403 0. 485199 0. 187018	0. 000132 0. 000142 0. 000130
1 N N C	(<i>trans</i> , 1 0. 371853 -0. 373107 -1. 761991 1. 762583	evel 3) -0. 478403 0. 485199 0. 187018 -0. 180676	0. 000132 0. 000142 0. 000130 0. 000128
1 N C C C	(<i>trans</i> , 1 0. 371853 -0. 373107 -1. 761991 1. 762583 2. 606768	evel 3) -0. 478403 0. 485199 0. 187018 -0. 180676 -1. 273378	0. 000132 0. 000142 0. 000130 0. 000128 0. 000048
1 N C C C C	(<i>trans</i> , 1 0. 371853 -0. 373107 -1. 761991 1. 762583 2. 606768 3. 990571	evel 3) -0. 478403 0. 485199 0. 187018 -0. 180676 -1. 273378 -1. 098099	0. 000132 0. 000142 0. 000130 0. 000128 0. 000048 -0. 000106
1 N C C C C C	(<i>trans</i> , 1 0. 371853 -0. 373107 -1. 761991 1. 762583 2. 606768 3. 990571 4. 524703	evel 3) -0. 478403 0. 485199 0. 187018 -0. 180676 -1. 273378 -1. 098099 0. 186549	0. 000132 0. 000142 0. 000130 0. 000128 0. 000048 -0. 000106 -0. 000180
1 N C C C C C C C	(<i>trans</i> , 1 0. 371853 -0. 373107 -1. 761991 1. 762583 2. 606768 3. 990571 4. 524703 3. 668292	evel 3) -0. 478403 0. 485199 0. 187018 -0. 180676 -1. 273378 -1. 098099 0. 186549 1. 295293	0. 000132 0. 000142 0. 000130 0. 000128 0. 000048 -0. 000106 -0. 000180 -0. 000076
1 N C C C C C C C C	(<i>trans</i> , 1 0. 371853 -0. 373107 -1. 761991 1. 762583 2. 606768 3. 990571 4. 524703 3. 668292 2. 290411	evel 3) -0. 478403 0. 485199 0. 187018 -0. 180676 -1. 273378 -1. 098099 0. 186549 1. 295293 1. 119555	0. 000132 0. 000142 0. 000130 0. 000128 0. 000048 -0. 000180 -0. 000180 0. 000076 0. 000082
1 N C C C C C C H	(<i>trans</i> , 1 0. 371853 -0. 373107 -1. 761991 1. 762583 2. 606768 3. 990571 4. 524703 3. 668292 2. 290411 2. 172128	evel 3) -0. 478403 0. 485199 0. 187018 -0. 180676 -1. 273378 -1. 098099 0. 186549 1. 295293 1. 119555 -2. 263167	0. 000132 0. 000142 0. 000130 0. 000128 0. 000048 -0. 000166 -0. 000180 -0. 000076 0. 000082 0. 000075
1 N C C C C C H H	(<i>trans</i> , 1 0. 371853 -0. 373107 -1. 761991 1. 762583 2. 606768 3. 990571 4. 524703 3. 668292 2. 290411 2. 172128 4. 642624	evel 3) -0. 478403 0. 485199 0. 187018 -0. 180676 -1. 273378 -1. 098099 0. 186549 1. 295293 1. 119555 -2. 263167 -1. 960991	0. 000132 0. 000142 0. 000130 0. 000128 0. 000048 -0. 000106 -0. 000180 -0. 000076 0. 000082 0. 000075 -0. 000189
1 N C C C C C C C H H H	(<i>trans</i> , 1 0. 371853 -0. 373107 -1. 761991 1. 762583 2. 606768 3. 990571 4. 524703 3. 668292 2. 290411 2. 172128 4. 642624 5. 597049	evel 3) -0. 478403 0. 485199 0. 187018 -0. 180676 -1. 273378 -1. 098099 0. 186549 1. 295293 1. 119555 -2. 263167 -1. 960991 0. 329889	0. 000132 0. 000142 0. 000130 0. 000128 0. 000048 -0. 000106 -0. 000180 -0. 000075 -0. 000189 -0. 000189 -0. 000322
1 N C C C C C C C H H H	(<i>trans</i> , 1 0. 371853 -0. 373107 -1. 761991 1. 762583 2. 606768 3. 990571 4. 524703 3. 668292 2. 290411 2. 172128 4. 642624 5. 597049 4. 080540	evel 3) -0. 478403 0. 485199 0. 187018 -0. 180676 -1. 273378 -1. 098099 0. 186549 1. 295293 1. 119555 -2. 263167 -1. 960991 0. 329889 2. 295575	0. 000132 0. 000142 0. 000130 0. 000128 0. 000048 -0. 000106 -0. 000180 -0. 000075 -0. 0000189 -0. 000189 -0. 000322 -0. 000140
1 N C C C C C C C H H H H	(<i>trans</i> , 1 0. 371853 -0. 373107 -1. 761991 1. 762583 2. 606768 3. 990571 4. 524703 3. 668292 2. 290411 2. 172128 4. 642624 5. 597049 4. 080540 1. 621185	evel 3) -0. 478403 0. 485199 0. 187018 -0. 180676 -1. 273378 -1. 098099 0. 186549 1. 295293 1. 119555 -2. 263167 -1. 960991 0. 329889 2. 295575 1. 965074	0. 000132 0. 000142 0. 000128 0. 000128 0. 000048 -0. 000106 -0. 000180 -0. 000082 0. 000082 0. 000075 -0. 000189 -0. 000129
1 N C C C C C C C C C H H H H C	(<i>trans</i> , 1 0. 371853 -0. 373107 -1. 761991 1. 762583 2. 606768 3. 990571 4. 524703 3. 668292 2. 290411 2. 172128 4. 642624 5. 597049 4. 080540 1. 621185 -2. 606266	evel 3) -0. 478403 0. 485199 0. 187018 -0. 180676 -1. 273378 -1. 098099 0. 186549 1. 295293 1. 119555 -2. 263167 -1. 960991 0. 329889 2. 295575 1. 965074 1. 270353	0. 000132 0. 000142 0. 000130 0. 000128 0. 000048 -0. 000106 -0. 000180 -0. 000076 0. 000082 0. 000075 -0. 000189 -0. 000140 0. 000129 0. 000060
1 N C C C C C C C C H H H H C C	(<i>trans</i> , 1 0. 371853 -0. 373107 -1. 761991 1. 762583 2. 606768 3. 990571 4. 524703 3. 668292 2. 290411 2. 172128 4. 642624 5. 597049 4. 080540 1. 621185 -2. 606266 -3. 998822	evel 3) -0. 478403 0. 485199 0. 187018 -0. 180676 -1. 273378 -1. 098099 0. 186549 1. 295293 1. 119555 -2. 263167 -1. 960991 0. 329889 2. 295575 1. 965074 1. 270353 1. 086423	0. 000132 0. 000142 0. 000130 0. 000128 0. 000048 -0. 000106 -0. 000180 -0. 000075 -0. 000189 -0. 000189 -0. 000129 0. 0000129 0. 000060 -0. 000091
1 N C C C C C C C C C C C C C C C C C C	(<i>trans</i> , 1 0. 371853 -0. 373107 -1. 761991 1. 762583 2. 606768 3. 990571 4. 524703 3. 668292 2. 290411 2. 172128 4. 642624 5. 597049 4. 080540 1. 621185 -2. 606266 -3. 998822 -4. 521489	evel 3) -0. 478403 0. 485199 0. 187018 -0. 180676 -1. 273378 -1. 098099 0. 186549 1. 295293 1. 119555 -2. 263167 -1. 960991 0. 3298595 2. 295575 1. 965074 1. 270353 1. 086423 -0. 181682	0. 000132 0. 000142 0. 000130 0. 000128 0. 000048 -0. 000166 -0. 000180 -0. 000075 -0. 0000189 -0. 000189 -0. 000189 -0. 000129 0. 000060 -0. 000091 -0. 000163
1 N C C C C C C C C C C C C C C C C C C	(<i>trans</i> , 1 0. 371853 -0. 373107 -1. 761991 1. 762583 2. 606768 3. 990571 4. 524703 3. 668292 2. 290411 2. 172128 4. 642624 5. 597049 4. 080540 1. 621185 -2. 606266 -3. 998822 -4. 521489 -3. 660816	evel 3) -0. 478403 0. 485199 0. 187018 -0. 180676 -1. 273378 -1. 098099 0. 186549 1. 295293 1. 119555 -2. 263167 -1. 960991 0. 329889 2. 295575 1. 965074 1. 270353 1. 086423 -0. 181682 -1. 296440	0. 000132 0. 000142 0. 000130 0. 000128 0. 000048 -0. 000166 -0. 000180 -0. 000075 -0. 000082 0. 000075 -0. 000189 -0. 000189 -0. 000129 0. 000060 -0. 000091 -0. 000091 -0. 000078
1 N C C C C C C C C C C C C C C C C C C	(<i>trans</i> , 1 0. 371853 -0. 373107 -1. 761991 1. 762583 2. 606768 3. 990571 4. 524703 3. 668292 2. 290411 2. 172128 4. 642624 5. 597049 4. 080540 1. 621185 -2. 606266 -3. 998822 -4. 521489 -3. 660816 -2. 291325	evel 3) -0. 478403 0. 485199 0. 187018 -0. 180676 -1. 273378 -1. 098099 0. 186549 1. 295293 1. 119555 -2. 263167 -1. 960991 0. 329889 2. 295575 1. 965074 1. 270353 1. 086423 -0. 181682 -1. 296440 -1. 120897	0. 000132 0. 000142 0. 000130 0. 000128 0. 000048 -0. 000106 -0. 000180 -0. 000076 0. 000075 -0. 000189 -0. 000140 0. 000129 0. 0000129 0. 000060 -0. 0000163 -0. 000078 0. 000078 0. 000068
1 N C C C C C C C C H H H H C C C C C C C	(<i>trans</i> , 1 0. 371853 -0. 373107 -1. 761991 1. 762583 2. 606768 3. 990571 4. 524703 3. 668292 2. 290411 2. 172128 4. 642624 5. 597049 4. 080540 1. 621185 -2. 606266 -3. 998822 -4. 521489 -3. 660816 -2. 291325 -2. 178890	evel 3) -0. 478403 0. 485199 0. 187018 -0. 180676 -1. 273378 -1. 098099 0. 186549 1. 295293 1. 119555 -2. 263167 -1. 960991 0. 329889 2. 295575 1. 965074 1. 270353 1. 086423 -0. 181682 -1. 296440 -1. 120897 2. 263214	0. 000132 0. 000142 0. 000130 0. 000128 0. 000048 -0. 000106 -0. 000180 -0. 000075 -0. 000189 -0. 000189 -0. 000129 0. 0000129 0. 0000129 0. 000060 -0. 000013 -0. 000078 0. 000078 0. 000088
1 N N C C C C C C C H H H H H C C C C C H H	(<i>trans</i> , 1 0. 371853 -0. 373107 -1. 761991 1. 762583 2. 606768 3. 990571 4. 524703 3. 668292 2. 290411 2. 172128 4. 642624 5. 597049 4. 080540 1. 621185 -2. 606266 -3. 998822 -4. 521489 -3. 660816 -2. 291325 -2. 178890 -4. 652015	evel 3) -0. 478403 0. 485199 0. 187018 -0. 180676 -1. 273378 -1. 098099 0. 186549 1. 295293 1. 119555 -2. 263167 -1. 960991 0. 329889 2. 295575 1. 965074 1. 270353 1. 086423 -0. 181682 -1. 296440 -1. 120897 2. 263214 1. 948595	0. 000132 0. 000142 0. 000130 0. 000128 0. 000048 -0. 000166 -0. 000180 -0. 000075 -0. 0000189 -0. 000189 -0. 000189 -0. 000189 -0. 000189 -0. 000163 -0. 000068 0. 000068 0. 000068 -0. 000165
1 N N C C C C C C C H H H H H C C C C C H H H H H H C C C C H	(<i>trans.</i> 0. 371853 -0. 373107 -1. 761991 1. 762583 2. 606768 3. 990571 4. 524703 3. 668292 2. 290411 2. 172128 4. 642624 5. 597049 4. 080540 1. 621185 -2. 606266 -3. 998822 -4. 521489 -3. 660816 -2. 291325 -2. 178890 -4. 652015 -5. 593366	evel 3) -0. 478403 0. 485199 0. 187018 -0. 180676 -1. 273378 -1. 098099 0. 186549 1. 295293 1. 119555 -2. 263167 -1. 960991 0. 329889 2. 295575 1. 965074 1. 270353 1. 086423 -0. 181682 -1. 296440 -1. 120897 2. 263214 1. 948595 -0. 329769	0. 000132 0. 000142 0. 000130 0. 000128 0. 000048 -0. 000166 -0. 000180 -0. 000075 -0. 000082 0. 000075 -0. 000189 -0. 000189 -0. 000129 0. 000060 -0. 000091 -0. 000068 0. 000068 0. 000088 -0. 000165 -0. 000294
1 N N C C C C C C H H H H H C C C C C H	(<i>trans</i> , 1 0. 371853 -0. 373107 -1. 761991 1. 762583 2. 606768 3. 990571 4. 524703 3. 668292 2. 290411 2. 172128 4. 642624 5. 597049 4. 080540 1. 621185 -2. 606266 -3. 998822 -4. 521489 -3. 660816 -2. 291325 -2. 178890 -4. 652015 -5. 593366 -4. 076093	evel 3) -0. 478403 0. 485199 0. 187018 -0. 180676 -1. 273378 -1. 098099 0. 186549 1. 295293 1. 119555 -2. 263167 -1. 960991 0. 329889 2. 295575 1. 965074 1. 270353 1. 086423 -0. 181682 -1. 296440 -1. 120897 2. 263214 1. 948595 -0. 329769 -2. 295335	0. 000132 0. 000142 0. 000130 0. 000128 0. 000180 -0. 000106 -0. 000180 -0. 000075 -0. 000075 -0. 000189 -0. 000149 0. 0000129 0. 0000129 0. 0000163 -0. 0000163 -0. 0000165 -0. 000294 -0. 000144

1 (CI-CW, level 2)	1 (<i>cis</i> , level 3)	1 (CI-CW, level 3)
N 0.484624 -1.139007 -0.724487	N 0.617475 2.033329 -0.039966	N 0.487727 -1.139003 -0.728448
N -0.593621 -1.496790 -0.123620	N -0. 599669 2. 035111 0. 007645	N -0.592574 -1.489537 -0.123918
C 1.613206 -0.503408 -0.259457	C 1.364353 0.805448 -0.103587	C 1.612825 -0.503688 -0.258398
C -1.656136 -0.580236 -0.119856	C -1.349180 0.807695 0.094110	C -1.652877 -0.579141 -0.120392
C -2.825796 -1.012842 0.539517	C -2. 296391 0. 561174 -0. 898191	C -2.819221 -1.011714 0.547340
C -3. 912690 -0. 183826 0. 628930	C -3. 115142 -0. 560445 -0. 811003	C -3. 907956 -0. 185750 0. 637667
C -3.870768 1.096606 0.053400	C -3.026390 -1.407099 0.279355	C -3. 873522 1. 091678 0. 052851
C -2. 738627 1. 522570 -0. 604193	C -2. 113434 -1. 134331 1. 297957	C -2. 744936 1. 516587 -0. 614041
C -1. 620737 0. 689772 -0. 700015	C -1. 272794 -0. 026986 1. 211243	C -1. 625406 0. 689369 -0. 709850
H -2.835726 -1.997233 0.964139	H -2. 381513 1. 245805 -1. 731037	H -2. 821926 -2. 001072 0. 982437
H -4. 800180 -0. 511629 1. 134262	H -3.833380 -0.758926 -1.595436	H -4. 798303 -0. 517146 1. 154732
H -4. 727051 1. 739128 0. 123256	H -3. 672616 -2. 271770 0. 349727	H -4. 738156 1. 738038 0. 122131
H -2.709710 2.497768 -1.050287	H -2.054393 -1.782687 2.161656	H -2. 722424 2. 496887 -1. 070893
H -0. 746471 1. 016607 -1. 224665	H -0. 571618 0. 188480 2. 003756	H -0, 748097 1, 019019 -1, 245285
C = 2.663492 - 0.257637 - 1.177389	C 2 320147 0 589826 0 859805	C 2 667261 -0 263089 -1 175301
C 3 812416 0 372802 -0 750186	C = 3 + 33675 - 0 + 550658 = 0 + 799787	C 3 814314 0 368111 -0 747047
C 3 951103 0 770494 0 593662	3 014347 - 1 432121 - 0 247613	C 3 950554 0 772389 0 597167
C 2 930232 0 523766 1 476589	C = 2 075271 - 1 184278 - 1 260086	C 2 926964 0 530039 1 476017
$\begin{array}{c} 0 & 2.330232 & 0.323700 & 1.470303 \\ 0 & 1.752800 & 0.113442 & 1.060110 \\ \end{array}$	-1.251378 - 0.074040 - 1.103245	C = 1.747305 - 0.108483 = 1.058048
H = 2.545080 = 0.572652 = 2.105222	H = 2 433828 = 1 304690 = 1 663470	H = 2.550771 - 0.584830 - 2.200261
H = 4 = 607025 = 0 = 562070 = 1 = 447026	H = 2.965622 - 0.722520 + 577660	
H = 4.949706 = 1.259620 = 0.010210	H = 2 - 640721 - 2 - 205907 - 0 - 201526	H = 4.010900 = 0.000007 = 1.4490000 = 1.0000000000000000000000000000000
H 2 022164 0 917520 2 504642	H = 1 0.01640 -1 962027 -2 0.09120	
$\begin{array}{cccccccccccccccccccccccccccccccccccc$	$\begin{array}{cccccccccccccccccccccccccccccccccccc$	
11 0. 905059 -0. 505577 1. 701005	11 0. 332333 0. 121362 -1. 973007	11 0. 950605 -0. 295276 1. 704587
1 (CI-CCW, level 2)	1 (<i>trans</i> , level 3)	1 (CI-CCW, level 3)
1 (CI-CCW, level 2) N -0.485924 -1.108218 -0.760617	1 (<i>trans</i> , level 3) N 0.371853 -0.478403 0.000132	1 (CI-CCW, level 3) N -0.490146 -1.093351 -0.788895
1 (CI-CCW, level 2) N -0.485924 -1.108218 -0.760617 N 0.581186 -1.488350 -0.173042	1 (<i>trans</i> , level 3) N 0.371853 -0.478403 0.000132 N -0.373107 0.485199 0.000142	1 (CI-CCW, level 3) N -0.490146 -1.093351 -0.788895 N 0.577745 -1.478168 -0.203559
1 (CI-CCW, level 2) N -0.485924 -1.108218 -0.760617 N 0.581186 -1.488350 -0.173042 C 1.670755 -0.580770 -0.131621	1 (<i>trans</i> , level 3) N 0.371853 -0.478403 0.000132 N -0.373107 0.485199 0.000142 C -1.761991 0.187018 0.000130	1 (CI-CCW, level 3) N -0.490146 -1.093351 -0.788895 N 0.577745 -1.478168 -0.203559 C 1.668053 -0.577316 -0.143596
1 (CI-CCW, level 2) N -0.485924 -1.108218 -0.760617 N 0.581186 -1.488350 -0.173042 C 1.670755 -0.580770 -0.131621 C 2.800229 -1.025320 0.515871	1 (<i>trans</i> , level 3) N 0.371853 -0.478403 0.000132 N -0.373107 0.485199 0.000142 C -1.761991 0.187018 0.000130 C 1.762583 -0.180676 0.000128	1 (CI-CCW, level 3) N -0.490146 -1.093351 -0.788895 N 0.577745 -1.478168 -0.203559 C 1.668053 -0.577316 -0.143596 C 2.789411 -1.032662 0.508713
 (CI-CCW, level 2) N -0. 485924 -1. 108218 -0. 760617 N 0. 581186 -1. 488350 -0. 173042 C 1. 670755 -0. 580770 -0. 131621 C 2. 800229 -1. 025320 0. 515871 C 3. 919725 -0. 191134 0. 636279 	1 (<i>trans</i> , level 3) N 0.371853 -0.478403 0.000132 N -0.373107 0.485199 0.000142 C -1.761991 0.187018 0.000130 C 1.762583 -0.180676 0.000128 C 2.606768 -1.273378 0.000048	1 (CI-CCW, level 3) N -0. 490146 -1. 093351 -0. 788895 N 0. 577745 -1. 478168 -0. 203559 C 1. 668053 -0. 577316 -0. 143596 C 2. 789411 -1. 032662 0. 508713 C 3. 912901 -0. 202839 0. 646650
 (CI-CCW, level 2) N -0. 485924 -1. 108218 -0. 760617 N 0. 581186 -1. 488350 -0. 173042 C 1. 670755 -0. 580770 -0. 131621 C 2. 800229 -1. 025320 0. 515871 C 3. 919725 -0. 191134 0. 636279 C 3. 897234 1. 071683 0. 097657 	1 (<i>trans</i> , level 3) N 0.371853 -0.478403 0.000132 N -0.373107 0.485199 0.000142 C -1.761991 0.187018 0.000130 C 1.762583 -0.180676 0.000128 C 2.606768 -1.273378 0.000048 C 3.990571 -1.098099 -0.000106	1 (CI-CCW, level 3) N -0.490146 -1.093351 -0.788895 N 0.577745 -1.478168 -0.203559 C 1.668053 -0.577316 -0.143596 C 2.789411 -1.032662 0.508713 C 3.912901 -0.202839 0.646650 C 3.901034 1.063592 0.119063
 (CI-CCW, level 2) N -0. 485924 -1. 108218 -0. 760617 N 0. 581186 -1. 488350 -0. 173042 C 1. 670755 -0. 580770 -0. 131621 C 2. 800229 -1. 025320 0. 515871 C 3. 919725 -0. 191134 0. 636279 C 3. 897234 1. 071683 0. 097657 C 2. 749449 1. 528593 -0. 576730 	1 (<i>trans</i> , level 3) N 0.371853 -0.478403 0.000132 N -0.373107 0.485199 0.000142 C -1.761991 0.187018 0.000130 C 1.762583 -0.180676 0.000128 C 2.606768 -1.273378 0.000048 C 3.990571 -1.098099 -0.000106 C 4.524703 0.186549 -0.000180	1 (CI-CCW, level 3) N -0. 490146 -1. 093351 -0. 788895 N 0. 577745 -1. 478168 -0. 203559 C 1. 668053 -0. 577316 -0. 143596 C 2. 789411 -1. 032662 0. 508713 C 3. 912901 -0. 202839 0. 646650 C 3. 901034 1. 063592 0. 119063 C 2. 759851 1. 531147 -0. 561820
 (CI-CCW, level 2) N -0. 485924 -1. 108218 -0. 760617 N 0. 581186 -1. 488350 -0. 173042 C 1. 670755 -0. 580770 -0. 131621 C 2. 800229 -1. 025320 0. 515871 C 3. 919725 -0. 191134 0. 636279 C 3. 897234 1. 071683 0. 097657 C 2. 749449 1. 528593 -0. 576730 C 1. 641397 0. 713542 -0. 694764 	1 (<i>trans</i> , level 3) N 0.371853 -0.478403 0.000132 N -0.373107 0.485199 0.000142 C -1.761991 0.187018 0.000130 C 1.762583 -0.180676 0.000128 C 2.606768 -1.273378 0.000048 C 3.990571 -1.098099 -0.000106 C 4.524703 0.186549 -0.000180 C 3.668292 1.295293 -0.00076	1 (CI-CCW, level 3) N -0. 490146 -1. 093351 -0. 788895 N 0. 577745 -1. 478168 -0. 203559 C 1. 668053 -0. 577316 -0. 143596 C 2. 789411 -1. 032662 0. 508713 C 3. 912901 -0. 202839 0. 646650 C 3. 901034 1. 063592 0. 119063 C 2. 759851 1. 531147 -0. 561820 C 1. 648916 0. 723711 -0. 696006
 (CI-CCW, level 2) N -0. 485924 -1. 108218 -0. 760617 N 0. 581186 -1. 488350 -0. 173042 C 1. 670755 -0. 580770 -0. 131621 C 2. 800229 -1. 025320 0. 515871 C 3. 919725 -0. 191134 0. 636279 C 3. 897234 1. 071683 0. 097657 C 2. 749449 1. 528593 -0. 576730 C 1. 641397 0. 713542 -0. 694764 H 4. 753736 1. 712051 0. 183534 	 (trans, level 3) 0.371853 -0.478403 0.000132 -0.373107 0.485199 0.000142 -1.761991 0.187018 0.000130 1.762583 -0.180676 0.000128 2.606768 -1.273378 0.000048 3.990571 -1.098099 -0.000106 4.524703 0.186549 -0.000180 3.668292 1.295293 -0.00076 2.290411 1.119555 0.000082 	 (CI-CCW, level 3) -0. 490146 -1. 093351 -0. 788895 0. 577745 -1. 478168 -0. 203559 1. 668053 -0. 577316 -0. 143596 2. 789411 -1. 032662 0. 508713 3. 912901 -0. 202839 0. 646650 3. 901034 1. 063592 0. 119063 2. 759851 1. 531147 -0. 561820 C 1. 648916 0. 723711 -0. 696006 H 4. 767162 1. 704121 0. 218579
 (CI-CCW, level 2) -0.485924 -1.108218 -0.760617 0.581186 -1.488350 -0.173042 1.670755 -0.580770 -0.131621 2.800229 -1.025320 0.515871 3.919725 -0.191134 0.636279 3.897234 1.071683 0.097657 2.749449 1.528593 -0.576730 1.641397 0.713542 -0.694764 4.753736 1.712051 0.183534 2.737864 2.512908 -1.003045 	 (trans, level 3) 0.371853 -0.478403 0.000132 -0.373107 0.485199 0.000142 -1.761991 0.187018 0.000130 1.762583 -0.180676 0.000128 2.606768 -1.273378 0.000048 3.990571 -1.098099 -0.000106 4.524703 0.186549 -0.000180 3.668292 1.295293 -0.000076 2.290411 1.119555 0.000082 4.172128 -2.263167 0.00075 	 (CI-CCW, level 3) N -0. 490146 -1. 093351 -0. 788895 N 0. 577745 -1. 478168 -0. 203559 C 1. 668053 -0. 577316 -0. 143596 C 2. 789411 -1. 032662 0. 508713 C 3. 912901 -0. 202839 0. 646650 C 3. 901034 1. 063592 0. 119063 C 2. 759851 1. 531147 -0. 561820 C 1. 648916 0. 723711 -0. 696006 H 4. 767162 1. 704121 0. 218579 H 2. 755494 2. 526994 -0. 983871
 (CI-CCW, level 2) N -0. 485924 -1. 108218 -0. 760617 N 0. 581186 -1. 488350 -0. 173042 C 1. 670755 -0. 580770 -0. 131621 C 2. 800229 -1. 025320 0. 515871 C 3. 919725 -0. 191134 0. 636279 C 3. 897234 1. 071683 0. 097657 C 2. 749449 1. 528593 -0. 576730 C 1. 641397 0. 713542 -0. 694764 H 4. 753736 1. 712051 0. 183534 H 2. 737864 2. 512908 -1. 003045 H 0. 768197 1 048684 -1 215944 	 (trans, level 3) 0. 371853 -0. 478403 0. 000132 N -0. 373107 0. 485199 0. 000142 C -1. 761991 0. 187018 0. 000130 C 1. 762583 -0. 180676 0. 000128 C 2. 606768 -1. 273378 0. 000048 C 3. 990571 -1. 098099 -0. 000106 C 4. 524703 0. 186549 -0. 000180 C 3. 668292 1. 295293 -0. 000076 C 2. 290411 1. 119555 0. 000082 H 2. 172128 -2. 263167 0. 000075 H 4. 642624 -1 960991 -0 000189 	 (CI-CCW, level 3) N -0. 490146 -1. 093351 -0. 788895 N 0. 577745 -1. 478168 -0. 203559 C 1. 668053 -0. 577316 -0. 143596 C 2. 789411 -1. 032662 0. 508713 C 3. 912901 -0. 202839 0. 646650 C 3. 901034 1. 063592 0. 119063 C 2. 759851 1. 531147 -0. 561820 C 1. 648916 0. 723711 -0. 696006 H 4. 767162 1. 704121 0. 218579 H 2. 755494 2. 526994 -0. 983871 H 0. 775391 1. 071587 -1 226086
 (CI-CCW, level 2) -0.485924 -1.108218 -0.760617 0.581186 -1.488350 -0.173042 1.670755 -0.580770 -0.131621 2.800229 -1.025320 0.515871 3.919725 -0.191134 0.636279 3.897234 1.071683 0.097657 2.749449 1.528593 -0.576730 1.641397 0.713542 -0.694764 4.753736 1.712051 0.183534 2.737864 2.512908 -1.003045 0.768197 1.048684 -1.215944 C.1619481 -0.490521 -0.274144 	 (trans, level 3) 0.371853 -0.478403 0.000132 -0.373107 0.485199 0.000142 -1.761991 0.187018 0.000130 1.762583 -0.180676 0.000128 2.606768 -1.273378 0.000048 3.990571 -1.098099 -0.000106 4.524703 0.186549 -0.000180 3.668292 1.295293 -0.000076 2.290411 1.119555 0.000082 H 2.172128 -2.263167 0.000075 H 4.642624 -1.960991 -0.000189 H 5.597049 0.329889 -0.000322 	 (CI-CCW, level 3) N -0. 490146 -1.093351 -0.788895 N 0.577745 -1.478168 -0.203559 C 1.668053 -0.577316 -0.143596 C 2.789411 -1.032662 0.508713 C 3.912901 -0.202839 0.646650 C 3.901034 1.063592 0.119063 C 2.759851 1.531147 -0.561820 C 1.648916 0.723711 -0.696006 H 4.767162 1.704121 0.218579 H 2.755494 2.526994 -0.983871 H 0.775391 1.071587 -1.226086 C -1.619842 -0.485053 -0.283346
 (CI-CCW, level 2) -0.485924 -1.108218 -0.760617 0.581186 -1.488350 -0.173042 1.670755 -0.580770 -0.131621 2.800229 -1.025320 0.515871 3.919725 -0.191134 0.636279 3.897234 1.071683 0.097657 2.749449 1.528593 -0.576730 1.641397 0.713542 -0.694764 4.753736 1.712051 0.183534 2.737864 2.512908 -1.003045 M 0.768197 1.048684 -1.215944 C -1.619481 -0.490521 -0.274144 C -1 760093 -0.145229 1.056747 	 (trans, level 3) 0.371853 -0.478403 0.000132 -0.373107 0.485199 0.000142 -1.761991 0.187018 0.000130 1.762583 -0.180676 0.000128 2.606768 -1.273378 0.000048 3.990571 -1.098099 -0.000106 4.524703 0.186549 -0.000180 3.668292 1.295293 -0.000076 2.290411 1.119555 0.000082 4.642624 -1.960991 -0.000189 5.597049 0.329889 -0.000322 4.080540 2.295575 -0.000140 	 (CI-CCW, level 3) -0. 490146 -1. 093351 -0. 788895 0. 577745 -1. 478168 -0. 203559 1. 668053 -0. 577316 -0. 143596 2. 789411 -1. 032662 0. 508713 3. 912901 -0. 202839 0. 646650 3. 901034 1. 063592 0. 119063 C 2. 759851 1. 531147 -0. 561820 C 1. 648916 0. 723711 -0. 696006 H 4. 767162 1. 704121 0. 218579 H 2. 755494 2. 526994 -0. 983871 H 0. 775391 1. 071587 -1. 226086 C -1. 619842 -0. 485053 -0. 283346 C -1 755190 -0. 164681 1. 052806
 (CI-CCW, level 2) N -0. 485924 -1. 108218 -0. 760617 N 0. 581186 -1. 488350 -0. 173042 C 1. 670755 -0. 580770 -0. 131621 C 2. 800229 -1. 025320 0. 515871 C 3. 919725 -0. 191134 0. 636279 C 3. 897234 1. 071683 0. 097657 C 2. 749449 1. 528593 -0. 576730 C 1. 641397 0. 713542 -0. 694764 H 4. 753736 1. 712051 0. 183534 H 2. 737864 2. 512908 -1. 003045 H 0. 768197 1. 048684 -1. 215944 C -1. 619481 -0. 490521 -0. 274144 C -1. 760093 -0. 145229 1. 056747 C -2 938641 0. 476524 1. 493347 	 (trans, level 3) 0.371853 -0.478403 0.000132 -0.373107 0.485199 0.000142 -1.761991 0.187018 0.000130 1.762583 -0.180676 0.000128 2.606768 -1.273378 0.000048 3.990571 -1.098099 -0.000106 4.524703 0.186549 -0.000180 3.668292 1.295293 -0.000076 2.290411 1.119555 0.000082 2.172128 -2.263167 0.00075 4.642624 -1.960991 -0.000189 5.597049 0.329889 -0.000322 4.080540 2.295575 -0.000140 1.621185 1.965074 0.000128 	$ \begin{array}{llllllllllllllllllllllllllllllllllll$
1 (CI-CCW, level 2) N -0. 485924 -1. 108218 -0. 760617 N 0. 581186 -1. 488350 -0. 173042 C 1. 670755 -0. 580770 -0. 131621 C 2. 800229 -1. 025320 0. 515871 C 3. 919725 -0. 191134 0. 636279 C 3. 897234 1. 071683 0. 097657 C 2. 749449 1. 528593 -0. 576730 C 1. 641397 0. 713542 -0. 694764 H 4. 753736 1. 712051 0. 183534 H 2. 737864 2. 512908 -1. 003045 H 0. 768197 1. 048684 -1. 215944 C -1. 619481 -0. 490521 -0. 274144 C -1. 760093 -0. 145229 1. 056747 C -2. 938641 0. 476524 1. 493347 C -3. 958353 0. 751631 0. 617605	<pre>1 (trans, level 3) N 0.371853 -0.478403 0.000132 N -0.373107 0.485199 0.000142 C -1.761991 0.187018 0.000130 C 1.762583 -0.180676 0.000128 C 2.606768 -1.273378 0.000048 C 3.990571 -1.098099 -0.000106 C 4.524703 0.186549 -0.000180 C 3.668292 1.295293 -0.000076 C 2.290411 1.119555 0.000082 H 2.172128 -2.263167 0.000075 H 4.642624 -1.960991 -0.000189 H 5.597049 0.329889 -0.000322 H 4.080540 2.295575 -0.000140 H 1.621185 1.965074 0.000129 C -2.606266 1.270353 0.000060</pre>	 (CI-CCW, level 3) -0. 490146 -1. 093351 -0. 788895 0. 577745 -1. 478168 -0. 203559 C 1. 668053 -0. 577316 -0. 143596 C 2. 789411 -1. 032662 0. 508713 C 3. 912901 -0. 202839 0. 646650 C 3. 901034 1. 063592 0. 119063 C 2. 759851 1. 531147 -0. 561820 C 1. 648916 0. 723711 -0. 696006 H 4. 767162 1. 704121 0. 218579 H 2. 755494 2. 526994 -0. 983871 H 0. 775391 1. 071587 -1. 226086 C -1. 619842 -0. 485053 -0. 283346 C -1. 755190 -0. 164681 1. 052806 C -2. 935358 0. 450322 1. 503621 C -3. 956644 0. 742151 0. 637485
 (CI-CCW, level 2) -0.485924 -1.108218 -0.760617 0.581186 -1.488350 -0.173042 1.670755 -0.580770 -0.131621 2.800229 -1.025320 0.515871 3.919725 -0.191134 0.636279 3.897234 1.071683 0.097657 2.749449 1.528593 -0.576730 1.641397 0.713542 -0.694764 4.753736 1.712051 0.183534 2.737864 2.512908 -1.003045 0.768197 1.048684 -1.215944 -1.619481 -0.490521 -0.274144 -1.760093 -0.145229 1.056747 C.2.938641 0.476524 1.493347 C.3.958353 0.751631 0.617605 C.3.817950 0.390101 -0.738659 	<pre>1 (trans, level 3) N 0.371853 -0.478403 0.000132 N -0.373107 0.485199 0.000142 C -1.761991 0.187018 0.000130 C 1.762583 -0.180676 0.000128 C 2.606768 -1.273378 0.000048 C 3.990571 -1.098099 -0.000106 C 4.524703 0.186549 -0.000180 C 3.668292 1.295293 -0.000076 C 2.290411 1.119555 0.000082 H 2.172128 -2.263167 0.000075 H 4.642624 -1.960991 -0.000189 H 5.597049 0.329889 -0.000322 H 4.080540 2.295575 -0.000140 H 1.621185 1.965074 0.000129 C -2.606266 1.270353 0.000060</pre>	$ \begin{array}{llllllllllllllllllllllllllllllllllll$
 (CI-CCW, level 2) -0.485924 -1.108218 -0.760617 0.581186 -1.488350 -0.173042 1.670755 -0.580770 -0.131621 2.800229 -1.025320 0.515871 3.919725 -0.191134 0.636279 3.897234 1.071683 0.097657 2.749449 1.528593 -0.576730 1.641397 0.713542 -0.694764 4.753736 1.712051 0.183534 2.737864 2.512908 -1.003045 M 0.768197 1.048684 -1.215944 -1.619481 -0.490521 -0.274144 -1.619481 0.476524 1.493347 -2.938641 0.476524 1.493347 -3.958353 0.751631 0.617605 -3.817959 0.399191 -0.738659 -2.667913 -0.21606 -1.184230 	<pre>1 (trans, level 3) N 0.371853 -0.478403 0.000132 N -0.373107 0.485199 0.000142 C -1.761991 0.187018 0.000130 C 1.762583 -0.180676 0.000128 C 2.606768 -1.273378 0.000048 C 3.990571 -1.098099 -0.000106 C 4.524703 0.186549 -0.000180 C 3.668292 1.295293 -0.000076 C 2.290411 1.119555 0.000082 H 2.172128 -2.263167 0.000075 H 4.642624 -1.960991 -0.000189 H 5.597049 0.329889 -0.000322 H 4.080540 2.295575 -0.000140 H 1.621185 1.965074 0.000129 C -2.606266 1.270353 0.000060 C -3.998822 1.086423 -0.00091</pre>	 (CI-CCW, level 3) -0. 490146 -1. 093351 -0. 788895 0. 577745 -1. 478168 -0. 203559 C 1. 668053 -0. 577316 -0. 143596 C 2. 789411 -1. 032662 0. 508713 C 3. 912901 -0. 202839 0. 646650 C 3. 901034 1. 063592 0. 119063 C 2. 759851 1. 531147 -0. 561820 C 1. 648916 0. 723711 -0. 696006 H 4. 767162 1. 704121 0. 218579 H 2. 755494 2. 526994 -0. 983871 H 0. 775391 1. 071587 -1. 226086 C -1. 619842 -0. 485053 -0. 283346 C -2. 935358 0. 450322 1. 503621 C -3. 956644 0. 742151 0. 637485 C -3. 818709 0. 413841 -0. 727222 C -2. 671286 -0. 103774 -1 19754
1 (CI-CCW, level 2) N -0. 485924 -1. 108218 -0. 760617 N 0. 581186 -1. 488350 -0. 173042 C 1. 670755 -0. 580770 -0. 131621 C 2. 800229 -1. 025320 0. 515871 C 3. 919725 -0. 191134 0. 636279 C 3. 897234 1. 071683 0. 097657 C 2. 749449 1. 528593 -0. 576730 C 1. 641397 0. 713542 -0. 694764 H 4. 753736 1. 712051 0. 183534 H 2. 737864 2. 512908 -1. 003045 H 0. 768197 1. 048684 -1. 215944 C -1. 619481 -0. 490521 -0. 274144 C -1. 760093 -0. 145229 1. 056747 C -2. 938641 0. 476524 1. 493347 C -3. 958353 0. 751631 0. 617605 C -3. 817959 0. 399191 -0. 738659 C -2. 667913 -0. 216096 -1. 184830 H -4 856913 1. 227678 0. 058242	1 (trans, level 3) N 0.371853 -0.478403 0.000132 N -0.373107 0.485199 0.000142 C -1.761991 0.187018 0.000130 C 1.762583 -0.180676 0.000128 C 2.606768 -1.273378 0.000048 C 3.990571 -1.098099 -0.000106 C 4.524703 0.186549 -0.000180 C 3.668292 1.295293 -0.000076 C 2.290411 1.119555 0.000082 H 2.172128 -2.263167 0.000075 H 4.642624 -1.960991 -0.000189 H 5.597049 0.329889 -0.000322 H 4.080540 2.295575 -0.000140 H 1.621185 1.965074 0.000129 C -2.606266 1.270353 0.000060 C -3.998822 1.086423 -0.000091 C -4.521489 -0.181682 -0.000163 C -3.660816 -1.26640 -0.000778	$ \begin{array}{llllllllllllllllllllllllllllllllllll$
1 (CI-CCW, level 2) N -0. 485924 -1. 108218 -0. 760617 N 0. 581186 -1. 488350 -0. 173042 C 1. 670755 -0. 580770 -0. 131621 C 2. 800229 -1. 025320 0. 515871 C 3. 919725 -0. 191134 0. 636279 C 3. 897234 1. 071683 0. 097657 C 2. 749449 1. 528593 -0. 576730 C 1. 641397 0. 713542 -0. 694764 H 4. 753736 1. 712051 0. 183534 H 2. 737864 2. 512908 -1. 003045 H 0. 768197 1. 048684 -1. 215944 C -1. 619481 -0. 490521 -0. 274144 C -1. 760093 -0. 145229 1. 056747 C -2. 938641 0. 476524 1. 493347 C -3. 958353 0. 751631 0. 617605 G -3. 817959 0. 399191 -0. 738659 C -2. 667913 -0. 216096 -1. 184830 H -4. 856913 1. 227678 0. 958242 H -4. 612052 0. 606772 -1. 420810	1 (trans, level 3) N 0.371853 -0.478403 0.000132 N -0.373107 0.485199 0.000142 C -1.761991 0.187018 0.000130 C 1.762583 -0.180676 0.000128 C 2.606768 -1.273378 0.000048 C 3.990571 -1.098099 -0.000106 C 4.524703 0.186549 -0.000180 C 3.668292 1.295293 -0.000076 C 2.290411 1.119555 0.000082 H 2.172128 -2.263167 0.000075 H 4.642624 -1.960991 -0.000189 H 5.597049 0.329889 -0.000322 H 4.080540 2.295575 -0.000140 H 1.621185 1.965074 0.000129 C -2.606266 1.270353 0.000060 C -3.998822 1.086423 -0.000911 C -4.521489 -0.181682 -0.000163 C -3.60816 -1.296440 -0.000078 C -2.201325 -1.100807 0.000068	$ \begin{array}{llllllllllllllllllllllllllllllllllll$
1 (CI-CCW, level 2) N -0. 485924 -1. 108218 -0. 760617 N 0. 581186 -1. 488350 -0. 173042 C 1. 670755 -0. 580770 -0. 131621 C 2. 800229 -1. 025320 0. 515871 C 3. 919725 -0. 191134 0. 636279 C 3. 897234 1. 071683 0. 097657 C 2. 749449 1. 528593 -0. 576730 C 1. 641397 0. 713542 -0. 694764 H 4. 753736 1. 712051 0. 183534 H 2. 737864 2. 512908 -1. 003045 H 0. 768197 1. 048684 -1. 215944 C -1. 619481 -0. 490521 -0. 274144 C -1. 619481 0. 476524 1. 493347 C -2. 938641 0. 476524 1. 493347 C -3. 958353 0. 751631 0. 617605 C -3. 817959 0. 399191 -0. 738659 C -2. 667913 -0. 216096 -1. 184830 H -4. 856913 1. 227678 0. 958242 H -4. 612052 0. 606772 -1. 429810 H -2. 549918 -0. 407761 -2. 912316	1 (trans, level 3) N 0.371853 -0.478403 0.000132 N -0.373107 0.485199 0.000142 C -1.761991 0.187018 0.000130 C 1.762583 -0.180676 0.000128 C 2.606768 -1.273378 0.000048 C 3.990571 -1.098099 -0.000106 C 4.524703 0.186549 -0.000180 C 3.668292 1.295293 -0.000076 C 2.290411 1.119555 0.000082 H 2.172128 -2.263167 0.000075 H 4.642624 -1.960991 -0.000189 H 5.597049 0.329889 -0.000322 H 4.080540 2.295575 -0.000140 H 1.621185 1.965074 0.000129 C -2.606266 1.270353 0.000060 C -3.998822 1.086423 -0.000163 C -3.660816 -1.296440 -0.00078 C -2.291325 -1.120897 0.000068 H -2.178890 2.285214 0.000068	 (CI-CCW, level 3) N -0. 490146 -1.093351 -0.788895 N 0.577745 -1.478168 -0.203559 C 1.668053 -0.577316 -0.143596 C 2.789411 -1.032662 0.508713 C 3.912901 -0.202839 0.646650 C 3.901034 1.063592 0.119063 C 2.759851 1.531147 -0.561820 C 1.648916 0.723711 -0.696006 H 4.767162 1.704121 0.218579 H 2.755494 2.526994 -0.983871 H 0.775391 1.071587 -1.226086 C -1.619842 -0.485053 -0.283346 C -2.935358 0.450322 1.503621 C -3.956644 0.742151 0.637485 C -3.818709 0.413841 -0.727222 C -2.671286 -0.193774 -1.187543 H -4.861307 1.215992 0.992817 H -4.620245 0.635912 -1.419175
1 (CI-CCW, level 2) N -0.485924 -1.108218 -0.760617 N 0.581186 -1.488350 -0.173042 C 1.670755 -0.580770 -0.131621 C 2.800229 -1.025320 0.515871 C 3.919725 -0.191134 0.636279 C 3.897234 1.071683 0.097657 C 2.749449 1.528593 -0.576730 C 1.641397 0.713542 -0.694764 H 4.753736 1.712051 0.183534 H 2.737864 2.512908 -1.003045 H 0.768197 1.048684 -1.215944 C -1.619481 -0.490521 -0.274144 C -1.760093 -0.145229 1.056747 C -2.938641 0.476524 1.493347 C -3.958353 0.751631 0.617605 C -3.817959 0.399191 -0.738659 G -2.667913 -0.216096 -1.184830 H -4.612052 0.606772 -1.429810	1 (trans, level 3) N 0.371853 -0.478403 0.000132 N -0.373107 0.485199 0.000142 C -1.761991 0.187018 0.000130 C 1.762583 -0.180676 0.000128 C 2.606768 -1.273378 0.000048 C 3.990571 -1.098099 -0.000106 C 4.524703 0.186549 -0.000180 C 3.668292 1.295293 -0.000076 C 2.290411 1.119555 0.000082 H 2.172128 -2.263167 0.000075 H 4.642624 -1.960991 -0.000189 H 5.597049 0.329889 -0.000322 H 4.080540 2.295575 -0.000140 H 1.621185 1.965074 0.000129 C -2.606266 1.270353 0.000060 C -3.998822 1.086423 -0.000163 C -3.660816 -1.296440 -0.000078 C -2.291325 -1.120897 0.000068 H -2.178890 2.263214 0.000088	 (CI-CCW, level 3) -0. 490146 -1. 093351 -0. 788895 0. 577745 -1. 478168 -0. 203559 C 1. 668053 -0. 577316 -0. 143596 C 2. 789411 -1. 032662 0. 508713 C 3. 912901 -0. 202839 0. 646650 C 3. 901034 1. 063592 0. 119063 C 2. 759851 1. 531147 -0. 561820 C 1. 648916 0. 723711 -0. 696006 H 4. 767162 1. 704121 0. 218579 H 2. 755494 2. 526994 -0. 983871 H 0. 775391 1. 071587 -1. 226086 C -1. 619842 -0. 485053 -0. 283346 C -2. 935358 0. 450322 1. 503621 C -3. 956644 0. 742151 0. 637485 C -3. 818709 0. 413841 -0. 727222 C -2. 671286 -0. 193774 -1. 187543 H -4. 861307 1. 215992 0. 992817 H -4. 620245 0. 635912 -1. 419175 H -2. 552806 -0. 458737 -2. 228411
 (CI-CCW, level 2) -0.485924 -1.108218 -0.760617 0.581186 -1.488350 -0.173042 1.670755 -0.580770 -0.131621 2.800229 -1.025320 0.515871 3.919725 -0.191134 0.636279 3.897234 1.071683 0.097657 2.749449 1.528593 -0.576730 1.641397 0.713542 -0.694764 4.753736 1.712051 0.183534 4.753736 1.712051 0.183534 4.753736 1.712051 0.183534 6.76197 1.048684 -1.215944 7.16093 -0.145229 1.056747 7.938641 0.476524 1.493347 7.3958353 0.751631 0.617605 7.3817959 0.399191 -0.738659 7.2.667913 -0.216096 -1.184830 4.4.856913 1.227678 0.958242 4.612052 0.606772 -1.429810 4.612052 0.606772 -1.429810 4.033183 0.735765 2.530470 4.0073157 -0.388592 1.751922 	1 (trans, level 3) N 0.371853 -0.478403 0.000132 N -0.373107 0.485199 0.000142 C -1.761991 0.187018 0.000130 C 1.762583 -0.180676 0.000128 C 2.606768 -1.273378 0.000048 C 3.990571 -1.098099 -0.000106 C 4.524703 0.186549 -0.000180 C 3.668292 1.295293 -0.000076 C 2.290411 1.119555 0.000082 H 2.172128 -2.263167 0.000075 H 4.642624 -1.960991 -0.000189 H 5.597049 0.329889 -0.000322 H 4.080540 2.295575 -0.000140 H 1.621185 1.965074 0.000129 C -2.606266 1.270353 0.000060 C -3.998822 1.086423 -0.0000163 C -3.660816 -1.296440 -0.000078 K -2.291325 -1.120897 0.000068 H -2.178890 2.263214 0.000088 H -4.652015 1.948595 -0.000165 H -5 59366 -0.320760 -0.000234	$ \begin{array}{llllllllllllllllllllllllllllllllllll$
 (CI-CCW, level 2) -0.485924 -1.108218 -0.760617 0.581186 -1.488350 -0.173042 1.670755 -0.580770 -0.131621 2.800229 -1.025320 0.515871 3.919725 -0.191134 0.636279 3.897234 1.071683 0.097657 2.749449 1.528593 -0.576730 1.641397 0.713542 -0.694764 4.753736 1.712051 0.183534 2.737864 2.512908 -1.003045 0.768197 1.048684 -1.215944 -1.619481 -0.490521 -0.274144 -1.760093 -0.145229 1.056747 -2.938641 0.476524 1.493347 -3.958353 0.751631 0.617605 -3.817959 0.399191 -0.738659 -2.667913 -0.216096 -1.184830 -4.856913 1.227678 0.958242 -4.612052 0.606772 -1.429810 -2.548918 -0.497761 -2.212216 -3.033183 0.735765 2.530470 -0.973157 -0.358583 1.751862 	1 (trans, level 3) N 0.371853 -0.478403 0.000132 N -0.373107 0.485199 0.000142 C -1.761991 0.187018 0.000130 C 1.762583 -0.180676 0.000128 C 2.606768 -1.273378 0.000048 C 3.990571 -1.098099 -0.000106 C 4.524703 0.186549 -0.000180 C 3.668292 1.295293 -0.000076 C 2.290411 1.119555 0.000082 H 2.172128 -2.263167 0.000075 H 4.642624 -1.960991 -0.000189 H 5.597049 0.329889 -0.000322 H 4.080540 2.295575 -0.000140 H 1.621185 1.965074 0.000129 C -2.606266 1.270353 0.000060 C -3.998822 1.086423 -0.0000163 C -3.660816 -1.296440 -0.000078 C -2.291325 -1.120897 0.000068 H -2.178890 2.263214 0.000088 H -4.652015 1.948595 -0.000165 H -5.593366 -0.329769 -0.000294	1 (CI-CCW, level 3) N -0.490146 -1.093351 -0.788895 N 0.577745 -1.478168 -0.203559 C 1.668053 -0.577316 -0.143596 C 2.789411 -1.032662 0.508713 C 3.912901 -0.202839 0.646650 C 3.901034 1.063592 0.119063 C 2.759851 1.531147 -0.561820 C 1.648916 0.723711 -0.696006 H 4.767162 1.704121 0.218579 H 2.755494 2.526994 -0.983871 H 0.775391 1.071587 -1.226086 C -1.619842 -0.485053 -0.283346 C -1.755190 -0.164681 1.052806 C -2.935358 0.450322 1.503621
1 (CI-CCW, level 2) N -0.485924 -1.108218 -0.760617 N 0.581186 -1.488350 -0.173042 C 1.670755 -0.580770 -0.131621 C 2.800229 -1.025320 0.515871 C 3.919725 -0.191134 0.636279 C 3.897234 1.071683 0.097657 C 2.749449 1.528593 -0.576730 C 1.641397 0.713542 -0.694764 H 4.753736 1.712051 0.183534 H 2.737864 2.512908 -1.003045 H 0.768197 1.048684 -1.215944 C -1.619481 -0.490521 -0.274144 C -1.760093 -0.145229 1.056747 C -2.938641 0.476524 1.493347 C -3.958353 0.751631 0.617605 C -3.958353 0.751631 0.617605 C -2.667913 -0.216096 -1.184830 H -4.612052 0.606772 -1.429810 <	1 (trans, level 3) N 0.371853 -0.478403 0.000132 N -0.373107 0.485199 0.000142 C -1.761991 0.187018 0.000130 C 1.762583 -0.180676 0.000128 C 2.606768 -1.273378 0.000048 C 3.990571 -1.098099 -0.000106 C 4.524703 0.186549 -0.000180 C 3.668292 1.295293 -0.000076 C 2.290411 1.119555 0.000082 H 2.172128 -2.263167 0.000075 H 4.642624 -1.960991 -0.000189 H 5.597049 0.329889 -0.000322 H 4.080540 2.295575 -0.000140 H 1.621185 1.965074 0.000129 C -2.606266 1.270353 0.000060 C -3.998822 1.086423 -0.000163 C -3.660816 -1.296440 -0.000078 C -2.291325 -1.120897 0.000068 H -2.178890 2.263214 0.000088 H -4.652015 1.948595 -0.000165 H -4.076093 -2.295335 -0.000144	1 (CI-CCW, level 3) N -0.490146 -1.093351 -0.788895 N 0.577745 -1.478168 -0.203559 C 1.668053 -0.577316 -0.143596 C 2.789411 -1.032662 0.508713 C 3.912901 -0.202839 0.646650 C 3.912901 -0.202839 0.646650 C 3.901034 1.063592 0.119063 C 2.759851 1.531147 -0.561820 C 1.648916 0.723711 -0.696006 H 4.767162 1.704121 0.218579 H 2.755494 2.526994 -0.983871 H 0.775391 1.071587 -1.226086 C -1.619842 -0.485053 -0.283346 C -1.755190 -0.164681 1.052806 C -3.956644 0.742151 0.637485 C -3.818709 0.413841 -0.727222 C -2.671286 -0.193774 -1.187543 H -4.620245 0.635912 -1.419175

I (IS, level I)
N 0.443739 -0.977652 0.009657
N -0.697976 -1.457738 0.012702
C 1.693489 -0.452109 0.004362
C -1.818193 -0.532265 0.005311
C -3. 067467 -1. 115850 0. 005052
C -4. 214296 -0. 302784 -0. 002518
C -4.082313 1.062476 -0.009348
C -2.803808 1.650905 -0.008763
C -1. 680026 0. 867724 -0. 001587
H -3. 142360 -2. 185216 0. 010492
H -5. 186620 -0. 755338 -0. 002910
H -4. 952876 1. 689518 -0. 015152
H -2. 712705 2. 719850 -0. 014026
H -0. 703175 1. 308895 -0. 001177
C 2. 342432 -0. 193979 -1. 210124
C 3.618267 0.341034 -1.198576
C 4. 270067 0. 628066 -0. 006959
C 3.618172 0.366285 1.190388
C 2 342206 -0 168140 1 213164
H 1 $848152 - 0$ $418174 - 2$ 134032
H 4 105860 0 532778 -2 135397
H 5 258829 1 041616 -0.011298
H $4 \ 105661 \ 0 \ 577911 \ 2 \ 122972$
H 1 $847720 - 0.372299 - 2.141601$
11 1.047720 0.072200 2.141001
\mathbf{A} (cis level 1)
4 (<i>cis</i> , level 1) N -0 627160 -2 067322 1 048845
4 (<i>cis</i> , level 1) N -0.627160 -2.067322 1.048845 N 0.595856 -2 175946 0.993466
4 (<i>cis</i> , level 1) N -0. 627160 -2. 067322 1. 048845 N 0. 595856 -2. 175946 0. 993466 C 1. 525810 -1. 405983 0. 236125
4 (<i>cis</i> , level 1) N -0. 627160 -2. 067322 1. 048845 N 0. 595856 -2. 175946 0. 993466 C 1. 525810 -1. 405983 0. 236125 C 1. 647126 -0. 047272 0. 316533
4 (<i>cis</i> , level 1) N -0. 627160 -2. 067322 1. 048845 N 0. 595856 -2. 175946 0. 993466 C 1. 525810 -1. 405983 0. 236125 C 1. 647126 -0. 047272 0. 316533 C 0. 718371 0. 959547 0. 960476
4 (<i>cis</i> , level 1) N -0. 627160 -2. 067322 1. 048845 N 0. 595856 -2. 175946 0. 993466 C 1. 525810 -1. 405983 0. 236125 C 1. 647126 -0. 047272 0. 316533 C 0. 718371 0. 959547 0. 960476 C -0. 458368 1. 182992 -0. 005921
4 (<i>cis</i> , level 1) N -0. 627160 -2. 067322 1. 048845 N 0. 595856 -2. 175946 0. 993466 C 1. 525810 -1. 405983 0. 236125 C 1. 647126 -0. 047272 0. 316533 C 0. 718371 0. 959547 0. 960476 C -0. 458368 1. 182992 -0. 005921 C -1 532688 0. 099389 -0. 032076
4 (<i>cis</i> , level 1) N -0. 627160 -2. 067322 1. 048845 N 0. 595856 -2. 175946 0. 993466 C 1. 525810 -1. 405983 0. 236125 C 1. 647126 -0. 047272 0. 316533 C 0. 718371 0. 959547 0. 960476 C -0. 458368 1. 182992 -0. 005921 C -1. 532688 0. 099389 -0. 032076 C -1. 560881 -1. 229284 0. 332307
4 (<i>cis</i> , level 1) N -0. 627160 -2. 067322 1. 048845 N 0. 595856 -2. 175946 0. 993466 C 1. 525810 -1. 405983 0. 236125 C 1. 647126 -0. 047272 0. 316533 C 0. 718371 0. 959547 0. 960476 C -0. 458368 1. 182992 -0. 005921 C -1. 532688 0. 099389 -0. 032076 C -1. 560881 -1. 229284 0. 332307 C 2 501016 -2 150593 -0. 459215
4 (<i>cis</i> , level 1) N -0. 627160 -2. 067322 1. 048845 N 0. 595856 -2. 175946 0. 993466 C 1. 525810 -1. 405983 0. 236125 C 1. 647126 -0. 047272 0. 316533 C 0. 718371 0. 959547 0. 960476 C -0. 458368 1. 182992 -0. 005921 C -1. 532688 0. 099389 -0. 032076 C -1. 560881 -1. 229284 0. 332307 C 2. 501016 -2. 150593 -0. 459215 C 3. 534836 -1. 517764 -1. 004762
4 (<i>cis</i> , level 1) N -0. 627160 -2. 067322 1. 048845 N 0. 595856 -2. 175946 0. 993466 C 1. 525810 -1. 405983 0. 236125 C 1. 647126 -0. 047272 0. 316533 C 0. 718371 0. 959547 0. 960476 C -0. 458368 1. 182992 -0. 005921 C -1. 532688 0. 099389 -0. 032076 C -1. 560881 -1. 229284 0. 332307 C 2. 501016 -2. 150593 -0. 459215 C 3. 534836 -1. 517764 -1. 094762 C -2. 669374 -0. 115986 -1. 017601
 4 (<i>cis</i>, level 1) N -0. 627160 -2. 067322 1. 048845 N 0. 595856 -2. 175946 0. 993466 C 1. 525810 -1. 405983 0. 236125 C 1. 647126 -0. 047272 0. 316533 C 0. 718371 0. 959547 0. 960476 C -0. 458368 1. 182992 -0. 005921 C -1. 532688 0. 099389 -0. 032076 C -1. 560881 -1. 229284 0. 332307 C 2. 501016 -2. 150593 -0. 459215 C 3. 534836 -1. 517764 -1. 094762 C 3. 668784 -0. 115866 -1. 017691 C -2. 724552 0. 602005 0. 202570
 4 (<i>cis</i>, level 1) N -0. 627160 -2. 067322 1. 048845 N 0. 595856 -2. 175946 0. 993466 C 1. 525810 -1. 405983 0. 236125 C 1. 647126 -0. 047272 0. 316533 C 0. 718371 0. 959547 0. 960476 C -0. 458368 1. 182992 -0. 005921 C -1. 532688 0. 099389 -0. 032076 C -1. 560881 -1. 229284 0. 332307 C 2. 501016 -2. 150593 -0. 459215 C 3. 534836 -1. 517764 -1. 094762 C 3. 668784 -0. 115866 -1. 017691 C 2. 734552 0. 602986 -0. 303578 C 2. 752600 1. 061375 0. 140490
 4 (<i>cis</i>, level 1) N -0. 627160 -2. 067322 1. 048845 N 0. 595856 -2. 175946 0. 993466 C 1. 525810 -1. 405983 0. 236125 C 1. 647126 -0. 047272 0. 316533 C 0. 718371 0. 959547 0. 960476 C -0. 458368 1. 182992 -0. 005921 C -1. 532688 0. 099389 -0. 032076 C -1. 560881 -1. 229284 0. 332307 C 2. 501016 -2. 150593 -0. 459215 C 3. 668784 -0. 115866 -1. 017691 C 2. 734552 0. 602986 -0. 303578 C -2. 763699 -1. 961705 0. 149489
4 (<i>cis</i> , level 1) N $-0.627160 -2.067322$ 1.048845 N $0.595856 -2.175946$ 0.993466 C $1.525810 -1.405983$ 0.236125 C $1.647126 -0.047272$ 0.316533 C 0.718371 0.959547 0.960476 C -0.458368 1.182992 -0.005921 C -1.532688 0.099389 -0.032076 C $-1.560881 -1.229284$ 0.332307 C $2.501016 -2.150593 -0.459215$ C $3.534836 -1.517764 -1.094762$ C $3.668784 -0.115866 -1.017691$ C 2.734552 0.602986 -0.303578 C $-2.763699 -1.961705$ 0.149489 C $-3.881339 -1.400587 -0.390676$
4 (<i>cis</i> , level 1) N -0. 627160 -2. 067322 1. 048845 N 0. 595856 -2. 175946 0. 993466 C 1. 525810 -1. 405983 0. 236125 C 1. 647126 -0. 047272 0. 316533 C 0. 718371 0. 959547 0. 960476 C -0. 458368 1. 182992 -0. 005921 C -1. 532688 0. 099389 -0. 032076 C -1. 560881 -1. 229284 0. 332307 C 2. 501016 -2. 150593 -0. 459215 C 3. 534836 -1. 517764 -1. 094762 C 3. 668784 -0. 115866 -1. 017691 C 2. 734552 0. 602986 -0. 303578 C -2. 763699 -1. 961705 0. 149489 C -3. 881339 -1. 400587 -0. 390676 C -3. 880415 -0. 028200 -0. 715721 O 2. 732466 0. 607677 0. 510210
4 (<i>cis</i> , level 1) N -0. $627160 -2. 067322 1. 048845$ N 0. $595856 -2. 175946 0. 993466$ C 1. $525810 -1. 405983 0. 236125$ C 1. $647126 -0. 047272 0. 316533$ C 0. $718371 0. 959547 0. 960476$ C -0. $458368 1. 182992 -0. 005921$ C -1. $532688 0. 099389 -0. 032076$ C -1. $532688 0. 099389 -0. 032076$ C -1. $560881 -1. 229284 0. 332307$ C 2. $501016 -2. 150593 -0. 459215$ C 3. $534836 -1. 517764 -1. 094762$ C 3. $668784 -0. 115866 -1. 017691$ C 2. $734552 0. 602986 -0. 303578$ C -2. $763699 -1. 961705 0. 149489$ C -3. $881339 -1. 400587 -0. 390676$ C -3. $880415 -0. 028200 -0. 715721$ C -2. $733426 0. 697657 -0. 512818$
<pre>4 (cis, level 1) N -0. 627160 -2. 067322 1. 048845 N 0. 595856 -2. 175946 0. 993466 C 1. 525810 -1. 405983 0. 236125 C 1. 647126 -0. 047272 0. 316533 C 0. 718371 0. 959547 0. 960476 C -0. 458368 1. 182992 -0. 005921 C -1. 532688 0. 099389 -0. 032076 C -1. 560881 -1. 229284 0. 332307 C 2. 501016 -2. 150593 -0. 459215 C 3. 534836 -1. 517764 -1. 094762 C 3. 668784 -0. 115866 -1. 017691 C 2. 734552 0. 602986 -0. 303578 C -2. 763699 -1. 961705 0. 149489 C -3. 881339 -1. 400587 -0. 390676 C -3. 880415 -0. 028200 -0. 715721 C -2. 733426 0. 697657 -0. 512818 C 1. 648073 2. 192860 1. 114987</pre>
<pre>4 (cis, level 1) N -0. 627160 -2. 067322 1. 048845 N 0. 595856 -2. 175946 0. 993466 C 1. 525810 -1. 405983 0. 236125 C 1. 647126 -0. 047272 0. 316533 C 0. 718371 0. 959547 0. 960476 C -0. 458368 1. 182992 -0. 005921 C -1. 532688 0. 099389 -0. 032076 C -1. 560881 -1. 229284 0. 332307 C 2. 501016 -2. 150593 -0. 459215 C 3. 534836 -1. 517764 -1. 094762 C 3. 668784 -0. 115866 -1. 017691 C 2. 734552 0. 602986 -0. 303578 C -2. 763699 -1. 961705 0. 149489 C -3. 881339 -1. 400587 -0. 390676 C -2. 733426 0. 697657 -0. 512818 C 1. 648073 2. 192860 1. 114987 H -0. 039173 1. 220819 -1. 011409</pre>
<pre>4 (cis, level 1) N -0. 627160 -2. 067322 1. 048845 N 0. 595856 -2. 175946 0. 993466 C 1. 525810 -1. 405983 0. 236125 C 1. 647126 -0. 047272 0. 316533 C 0. 718371 0. 959547 0. 960476 C -0. 458368 1. 182992 -0. 005921 C -1. 532688 0. 099389 -0. 032076 C -1. 560881 -1. 229284 0. 332307 C 2. 501016 -2. 150593 -0. 459215 C 3. 534836 -1. 517764 -1. 094762 C 3. 668784 -0. 115866 -1. 017691 C 2. 734552 0. 602986 -0. 303578 C -2. 763699 -1. 961705 0. 149489 C -3. 881339 -1. 400587 -0. 390676 C -2. 733426 0. 697657 -0. 512818 C 1. 648073 2. 192860 1. 114987 H -0. 039173 1. 220819 -1. 011409 H 2. 417563 -3. 219270 -0. 462579</pre>
 4 (<i>cis</i>, level 1) N -0. 627160 -2. 067322 1. 048845 N 0. 595856 -2. 175946 0. 993466 C 1. 525810 -1. 405983 0. 236125 C 1. 647126 -0. 047272 0. 316533 C 0. 718371 0. 959547 0. 960476 C -0. 458368 1. 182992 -0. 005921 C -1. 532688 0. 099389 -0. 032076 C -1. 532688 0. 099389 -0. 032076 C -1. 560881 -1. 229284 0. 332307 C 2. 501016 -2. 150593 -0. 459215 C 3. 534836 -1. 517764 -1. 094762 C 3. 668784 -0. 115866 -1. 017691 C 2. 734552 0. 602986 -0. 303578 C -2. 763699 -1. 961705 0. 149489 C -3. 880415 -0. 028200 -0. 715721 C -2. 733426 0. 697657 -0. 512818 C 1. 648073 2. 192860 1. 114987 H -0. 039173 1. 220819 -1. 011409 H 2. 417563 -3. 219270 -0. 462579 H 4. 264360 -2. 092984 -1. 631243
 4 (<i>cis</i>, level 1) N -0. 627160 -2. 067322 1. 048845 N 0. 595856 -2. 175946 0. 993466 C 1. 525810 -1. 405983 0. 236125 C 1. 647126 -0. 047272 0. 316533 C 0. 718371 0. 959547 0. 960476 C -0. 458368 1. 182992 -0. 005921 C -1. 532688 0. 099389 -0. 032076 C -1. 532688 0. 099389 -0. 032076 C -1. 560881 -1. 229284 0. 332307 C 2. 501016 -2. 150593 -0. 459215 C 3. 534836 -1. 517764 -1. 094762 C 3. 668784 -0. 115866 -1. 017691 C 2. 734552 0. 602986 -0. 303578 C -2. 763699 -1. 961705 0. 149489 C -3. 881339 -1. 400587 -0. 390676 C -3. 880415 -0. 028200 -0. 715721 C -2. 733426 0. 697657 -0. 512818 C 1. 648073 2. 192860 1. 114987 H -0. 039173 1. 220819 -1. 011409 H 2. 417563 -3. 219270 -0. 462579 H 4. 264360 -2. 092984 -1. 631243 H 4. 498930 0. 372248 -1. 492372
4 (<i>cis</i> , level 1) N -0. 627160 -2. 067322 1. 048845 N 0. 595856 -2. 175946 0. 993466 C 1. 525810 -1. 405983 0. 236125 C 1. 647126 -0. 047272 0. 316533 C 0. 718371 0. 959547 0. 960476 C -0. 458368 1. 182992 -0. 005921 C -1. 532688 0. 099389 -0. 032076 C -1. 560881 -1. 229284 0. 332307 C 2. 501016 -2. 150593 -0. 459215 C 3. 534836 -1. 517764 -1. 094762 C 3. 668784 -0. 115866 -1. 017691 C 2. 734552 0. 602986 -0. 303578 C -2. 763699 -1. 961705 0. 149489 C -3. 881339 -1. 400587 -0. 390676 C -2. 733426 0. 697657 -0. 512818 C 1. 648073 2. 192860 1. 114987 H -0. 039173 1. 220819 -1. 011409 H 2. 417563 -3. 219270 -0. 462579 H 4. 264360 -2. 092984 -1. 631243 H 4. 498930 0. 372248 -1. 492372 C 2. 663844 2. 092787 -0. 045817
<pre>4 (cis, level 1) N -0. 627160 -2. 067322 1. 048845 N 0. 595856 -2. 175946 0. 993466 C 1. 525810 -1. 405983 0. 236125 C 1. 647126 -0. 047272 0. 316533 C 0. 718371 0. 959547 0. 960476 C -0. 458368 1. 182992 -0. 005921 C -1. 532688 0. 099389 -0. 032076 C -1. 500881 -1. 229284 0. 332307 C 2. 501016 -2. 150593 -0. 459215 C 3. 534836 -1. 517764 -1. 094762 C 3. 668784 -0. 115866 -1. 017691 C -2. 734552 0. 602986 -0. 303578 C -2. 763699 -1. 961705 0. 149489 C -3. 881339 -1. 400587 -0. 390676 C -3. 880415 -0. 028200 -0. 715721 C -2. 733426 0. 697657 -0. 512818 C 1. 648073 2. 192860 1. 114987 H -0. 039173 1. 220819 -1. 011409 H 2. 417563 -3. 219270 -0. 462579 H 4. 264360 -2. 092984 -1. 631243 H 4. 498930 0. 372248 -1. 492372 C 2. 663844 2. 092787 -0. 045817 H -2. 760958 -2. 980708 0. 479067</pre>
 4 (<i>cis</i>, level 1) N -0. 627160 -2. 067322 1. 048845 N 0. 595856 -2. 175946 0. 993466 C 1. 525810 -1. 405983 0. 236125 C 1. 647126 -0. 047272 0. 316533 C 0. 718371 0. 959547 0. 960476 C -0. 458368 1. 182992 -0. 005921 C -1. 532688 0. 099389 -0. 032076 C -1. 560881 -1. 229284 0. 332307 C 2. 501016 -2. 150593 -0. 459215 C 3. 534836 -1. 517764 -1. 094762 C 3. 668784 -0. 115866 -1. 017691 C 2. 734552 0. 602986 -0. 303578 C -2. 763699 -1. 961705 0. 149489 C -3. 881339 -1. 400587 -0. 390676 C -3. 880415 -0. 028200 -0. 715721 C -2. 733426 0. 697657 -0. 512818 C 1. 648073 2. 192860 1. 114987 H -0. 039173 1. 220819 -1. 011409 H 2. 417563 -3. 219270 -0. 462579 H 4. 264360 -2. 092984 -1. 631243 H 4. 498930 0. 372248 -1. 492372 C 2. 663844 2. 092787 -0. 045817 H -2. 760958 -2. 980708 0. 479067 H -4. 770079 -1. 986051 -0. 523195

C -2. 548310 2. 189204 -0. 684580
C -1. 295042 2. 469457 0. 164251
H -3. 413875 2. 753993 -0. 361663
H -2.363861 2.442817 -1.725871
H -1.569056 2.602437 1.206886
H -0. 764827 3. 354092 -0. 161486
H 2. 175619 2. 107303 2. 058766
Н 1.113170 3.131386 1.128320
H 2.308953 2.621623 -0.926611
H 3. 625595 2. 517891 0. 214408
H 0.340777 0.635031 1.923899
4 (<i>trans</i> -CW. level 1)
N 0 347333 -1 736401 -0 509705
N = 0.348108 = 1.736885 = 0.508897
C = 1.694205 = 1.331532 = 0.276648
C = 1,777620 = 0,007703 = 0,126130
C = 0.648359 = 0.995225 = 0.440004
C = 0.048339 = 0.993223 = 0.440004
0.040393 0.993734 0.439069
C -4. 0/2908 -1. 4/2238 0. 428549
C -4. 180977 -0. 140029 -0. 003645
C -3. 041/53 0. 581/58 -0. 266042
C 2.842591 -2.065367 -0.590203
C 4.071856 -1.473762 -0.428313
C 4. 180597 -0. 139725 0. 006354
C 3.044066 0.581396 0.268595
C -1.429930 2.339764 -0.330670
H 0.345566 0.855091 1.474237
H -2. 752324 -3. 074315 0. 939962
H -4. 963187 -2. 029417 0. 648127
H -5. 151184 0. 307969 -0. 108314
C -2.892669 2.018868 -0.703599
H 2. 752068 -3. 073506 -0. 943407
H 4.962525 -2.030248 -0.648169
H 5. 151436 0. 306920 0. 111282
C 2.892671 2.018346 0.705643
C 1. 431381 2. 339191 0. 326998
H 3.599419 2.684860 0.226300
H 3.041362 2.106585 1.779043
H 1.402435 2.681113 -0.702961
H 1.007066 3.117597 0.946226
H -1.006769 3.115619 -0.953889
H -1.397800 2.685333 0.697932
H -3. 597670 2. 684947 -0. 221063
H -3.046444 2.106811 -1.776254
H -0. 344965 0. 852203 -1. 474685
4 (<i>trans</i> -CCW, level 1)
N -0.357381 -1.734189 -0.510806

N 0.378713 -1.776559	0. 472565
C 1.714035 -1.361681	0. 196048
C 1.796701 0.024997	0. 108897
C 0.696159 1.081324	0.349011
C -0.708565 1.086589	-0. 364080
C -1.801370 0.027884	-0. 121788
C -1 702478 -1 360702	-0 214914
C 2 832648 -2 163545	0.111216
0 2.032040 2.103343	0. 111210
0 4.073398 -1.304372	-0. 060207
C 4. 187062 -0. 183584	-0. 146406
C 3.048496 0.604053	-0. 035232
C -2.816659 -2.180960	-0. 104639
C -4.063490 -1.586869	0. 107219
C -4. 183904 -0. 196367	0. 171429
C -3.060344 0.597888	0. 043001
C 1.451725 2.390577	-0. 055242
H -0. 514381 1. 101297	-1. 435035
H 2. 739598 -3. 228821	0. 187019
H 4. 949448 -2. 178496	-0. 164613
H 5.152196 0.271648	-0. 265645
C 2.963647 2.106965	0.042602
H -2.715701 -3.245887	-0. 176919
H -4.934834 -2.204430	0.208901
H -5 152032 0 249162	0 304489
C = 2,979195, 2,102411	-0.033115
C _1 466305 2 301130	0.053557
	0. 053557
H -3. 532595 2. 596806	0. /00800
H -3. 391536 2. 449237	-0. 976653
H -1. 209059 2. 624430	1.081446
H -1.18038/ 3.2393//	-0. 552/84
H 1.157172 3.234025	0. 553498
H 1.201390 2.628048	-1.083826
H 3.522429 2.603336	-0. 742487
H 3. 368887 2. 453380	0.989567
H 0. 499521 1. 088834	1. 420087
4 (CI-CW, level 1)	
N 0. 466914 -2. 217351	0. 190256
N -0.553380 -1.876659	1.001603
C 1.611080 -1.429626	-0. 029074
C 2.698276 -2.082385	-0. 609954
C 1.705720 -0.075089	0. 271273
C 3.863598 -1.392247	-0. 889021
C 2.877687 0.611676	-0. 032462
C 3.959452 -0.034450	-0. 604195
C -1.687637 -1.224425	0. 400464
C -2.895075 -1.914846	0. 451798
C -1.655421 0 069749	-0.093710
C -4. 058831 -1 327342	-0.012049
C -2 844697 0 660543	-0 508742
C = 4 040905 = 0 020901	-0 480538
C 0 620107 0 020/07	0. 403000
	0.022934

С	-0. 496902	1.055736	-0. 218568
H	-0.061014	0. 940119	-1. 209780
С	-1. 249372	2. 409863	-0. 202017
Н	2. 606608	-3. 127182	-0. 828253
Н	4. 693848	-1. 909079	-1. 329756
H	4. 860136	0. 504038	-0. 831198
Н	-2.905804	-2. 902470	0.868119
Н	-4. 981037	-1.874035	0. 024881
Н	-4. 949865	0. 449447	-0. 814079
C	1. 470423	2. 128999	1. 172313
Н	0. 195634	0.469606	1. 731624
С	2. 741936	2. 078752	0. 299452
H	0.917409	3. 047563	1.045930
Н	1. 754313	2. 068594	2. 216982
Н	3. 607915	2. 472777	0. 818416
Н	2. 623545	2. 662738	-0. 609807
C	-2. 594398	2. 109395	-0. 896158
Н	-1. 433060	2.716208	0. 823219
Н	-0. 693925	3. 197472	-0. 694280
Н	-3. 387526	2. 774278	-0. 576622
Н	-2. 500639	2. 210603	-1. 974877
4	(CI-CCW,	level 1)	
Ν	-0. 502685	-2. 203296	0. 196920
N	0. 577763	-2. 012732	0. 985247
С	1. 686410	-1. 366214	0. 341866
C	1. 728536	0. 008955	0. 291612
С	0. 684763	0. 990125	0. 789013
С	-0. 527619	1. 107456	-0. 172900
С	-1.643220	0. 045486	-0. 083949
С	-1.627597	-1.346309	0. 053193
С	2.744330	-2. 117617	-0. 151109
С	3. 835196	-1. 473641	-0. 715341
С	3. 888140	-0. 084070	-0. 771189
С	2.834352	0. 649566	-0. 256132
С	-2.828322	-2. 059537	0. 001966
С	-4. 040510	-1. 421965	-0. 164541
С	-4. 071815	-0. 042786	-0. 306961
С	-2. 885777	0. 664058	-0. 274382
С	1. 542480	2. 290573	0.892253
Η	-0. 144380	1. 089408	-1. 192510
Η			
Η	2. /09881	-3. 186929	-0. 084748
	2. 709881 4. 650641	-3. 186929 -2. 055307	-0. 084748 -1. 099734
Н	 2. 709881 4. 650641 4. 743835 	-3. 186929 -2. 055307 0. 406348	-0. 084748 -1. 099734 -1. 195397
H C	 2. 709881 4. 650641 4. 743835 2. 664616 	-3. 186929 -2. 055307 0. 406348 2. 147817	-0. 084748 -1. 099734 -1. 195397 -0. 160330
H C H	2. 709881 4. 650641 4. 743835 2. 664616 -2. 776157	-3. 186929 -2. 055307 0. 406348 2. 147817 -3. 124582	-0. 084748 -1. 099734 -1. 195397 -0. 160330 0. 100433
н С Н Н	2. 709881 4. 650641 4. 743835 2. 664616 -2. 776157 -4. 947452	-3. 186929 -2. 055307 0. 406348 2. 147817 -3. 124582 -1. 993852	-0.084748 -1.099734 -1.195397 -0.160330 0.100433 -0.188212
Н С Н Н	2. 709881 4. 650641 4. 743835 2. 664616 -2. 776157 -4. 947452 -5. 003950	-3. 186929 -2. 055307 0. 406348 2. 147817 -3. 124582 -1. 993852 0. 470755	-0. 084748 -1. 099734 -1. 195397 -0. 160330 0. 100433 -0. 188212 -0. 448678
н С Н Н С	2. 709881 4. 650641 4. 743835 2. 664616 -2. 776157 -4. 947452 -5. 003950 -2. 738807	-3. 186929 -2. 055307 0. 406348 2. 147817 -3. 124582 -1. 993852 0. 470755 2. 150451	-0. 084748 -1. 099734 -1. 195397 -0. 160330 0. 100433 -0. 188212 -0. 448678 -0. 473295
н С Н Н С С	2. 709881 4. 650641 4. 743835 2. 664616 -2. 776157 -4. 947452 -5. 003950 -2. 738807 -1. 319169	-3. 186929 -2. 055307 0. 406348 2. 147817 -3. 124582 -1. 993852 0. 470755 2. 150451 2. 426458	-0. 084748 -1. 099734 -1. 195397 -0. 160330 0. 100433 -0. 188212 -0. 448678 -0. 473295 0. 033213
н с н н с с	2. 709881 4. 650641 4. 743835 2. 664616 -2. 776157 -4. 947452 -5. 003950 -2. 738807 -1. 319169 -3. 490188	-3. 186929 -2. 055307 0. 406348 2. 147817 -3. 124582 -1. 993852 0. 470755 2. 150451 2. 426458 2. 721103	-0. 084748 -1. 099734 -1. 195397 -0. 160330 0. 100433 -0. 188212 -0. 448678 -0. 473295 0. 033213 0. 059334

H -1 350394	2 659809	1 093100
H -0 856985	3 260796	-0 475987
	2 316063	1 870550
	2 100620	0 775565
11 0.974074	3. 199020 0. ECC1EC	1 110457
H 2.300008	2. 566156	-1.118457
H 3.5/3446	2.6554/2	0. 139987
H 0. 311654	0.713662	1.769885
4 (<i>cis</i> , lev	el 2)	
N -0.635533	-1.989853	1. 205161
N 0.569783	-2. 113098	1.156069
C 1.457931	-1. 413655	0. 286686
C 1.638090	-0. 041992	0. 342969
C 0.755026	1.004513	0.992666
C -0. 437825	1. 220124	0. 049539
C -1.497927	0. 122266	0. 001891
C -1.521733	-1. 205744	0. 375121
C 2 357260	-2 191532	-0 458480
C 3 374034	-1 595915	-1 167652
0 3 566570	_0 207248	-1 11/577
c 2 700440	0. 207240	_0 240170
0 2.700449	1 050025	0 100061
0 -2.09/190	-1. 958970	0. 122901
C -3. /92636	-1.41/5/0	-0. 484451
C -3.803501	-0. 046106	-0. 800490
C -2.680817	0. 700983	-0. 533231
C 1.716580	2. 220885	1.067544
H -0. 025399	1.269820	-0. 959221
H 2.244624	-3. 258165	-0. 453070
H 4. 043609	-2. 203228	-1. 745744
H 4. 380712	0. 245249	-1. 648598
C 2.690228	2. 056139	-0. 123918
H -2.704283	-2. 978021	0. 455193
H -4.659636	-2. 021360	-0. 669849
H -4. 686467	0. 411658	-1. 205111
C -2.516526	2. 198897	-0. 678205
C -1.296902	2. 490618	0. 217799
H -3. 403615	2. 742480	-0. 377832
H -2.300335	2. 472338	-1. 708425
H -1 606292	2 601800	1 253017
H _0 773264	3 389598	-0 078154
н 2 27/772	2 160388	1 005538
L 1 202400	2 171200	1.061020
	3. 171309	1.001039
L 2. 32/008	2. 01/323	0.000000
H 3.674402	2.451810	0. 096699
н 0.404660	0. /21699	1.9/8942
4 (<i>trans</i> -CW	, level 2)	
N -0.321475	-1. 708198	0. 526347
N 0. 323336	-1. 723557	-0. 506946
C 1.671852	-1. 330730	-0. 274240
C 1.770743	-0. 004585	0. 120944
C 0.652473	1. 008845	0. 438052

C -0.650329	1. 008483	-0. 428458
C -1.773730	0. 003486	-0. 106866
C -1.674089	9 –1. 330497	0. 288825
C 2.815643	8 –2. 074294	-0. 582527
C 4. 052642	2 -1. 491997	-0. 424724
C 4. 172884	-0. 157786	-0. 002279
C 3 039799	0 575406	0 255832
C -2 814133	8 -2 078147	0 575422
C -4 066997		0 404507
C -4 176388	3 -0 156126	-0 011714
C -3 03546F	0 578023	-0 255328
C 1 441734	2 346906	0.314265
H _0 35/231	0 86/335	-1 /65603
ц 0.334231	0.004333	-0 027577
	-3.003100	0. 640240
П 4. 93/9/4	e -2. 000/00	-0. 040240
П 0. 14/12	0. 282372	0. 098091
0 2.903720	2.01/092	0. 683396
H -2. /23/42	2 -3.091541	0. 914565
H -4. 953369	9 -2.058098	0.606064
H -5. 147491	0. 288351	-0. 125454
C -2.898515	5 2. 020824	-0. 685678
C -1. 435660) 2.349928	-0. 318219
H -3. 604906	6 2.679037	-0. 194178
H -3. 059399	2. 115743	-1. 756644
H -1. 400539	2. 696772	0. 709981
H -1.017696	3. 126721	-0. 944040
H 1.026887	3. 130644	0. 933389
H 1.406786	6 2. 684636	-0. 716974
H 3.612277	2. 673877	0. 193285
H 3.062376	6 2. 111954	1. 754816
H 0. 357931	0. 875691	1. 476947
4 (<i>trans</i> -C	CW, level 2	2)
N 0. 337794	-1. 716128	0. 511866
N -0. 344021	-1.748599	-0. 492968
C -1.684984	-1.361625	-0. 208339
C -1.789539	0. 034233	-0. 119918
C -0. 693779	1.094340	-0. 357056
C 0. 704038	8 1.095910	0. 367696
C 1.796805	6 0. 036675	0. 126971
C 1.684546	6 -1.362634	0. 219650
C -2.799610) -2. 177966	-0. 116030
C -4. 054365	5 -1.585600	0. 088267
C -4. 176370) -0. 199992	0. 155798
C -3.035362	2 0. 599628	0. 034474
C 2. 775171	-2. 178896	0. 116891
C 4.03878	5 -1, 597462	-0, 102000
C 4 176246	6 -0. 221059	-0. 174349
C 3. 039016	6 0, 593425	-0. 042359
C -1, 455981	2, 400768	0. 044646
H 0 49844	1 106226	1 436876
H -2 698562	-3 242851	-0 192206
2. 030.00/		V. 132200

H -4. 924696 -2. 206538 0. 179777	H -0. 672510 3. 165328 -0. 787820	C 4. 118769 -1. 207560 -0. 625025
H -5. 142593 0. 250455 0. 284772	H -3. 365674 2. 785617 -0. 611402	C 4. 010823 0. 174860 -0. 562042
C -2.966973 2.104152 -0.038702	H -2. 516310 2. 169347 -2. 011033	C 2.822933 0.745369 -0.134234
H 2.668579 -3.242816 0.196973		C -2. 804425 -2. 114629 0. 225577
H 4.899598 -2.230561 -0.199107	4 (CI-CCW, level 2)	C -4. 034495 -1. 534827 0. 035353
H 5. 145031 0. 220123 -0. 315068	N -0. 464271 -2. 103533 0. 275608	C -4. 148006 -0. 159858 -0. 244592
C 2.979382 2.097650 0.026434	N 0.580700 -1.972188 1.004074	C -3. 015077 0. 611922 -0. 328801
C 1.467814 2.401583 -0.036385	C 1.696069 -1.364705 0.349996	C 1.335685 2.170391 1.040445
Н 3.524855 2.579739 -0.777072	C 1. 724288 0. 007731 0. 272254	H -0. 242842 1. 009174 -1. 290471
H 3. 415364 2. 445739 0. 959225	C 0.688083 0.996005 0.781944	H 3.097368 -3.069114 -0.305216
H 1.200945 2.655701 -1.056579	C -0. 552304 1. 114802 -0. 142684	H 5.037666 -1.663772 -0.939056
H 1. 196199 3. 241334 0. 588249	C -1.654225 0.042237 -0.053637	H 4. 847805 0. 795639 -0. 821766
H -1. 172637 3. 242776 -0. 571644	C -1. 610028 -1. 349241 0. 083281	C 2. 532835 2. 211541 0. 075392
H -1. 199890 2. 647282 1. 069610	C 2.781565 -2.122059 -0.126573	H -2. 706294 -3. 158653 0. 447097
H -3. 521120 2. 591880 0. 755289	C 3.850528 -1.479448 -0.699156	H -4. 923007 -2. 131968 0. 106580
H -3. 386661 2. 451519 -0. 979057	C 3.886212 -0.075048 -0.790019	H -5. 120644 0. 273932 -0. 383334
H -0. 488316 1. 104291 -1. 426457	C 2.835579 0.654117 -0.298024	C -2. 858577 2. 089091 -0. 604175
	C -2. 813731 -2. 095947 -0. 031813	C -1. 425811 2. 378210 -0. 099360
4 (CI-CW. eve 2)	C -4.011246 -1.477870 -0.240259	H -3. 602237 2. 697260 -0. 103407
N 0 432500 -2 143103 0 086345	C -4 071402 -0 077718 -0 355923	H -2 941702 2 289235 -1 669510
N -0 572258 -1 969128 0 892825	C = 2 915778 = 0.647655 = 0.268634	H -1 471713 2 632099 0 954735
C 1 604800 -1 415452 -0 068027	C 1 548417 2 297575 0 856025	H -0 966481 3 207785 -0 620271
C 2 702625 -2 074412 -0 626538	H = 0.195753 + 118772 = 1.172672	H 1 709337 2 100891 2 056747
C 1 718960 -0 069768 0 269452	H 2 759330 -3 190243 -0 036739	H 0 722675 3 056011 0 985559
C 3 888971 -1 396676 -0 844323	H 4 677563 -2 052916 -1 071509	H 2 270390 2 695037 -0 862899
C 2 910292 0 602210 0 025400	H 4 739916 0 409481 -1 225052	H 3 376955 2 751288 0 487946
C = 4 = 0.02596 = -0.048886 = 0.522719	(2.2644847 + 2.150083 - 0.223223)	H 0 154500 0 446662 1 633753
C = 1.692950 = 1.247476 = 0.381674	H = 2749376 = 3160689 = 0.069866	11 0. 104000 0. 440002 1. 000700
$C = 2 \ 931854 = 1 \ 898994 \ 0 \ 507832$	H = 4,909758 = 2,060203 = 0,308966	\mathbf{A} (TS'-CW level 1)
C = 1.652900 = 0.054432 = 0.121635	H = 5.013371 = 0.410549 = 0.520021	-1 (10 01, 10001) N -0 565147 -2 224857 0 461504
C = 4 + 103230 = 1 + 281201 = 0 + 000408	(-2, 772031, 2, 140105, -0, 430705)	N 0.508033 -1.800020 1.201684
C = 2.854585 = 0.674247 = 0.400710	C _1 350437 2 418567 0 008360	1 - 0.5000000 - 1.5000000000000000000000000000000000000
C = 4 0.61102 = 0.022004 = 0.417029	H = 2 = 525242 = 2 = 604210 = 0 = 102422	C 1.742006 0.026766 0.200700
C = 4.001193 $0.022904 = 0.417828$	H = 2.852612 + 2.413702 = 1.480061	C 0 768678 1 063100 0 823201
0 - 0.030342 = 0.030020 = 0.731230	H = 1 200025 - 2 610564 - 1 164015	C -0 500692 1 151764 -0 050256
H = 0.044560 - 0.807748 = 1.252603	H = 0.007033 + 3.274461 = 0.382068	C = 0.500083 1.151704 -0.059550
0.044309 0.097740 1.232003	$\begin{array}{cccccccccccccccccccccccccccccccccccc$	C = 1.599437 0.030122 0.000111
-1.220000 2.394023 -0.209019	$\begin{array}{cccccccccccccccccccccccccccccccccccc$	C = 1.590775 = 1.547180 = 0.135774
	$\begin{array}{cccccccccccccccccccccccccccccccccccc$	C 2. 562667 -2. 170601 -0. 110727
Π 4. 124776 - 1. 919355 - 1. 207955	$\Pi = 2.511209 = 2.543031 = 1.179723$	C = 2.705005 = 0.222105 = 0.005705
$\Pi = 2.948391 = 2.883078 = 0.933027$	H 0. 342613 0. 726236 1. 774600	0 2.820100 0.082347 -0.302178
H -5. 040586 -1. /951/1 0. 1/9113	A (TO OW 1 1 1)	
H -4.968906 0.514607 -0.713719	4 (IS-GW, Tevel I)	C = 3.9/9619 = 1.428311 = 0.3/8030
C 1.452575 2.134402 1.161030	N -0. 364087 -1. 799646 0. 289123	C -4. 0003/4 -0. 021//5 -0. 4/13/9
H U. I/9606 U. 466820 1. 693685	N U. 755135 -2. 347362 U. 393903	U -2. 844989 U. 680090 -0. 298380
U 2. 778937 2. 065915 U. 372376	U 1.839402 -1.421395 U.120757	U 1.003494 2.342995 0.773453
H U. 913721 3. 051262 U. 976353	G 1. /18894 -0. 034590 0. 208489	н -0. 166131 1. 1/2209 -1. 097425
H I. 667643 2. 101257 2. 223058	U U.566043 U.851688 U.716272	н 2. 491034 –3. 239519 –0. 003829
H 3. 015895 2. 434631 0. 954086	G -U. 532027 I. 048444 -0. 275361	н 4. 412/03 -2. 263594 -1. 198531
н 2. /34648 2. 664/5/ -0. 533617	G -1. /552/2 0. 030/05 -0. 147281	н 4.642222 0.1//170 -1.417878
C -2. 589961 2. 099435 -0. 928417	C -1. 638909 -1. 324126 0. 127949	C 2. 724617 2. 090487 -0. 326073
H -1. 389498 2. 725655 0. 751601	C 3.037350 -1.998977 -0.272307	H -2. 762511 -3. 128533 -0. 010808

H -4.881054 -1.990765 -0.524329	C -2.741204 -2.095069 0.591749	H 3. 052534 -2. 965221 -0. 783349
H -4. 919432 0. 489685 -0. 687800	C -1.804996 -0.014935 -0.185982	H 5. 163583 -1. 745133 -0. 375617
C -2. 695358 2. 175213 -0. 419509	C -3. 985218 -1. 490399 0. 666321	$H 5.\ 073398 0.\ 622481 0.\ 352656$
C -1. 319746 2. 440475 0. 198532	C -3. 071508 0. 550282 -0. 180802	C -1.505231 2.320145 -0.501264
H -3. 491855 2. 714285 0. 078945	C -4. 169142 -0. 173264 0. 254113	H -0. 387174 0. 797351 -1. 594710
H -2. 709127 2. 474163 -1. 464932	C 1.803106 -1.317473 -0.279740	C -2. 999042 1. 973496 -0. 675324
H -1. 413128 2. 596376 1. 269440	C 3.052093 -1.941886 -0.464066	H -1. 372965 2. 756596 0. 481221
H -0. 848434 3. 315332 -0. 225299	C 1.727074 0.019034 0.088302	H -1. 157828 3. 039670 -1. 230166
H 2.166224 2.434326 1.730015	C 4. 216065 -1. 261000 -0. 239508	H -3. 296342 2. 023840 -1. 719589
H 1.112319 3.256513 0.614410	C 2.951258 0.696083 0.322697	H -3. 641907 2. 650542 -0. 125479
H 2.397187 2.472409 -1.289730	C 4. 164014 0. 081391 0. 169215	$C 2. \ 704255 2. \ 116022 0. \ 758675$
H 3.668124 2.571734 -0.097332	C -0.715460 0.970670 -0.570853	H 1. 274154 2. 718016 -0. 728613
H 0.466027 0.854365 1.843626	C 0. 546569 0. 982357 0. 350831	H 0.765107 3.110376 0.899016
	H 0.200939 0.811177 1.368736	H 3. 407738 2. 818698 0. 328575
4 (TS-CCW, level 1)	C 1.264449 2.364727 0.297805	H 2. 784362 2. 199749 1. 840045
N -0. 400711 -1. 887022 -0. 023967	H -2. 608550 -3. 124986 0. 855125	
N 0.681017 -2.181983 -0.570066	H -4.823742 -2.059977 1.018508	
C -1.645376 -1.353752 0.146058	H -5. 145679 0. 271280 0. 282512	