

ReO3C2H5

* FREQUENCIES *

Coordinates (Cartesian)

Atom		bohr				
angstrom		Geometric Variables				
		X	Y	Z	X	
Y	Z	(0:frozen, *:LT par.)				
1 Re	3.051612	0.000000	0.000000	0.000000	1.614843	
0.000000	0.000000	1	2	3		
2 O	3.408859	1.763826	2.717490	1.803890		
0.933376	1.438034	4	5	6		
3 O	3.408859	1.763826	-2.717490	1.803890		
0.933376	-1.438034	7	8	9		
4 O	4.850053	-2.717966	0.000000	2.566537		
-1.438285	0.000000	10	11	12		
5 C	-0.718758	-1.222714	0.000000	-0.380350		
-0.647032	0.000000	13	14	15		
6 C	-2.664334	0.923189	0.000000	-1.409904		
0.488531	0.000000	16	17	18		
7 H	-2.476233	2.124797	-1.680310	-1.310366		
1.124394	-0.889181	19	20	21		
8 H	-2.476233	2.124797	1.680310	-1.310366		
1.124394	0.889181	22	23	24		
9 H	-4.584422	0.124934	0.000000	-2.425971		
0.066112	0.000000	25	26	27		
10 H	-0.899702	-2.442345	1.678842	-0.476102		
-1.292433	0.888405	28	29	30		
11 H	-0.899702	-2.442345	-1.678842	-0.476102		
-1.292433	-0.888405	31	32	33		

Atomic Masses:

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

10. H 1.00782500
11. H 1.00782500

Force Constants Matrix: Computed (free variables)

1) 0.4139 -0.1389 0.0000 -0.0442 -0.0324 -0.0626 -0.0442
-0.0324 0.0626 -0.1901
0.2322 0.0000 -0.0945 -0.0215 0.0000 -0.0255 0.0010
0.0000 -0.0001 -0.0002
-0.0003 -0.0001 -0.0002 0.0003 -0.0008 0.0040 0.0000
-0.0072 -0.0059 0.0027
-0.0072 -0.0059 -0.0027

2) -0.1390 0.7987 0.0000 -0.0249 -0.1948 -0.2053 -0.0249
-0.1948 0.2053 0.2168
-0.3562 0.0000 -0.0182 -0.0390 0.0000 0.0073 0.0060
0.0000 0.0026 -0.0004
0.0009 0.0026 -0.0004 -0.0009 0.0021 -0.0029 0.0000
-0.0122 -0.0081 0.0009
-0.0122 -0.0081 -0.0009

3) -0.0005 0.0002 0.8427 -0.0502 -0.2016 -0.3688 0.0503
0.2016 -0.3689 0.0001
-0.0002 -0.0624 0.0000 0.0000 -0.0339 0.0000 0.0000
-0.0020 -0.0030 0.0015
-0.0003 0.0030 -0.0015 -0.0003 0.0001 0.0000 -0.0010
0.0172 0.0059 -0.0026
-0.0171 -0.0059 -0.0026

4) -0.0442 -0.0253 -0.0514 0.0304 0.0292 0.0507 0.0023
0.0060 -0.0011 0.0103
-0.0032 0.0131 -0.0020 -0.0067 -0.0117 0.0019 0.0004
0.0002 0.0000 0.0001
0.0001 0.0008 -0.0003 -0.0001 0.0005 -0.0010 -0.0005
0.0024 0.0010 0.0000
-0.0024 -0.0001 0.0008

5) -0.0316 -0.1940 -0.2001 0.0290 0.1771 0.2175 0.0059
0.0299 -0.0070 0.0021
-0.0106 -0.0095 -0.0033 -0.0045 0.0000 0.0000 -0.0005
-0.0005 0.0000 -0.0001
-0.0001 -0.0006 0.0003 0.0004 -0.0002 0.0006 0.0005
-0.0013 0.0006 -0.0013
-0.0002 0.0011 0.0002

6) -0.0625 -0.2041 -0.3690 0.0503 0.2176 0.3683 0.0015
0.0063 -0.0189 0.0198
-0.0201 0.0133 -0.0038 0.0019 0.0055 -0.0030 -0.0029 -0.0002 0.0005
0.0000
0.0003 -0.0006 0.0005 0.0001 -0.0006 0.0014 0.0003
-0.0030 -0.0008 -0.0006
0.0015 0.0002 0.0009

7) 0.0000 0.0000 0.0000 0.0000 0.0000 0.0000 0.0000
0.0000 0.0000 0.0000
0.0000 0.0000 0.0000 0.0000 0.0000 0.0000 0.0000
0.0000 0.0000 0.0000
0.0000 0.0000 0.0000 0.0000 0.0000 0.0000 0.0000
0.0000 0.0000 0.0000
0.0000 0.0000 0.0000

8) 0.0000 0.0000 0.0000 0.0000 0.0000 0.0000 0.0000
0.0000 0.0000 0.0000
0.0000 0.0000 0.0000 0.0000 0.0000 0.0000 0.0000
0.0000 0.0000 0.0000
0.0000 0.0000 0.0000 0.0000 0.0000 0.0000 0.0000
0.0000 0.0000 0.0000
0.0000 0.0000 0.0000

9) 0.0000 0.0000 0.0000 0.0000 0.0000 0.0000 0.0000
0.0000 0.0000 0.0000
0.0000 0.0000 0.0000 0.0000 0.0000 0.0000 0.0000
0.0000 0.0000 0.0000
0.0000 0.0000 0.0000 0.0000 0.0000 0.0000 0.0000
0.0000 0.0000 0.0000
0.0000 0.0000 0.0000

10) -0.1907 0.2168 0.0000 0.0105 0.0025 0.0198 0.0105
0.0025 -0.0198 0.1779
-0.2296 0.0000 -0.0093 0.0078 0.0000 -0.0001 -0.0021
0.0000 0.0001 0.0000
0.0001 0.0001 0.0000 -0.0001 -0.0004 0.0004 0.0000
0.0007 0.0009 -0.0007
0.0007 0.0009 0.0007

11) 0.2325 -0.3563 0.0000 -0.0034 -0.0106 -0.0197 -0.0034
-0.0106 0.0197 -0.2296
0.3633 0.0000 -0.0015 0.0133 0.0000 -0.0012 -0.0007
0.0000 -0.0003 -0.0002
-0.0003 -0.0003 -0.0002 0.0003 -0.0001 -0.0001 0.0000
0.0036 0.0010 0.0009
0.0036 0.0010 -0.0009

12) -0.0005 -0.0003 -0.0641 0.0129 -0.0090 0.0137 -0.0129
0.0092 0.0136 0.0002
-0.0001 0.0362 0.0001 0.0000 -0.0027 0.0000 0.0000
0.0014 0.0003 -0.0002
0.0000 -0.0002 0.0002 0.0000 0.0001 0.0000 0.0000
0.0002 -0.0004 0.0010
0.0000 0.0005 0.0010

13) -0.0939 -0.0171 0.0000 -0.0021 -0.0035 -0.0037 -0.0021
-0.0035 0.0037 -0.0097
-0.0018 0.0000 0.3089 -0.0236 0.0000 -0.1046 0.0474
0.0000 -0.0007 -0.0013
-0.0009 -0.0007 -0.0013 0.0009 -0.0221 0.0248 0.0000
-0.0365 -0.0101 0.0181
-0.0365 -0.0101 -0.0181

14) -0.0204 -0.0407 0.0000 -0.0069 -0.0040 0.0020 -0.0069
-0.0040 -0.0020 0.0077
0.0134 0.0000 -0.0237 0.4223 0.0000 0.0683 -0.1215
0.0000 0.0121 -0.0132
-0.0012 0.0121 -0.0132 0.0012 -0.0023 0.0052 0.0000
-0.0200 -0.1222 0.1141
-0.0200 -0.1222 -0.1141

15) -0.0005 -0.0002 -0.0342 -0.0116 0.0002 0.0056 0.0117
0.0000 0.0056 0.0002
-0.0001 -0.0029 0.0001 0.0000 0.4981 -0.0003 -0.0001
-0.0709 -0.0185 0.0172
0.0016 0.0185 -0.0172 0.0016 0.0003 0.0001 -0.0002
0.0323 0.1206 -0.2021
-0.0321 -0.1205 -0.2022

16) -0.0242 0.0075 0.0000 0.0017 -0.0002 -0.0031 0.0017
-0.0002 0.0031 -0.0005
-0.0009 0.0000 -0.1049 0.0687 0.0000 0.4632 0.0514
0.0000 -0.0455 -0.0153
0.0214 -0.0455 -0.0153 -0.0214 -0.2493 -0.0918 0.0000
0.0016 -0.0021 0.0005
0.0016 -0.0021 -0.0005

17) 0.0010 0.0059 0.0000 0.0005 -0.0005 -0.0029 0.0005
-0.0005 0.0029 -0.0021
-0.0004 0.0000 0.0471 -0.1218 0.0000 0.0512 0.4774
0.0000 -0.0162 -0.1260
0.1179 -0.0162 -0.1260 -0.1179 -0.0941 -0.0807 0.0000
0.0142 -0.0138 -0.0007
0.0142 -0.0138 0.0007

18) 0.0000 0.0000 -0.0022 0.0002 -0.0005 -0.0002 -0.0002
0.0005 -0.0002 0.0000
0.0000 0.0015 0.0000 0.0000 -0.0708 0.0000 -0.0001
0.5399 0.0226 0.1171
-0.2136 -0.0226 -0.1170 -0.2135 0.0000 0.0000 -0.0427
-0.0184 0.0176 0.0009
0.0183 -0.0176 0.0008

19) 0.0007 0.0039 -0.0043 -0.0002 -0.0002 0.0007 0.0011
-0.0011 0.0011 -0.0001
-0.0006 0.0005 -0.0008 0.0120 -0.0186 -0.0452 -0.0162
0.0229 0.0504 0.0128
-0.0232 -0.0010 0.0019 -0.0031 -0.0026 -0.0156 0.0234
-0.0028 0.0037 0.0000
0.0004 -0.0008 0.0005

20) -0.0010 -0.0014 0.0025 0.0002 0.0002 -0.0002 -0.0004
0.0006 -0.0009 0.0002
0.0000 -0.0005 -0.0010 -0.0130 0.0169 -0.0154 -0.1263
0.1173 0.0128 0.1375
-0.1298 0.0020 0.0115 -0.0148 -0.0007 -0.0071 0.0098
0.0037 -0.0024 -0.0005

-0.0005 0.0005 0.0000

21) 0.0003 0.0023 -0.0014 -0.0001 -0.0003 0.0005 0.0003
-0.0008 0.0002 -0.0001
-0.0004 0.0002 -0.0012 -0.0015 0.0018 0.0209 0.1181
-0.2138 -0.0231 -0.1297
0.2287 0.0031 0.0147 -0.0188 0.0001 -0.0014 0.0006
0.0002 -0.0009 0.0014
-0.0005 0.0000 0.0006

22) 0.0000 0.0000 0.0000 0.0000 0.0000 0.0000 0.0000
0.0000 0.0000 0.0000
0.0000 0.0000 0.0000 0.0000 0.0000 0.0000 0.0000
0.0000 0.0000 0.0000
0.0000 0.0000 0.0000 0.0000 0.0000 0.0000 0.0000
0.0000 0.0000 0.0000
0.0000 0.0000 0.0000

23) 0.0000 0.0000 0.0000 0.0000 0.0000 0.0000 0.0000
0.0000 0.0000 0.0000
0.0000 0.0000 0.0000 0.0000 0.0000 0.0000 0.0000
0.0000 0.0000 0.0000
0.0000 0.0000 0.0000 0.0000 0.0000 0.0000 0.0000
0.0000 0.0000 0.0000
0.0000 0.0000 0.0000

24) 0.0000 0.0000 0.0000 0.0000 0.0000 0.0000 0.0000
0.0000 0.0000 0.0000
0.0000 0.0000 0.0000 0.0000 0.0000 0.0000 0.0000
0.0000 0.0000 0.0000
0.0000 0.0000 0.0000 0.0000 0.0000 0.0000 0.0000
0.0000 0.0000 0.0000
0.0000 0.0000 0.0000

25) -0.0011 0.0019 0.0000 0.0003 0.0000 -0.0005 0.0003
0.0000 0.0005 -0.0004
0.0000 0.0000 -0.0218 -0.0021 0.0000 -0.2495 -0.0943
0.0000 -0.0021 -0.0010
-0.0003 -0.0021 -0.0010 0.0003 0.2744 0.0970 0.0000
0.0010 -0.0002 -0.0001
0.0010 -0.0002 0.0001

26) 0.0038 -0.0018 0.0000 -0.0010 0.0003 0.0013 -0.0010
0.0003 -0.0013 0.0003
-0.0003 0.0000 0.0247 0.0053 0.0000 -0.0915 -0.0805
0.0000 -0.0154 -0.0075
-0.0012 -0.0154 -0.0075 0.0012 0.0969 0.0894 0.0000
-0.0008 0.0011 -0.0001
-0.0008 0.0011 0.0001

27) 0.0000 0.0001 -0.0011 -0.0006 0.0004 0.0003 0.0006
-0.0005 0.0004 0.0000
0.0000 0.0000 0.0000 0.0000 -0.0004 -0.0004 -0.0003
-0.0424 0.0234 0.0099
0.0004 -0.0234 -0.0097 0.0006 0.0003 0.0001 0.0419

-0.0003 -0.0003 0.0002
0.0003 0.0003 0.0002

28) -0.0069 -0.0127 0.0184 0.0025 -0.0012 -0.0032 -0.0026
0.0002 -0.0019 0.0006
0.0040 -0.0002 -0.0366 -0.0201 0.0323 0.0019 0.0142
-0.0184 -0.0026 0.0035
0.0003 0.0005 -0.0006 0.0003 0.0010 -0.0007 -0.0003
0.0417 0.0107 -0.0232
0.0005 0.0027 -0.0041

29) -0.0057 -0.0081 0.0072 0.0011 0.0007 -0.0011 -0.0003
0.0012 -0.0007 0.0008
0.0011 -0.0007 -0.0099 -0.1225 0.1205 -0.0024 -0.0138
0.0174 0.0037 -0.0025
-0.0008 -0.0007 0.0004 -0.0002 0.0000 0.0013 -0.0002
0.0107 0.1329 -0.1274
0.0026 0.0093 -0.0142

30) 0.0030 0.0010 -0.0017 0.0000 -0.0013 -0.0008 -0.0007
-0.0003 0.0008 -0.0010
0.0009 0.0007 0.0182 0.1141 -0.2024 0.0007 -0.0007
0.0010 -0.0001 -0.0005
0.0012 -0.0004 0.0000 0.0005 -0.0005 -0.0001 0.0001
-0.0231 -0.1273 0.2196
0.0040 0.0141 -0.0191

31) 0.0000 0.0000 0.0000 0.0000 0.0000 0.0000 0.0000
0.0000 0.0000 0.0000
0.0000 0.0000 0.0000 0.0000 0.0000 0.0000 0.0000
0.0000 0.0000 0.0000
0.0000 0.0000 0.0000 0.0000 0.0000 0.0000 0.0000
0.0000 0.0000 0.0000
0.0000 0.0000 0.0000

32) 0.0000 0.0000 0.0000 0.0000 0.0000 0.0000 0.0000
0.0000 0.0000 0.0000
0.0000 0.0000 0.0000 0.0000 0.0000 0.0000 0.0000
0.0000 0.0000 0.0000
0.0000 0.0000 0.0000 0.0000 0.0000 0.0000 0.0000
0.0000 0.0000 0.0000
0.0000 0.0000 0.0000

33) 0.0000 0.0000 0.0000 0.0000 0.0000 0.0000 0.0000
0.0000 0.0000 0.0000
0.0000 0.0000 0.0000 0.0000 0.0000 0.0000 0.0000
0.0000 0.0000 0.0000
0.0000 0.0000 0.0000 0.0000 0.0000 0.0000 0.0000
0.0000 0.0000 0.0000
0.0000 0.0000 0.0000

Dipole: -1.396556 -0.317086 0.000000
Derivatives:

1) 1.308927 -0.169442 0.000000

2)	-0.124589	1.639096	-0.000006
3)	0.000603	0.000074	1.717031
4)	-0.242414	-0.074523	-0.074694
5)	-0.079221	-0.441355	-0.444462
6)	-0.108930	-0.425578	-0.862227
7)	0.000000	0.000000	0.000000
8)	0.000000	0.000000	0.000000
9)	0.000000	0.000000	0.000000
10)	-0.544606	0.445892	0.000000
11)	0.437339	-0.906936	0.000000
12)	0.000735	0.000043	-0.164638
13)	-0.055714	-0.074719	0.000000
14)	-0.124798	-0.028607	0.000000
15)	0.000088	0.000043	0.020807
16)	-0.078949	-0.003652	0.000000
17)	-0.208849	0.042227	0.000000
18)	-0.001349	-0.001807	0.045644
19)	0.060925	-0.011722	0.050912
20)	0.041187	0.013266	0.046636
21)	0.011903	0.066861	-0.019363
22)	0.000000	0.000000	0.000000
23)	0.000000	0.000000	0.000000
24)	0.000000	0.000000	0.000000
25)	-0.143506	-0.021569	0.000000
26)	0.030576	0.038773	0.000000
27)	0.000194	0.000039	0.102573
28)	-0.054892	-0.005037	-0.006651

29) 0.030313 0.031529 0.038875
 30) -0.052539 0.048734 0.024219
 31) 0.000000 0.000000 0.000000
 32) 0.000000 0.000000 0.000000
 33) 0.000000 0.000000 0.000000

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

==== AA =====

Symmetry Displacements

	1	2
3		
	-----	-----
1.Re	0.039 0.000 0.000	0.000 0.038 0.000
0.000	0.000 0.000	
2.O	-0.094 -0.001 0.000	0.017 -0.108 0.000
0.000	0.000 0.177	
3.O	-0.094 -0.001 0.000	0.017 -0.108 0.000
0.000	0.000 -0.177	
4.O	-0.098 -0.002 0.000	-0.029 -0.123 0.000
0.000	0.000 0.000	
5.C	-0.097 0.003 0.000	-0.014 -0.066 0.000
0.000	0.000 0.000	
6.C	-0.095 0.005 0.000	0.008 -0.047 0.000
0.000	0.000 0.000	
7.H	-0.094 0.004 0.000	0.020 -0.049 0.000
0.000	0.000 0.000	
8.H	-0.094 0.004 0.000	0.020 -0.049 0.000
0.000	0.000 0.000	
9.H	-0.096 0.006 0.000	0.000 -0.027 0.000
0.000	0.000 0.000	
10.H	-0.098 0.003 0.000	-0.026 -0.065 0.000
0.000	0.000 0.000	
11.H	-0.098 0.003 0.000	-0.026 -0.065 0.000
0.000	0.000 0.000	

	4	5
6		
	-----	-----

1.Re 0.000 0.000 0.000 0.000 0.000 0.000
0.000 0.000 0.000
2.O 0.124 0.024 0.000 0.000 0.121 0.000
0.000 0.000 0.000
3.O 0.124 0.024 0.000 0.000 0.121 0.000
0.000 0.000 0.000
4.O -0.063 0.046 0.000 -0.030 -0.164 0.000
0.189 -0.062 0.000
5.C -0.085 -0.036 0.000 -0.003 -0.063 0.000
-0.120 0.019 0.000
6.C -0.117 -0.065 0.000 0.036 -0.027 0.000
-0.089 0.047 0.000
7.H -0.135 -0.062 0.000 0.058 -0.031 0.000
-0.071 0.044 0.000
8.H -0.135 -0.062 0.000 0.058 -0.031 0.000
-0.071 0.044 0.000
9.H -0.105 -0.093 0.000 0.021 0.008 0.000
-0.100 0.075 0.000
10.H -0.067 -0.039 0.000 -0.025 -0.059 0.000
-0.138 0.021 0.000
11.H -0.067 -0.039 0.000 -0.025 -0.059 0.000
-0.138 0.021 0.000

7 8
9 -----

1.Re 0.000 0.000 0.000 0.000 0.000 0.000
0.000 0.000 0.000
2.O 0.000 0.000 0.000 0.000 0.000 0.000
0.000 0.000 0.000
3.O 0.000 0.000 0.000 0.000 0.000 0.000
0.000 0.000 0.000
4.O 0.000 0.078 0.000 0.000 0.000 0.000
0.000 0.000 0.000
5.C -0.110 -0.152 0.000 0.186 -0.076 0.000
0.000 0.171 0.000
6.C 0.108 0.045 0.000 -0.110 0.062 0.000
0.033 -0.107 0.000
7.H 0.230 0.026 0.000 -0.025 0.048 0.000
0.163 -0.128 0.000
8.H 0.230 0.026 0.000 -0.025 0.048 0.000
0.163 -0.128 0.000
9.H 0.027 0.240 0.000 -0.166 0.198 0.000
-0.053 0.100 0.000
10.H -0.234 -0.134 0.000 -0.348 -0.063 0.000
-0.331 -0.298 0.000
11.H -0.234 -0.134 0.000 -0.348 -0.063 0.000
-0.331 -0.298 0.000

10 11
12

-----			-----			
-----			-----			
1.Re	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000
0.000	0.000	0.000				
2.O	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000
0.000	0.000	0.000				
3.O	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000
0.000	0.000	0.000				
4.O	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000
0.000	0.000	0.000				
5.C	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000
0.000	0.000	0.000				
6.C	0.148	-0.007	0.000	0.000	0.156	0.000
0.000	0.000	0.000				
7.H	-0.485	0.004	0.000	-0.054	-0.376	0.000
0.000	0.000	0.704				
8.H	-0.485	0.004	0.000	-0.054	-0.376	0.000
0.000	0.000	-0.704				
9.H	-0.367	-0.120	0.000	-0.006	-0.427	0.000
0.000	0.000	0.000				
10.H	-0.215	0.097	0.000	0.057	-0.337	0.000
0.000	0.000	0.000				
11.H	-0.215	0.097	0.000	0.057	-0.337	0.000
0.000	0.000	0.000				

15

13

14

-----			-----			
-----			-----			
1.Re	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000
0.000	0.000	0.000				
2.O	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000
0.000	0.000	0.000				
3.O	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000
0.000	0.000	0.000				
4.O	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000
0.000	0.000	0.000				
5.C	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000
0.000	0.000	0.000				
6.C	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000
0.000	0.000	0.000				
7.H	0.366	-0.042	0.000	0.000	0.543	0.000
0.000	0.000	0.000				
8.H	0.366	-0.042	0.000	0.000	0.543	0.000
0.000	0.000	0.000				
9.H	-0.587	-0.464	0.000	-0.048	-0.431	0.000
0.667	-0.465	0.000				
10.H	-0.073	0.274	0.000	0.024	-0.327	0.000
-0.334	0.232	0.000				
11.H	-0.073	0.274	0.000	0.024	-0.327	0.000
-0.334	0.232	0.000				

16

```
-----  
-----  
1.Re    0.000 0.000 0.000  
2.O     0.000 0.000 0.000  
3.O     0.000 0.000 0.000  
4.O     0.000 0.000 0.000  
5.C     0.000 0.000 0.000  
6.C     0.000 0.000 0.000  
7.H     0.000 0.000 0.000  
8.H     0.000 0.000 0.000  
9.H     0.000 0.000 0.000  
10.H    0.000 0.000 0.704  
11.H    0.000 0.000 -0.704
```

Frequencies and Normal Modes

```
=====
```

	1	2	3	4	5	
6	7	8				
	133.3166	246.1609	276.4756	318.8898	524.4922	
	931.7207	956.8237	985.3151			
	1	0.11120514	0.41860457	-0.71231422	0.06713270	-0.44901673
		-0.09239802	-0.15735499	0.25370967		
	2	0.37296820	0.37654318	0.23479965	-0.45301567	-0.22147231
		0.15048623	0.60908886	0.04900266		
	3	-0.00433897	0.21462758	-0.03404856	-0.56417736	-0.01346558
		-0.08430052	-0.44904795	-0.64203336		
	4	0.74344865	-0.48072891	0.13040729	0.01802324	-0.32394003
		-0.11131563	-0.27803906	0.03514632		
	5	0.16482346	0.32290876	0.15446565	0.67925752	-0.17908947
		0.04191149	0.11272353	-0.57867350		
	6	-0.20710735	-0.54720737	-0.42430229	-0.09493767	-0.31096234
		0.14831980	0.43929477	-0.39597142		
	7	-0.47422488	-0.01147518	0.45802358	-0.02996002	-0.70649973
		-0.17638808	-0.12771361	0.12839746		
	8	0.00302478	-0.03864174	-0.04233115	-0.00935478	-0.01734685
		0.16549947	-0.16412075	0.00275898		
	9	0.01784059	-0.00449168	-0.00735856	0.00777140	0.04923145
		-0.21177100	0.12752335	0.04130841		
	10	0.01367721	-0.01150372	-0.02903207	-0.00885636	0.05482336
		-0.54075555	0.14831816	-0.04893060		
	11	0.00204888	-0.00605021	-0.01831900	-0.00364891	0.02687273
		-0.11110873	-0.01798381	-0.04649972		
	12	-0.00085719	-0.00022209	0.00203830	0.00220255	-0.00494584
		0.05579593	-0.01326395	0.01286782		
	13	-0.00075229	0.00388812	0.00185468	0.00179874	0.00209982
		0.00716448	0.02403313	0.01853455		
	14	0.00279197	-0.00794019	-0.01718341	-0.00169300	0.02235948
		-0.08374649	-0.02058140	-0.02815443		
	15	0.01695605	-0.01409601	-0.04752559	-0.00966381	0.09576973
		-0.71220521	0.19126935	-0.06318394		

16 -0.00535277 0.00482788 0.00696164 -0.00188000 -0.01224738
 0.00613703 0.00474662 -0.00901863

9 10 11 12 13
 14 15 16

995.6986 1185.0098 1364.4600 1378.2401 1453.6426
 2945.5693 2955.2901 3023.0359

 1 -0.02649759 0.02196355 -0.00330221 0.00425852 0.00095946
 0.00271456 0.00083099 0.00037395
 2 0.11071425 -0.03323702 -0.01281416 0.01042866 0.00503195
 0.00264173 0.00067170 -0.00111440
 3 -0.11367512 -0.01605255 0.00971718 0.00684841 -0.00043847
 -0.00068594 0.00004770 0.00052585
 4 -0.04797348 0.02513235 -0.00539587 -0.00262019 0.00377350
 -0.00020152 0.00047757 0.00022812
 5 0.00557764 -0.04284356 0.00030797 0.00678521 0.00066074
 -0.00050602 0.00006132 0.00009740
 6 0.00187678 -0.00518208 -0.00416333 0.00945098 0.00422129
 0.00029164 0.00059301 0.00039742
 7 0.00441484 -0.02019302 -0.01690645 0.02172470 0.00561152
 0.00514634 0.00092834 -0.00084077
 8 0.60184040 -0.74901205 0.02005696 -0.06328842 -0.10854413
 0.04963509 -0.00131005 -0.00990938
 9 -0.53931602 -0.50818108 -0.05944135 0.45869337 -0.09297279
 0.40100494 -0.00571190 -0.04223191
 10 0.16011401 0.03289597 0.58702787 -0.00974958 -0.26974108
 -0.08491964 -0.31712642 -0.35635443
 11 0.35558257 0.28523614 -0.54834707 0.33272555 -0.29209826
 0.20976011 0.10383127 -0.47409525
 12 -0.04363810 -0.08925349 0.23487813 0.01625781 0.53696498
 -0.05367223 0.52976897 -0.59945081
 13 -0.23677828 -0.21381509 -0.42874085 -0.35928382 0.19362314
 -0.25516086 -0.55247786 -0.42010426
 14 0.30325825 0.11883187 0.03372419 0.37469578 0.66926255
 0.26165187 -0.45119589 0.15273744
 15 0.12908980 -0.12517405 -0.32644776 -0.24880692 0.21812596
 -0.10753374 0.31475625 0.28488203
 16 -0.00394300 0.10035894 0.05902879 -0.58511081 0.00946431
 0.79841473 -0.00876349 -0.07775307

Intensities

Frequency Intensity (degeneracy not counted) cm-1	Dipole Strength 1e-40 esu ² cm ²	Absorption km/mole
-----	-----	-----
133.316608	3.732124	0.124715
246.160932	114.537398	7.067153
276.475588	43.559978	3.018718
318.889833	10.610321	0.848100

524.492227	93.096035	12.239067
931.720670	56.031974	13.085783
956.823714	482.167020	115.639845
985.315076	115.127935	28.433735
995.698590	21.136583	5.275222
1185.009807	44.872796	13.328557
1364.460050	12.560709	4.295889
1378.240098	13.433053	4.640638
1453.642581	12.162459	4.431565
2945.569306	11.252760	8.308189
2955.290098	17.079644	12.651936
3023.035850	5.530821	4.190936

==== AAA ====

Symmetry Displacements

	1	2
3	-----	-----

1.Re	0.000 0.000 0.038	0.000 0.000 0.000
0.000 0.000 0.000		
2.O	0.028 -0.001 -0.108	0.060 0.099 0.095
0.139 -0.050 0.000		
3.O	-0.028 0.001 -0.108	-0.060 -0.099 0.095
-0.139 0.050 0.000		
4.O	0.000 0.000 -0.124	0.000 0.000 -0.102
0.000 0.000 0.106		
5.C	0.000 0.000 -0.066	0.000 0.000 -0.033
0.000 0.000 -0.044		
6.C	0.000 0.000 -0.045	0.000 0.000 -0.068
0.000 0.000 -0.067		
7.H	-0.017 0.001 -0.047	-0.037 -0.061 -0.116
0.053 0.031 -0.039		
8.H	0.017 -0.001 -0.047	0.037 0.061 -0.116
-0.053 -0.031 -0.039		
9.H	0.000 0.000 -0.026	0.000 0.000 0.003
0.000 0.000 -0.142		
10.H	0.017 -0.001 -0.065	0.037 0.061 0.015
-0.053 -0.031 -0.072		
11.H	-0.017 0.001 -0.065	-0.037 -0.061 0.015
0.053 0.031 -0.072		

	4	5
6	-----	-----

1.Re	0.000 0.000 0.000	0.000 0.000 0.000
0.000 0.000 0.000		
2.O	0.000 0.068 0.000	0.000 0.000 0.000
0.000 0.000 0.000		

10 0.06469838 -0.17816176 -0.45910128
 11 -0.35472687 -0.43057055 -0.09879881

=====
 Intensities

Intensity (degeneracy not counted)	Frequency cm-1	Dipole Strength 1e-40 esu ² cm ²	Absorption km/mole
	-----	-----	-----
	83.867643	10.000347	0.210227
	170.332699	0.272242	0.011623
	241.754946	2.988017	0.181066
	320.465696	10.001040	0.803350
	648.358263	4.533928	0.736831
	912.833860	87.267841	19.967516
	960.448548	474.330077	114.191253
	1200.444451	0.407669	0.122667
	1448.676785	36.815018	13.368251
	2994.230310	0.086824	0.065163
	3045.836025	6.422284	4.903138

Zero-Point Energy : 0.072221 a.u.
 =====
 1.965236 eV

=====
 Vibrations and Normal Modes *** (cartesian coordinates, NOT
 mass-weighted) ***
 =====

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

	83.868	170.333	133.317			
	-----	-----	-----			
1.Re	0.000	0.000	-0.015	0.010	0.031	0.000
0.000	0.000	0.017				
2.O	-0.135	0.041	-0.024	0.194	-0.005	-0.002
0.115	0.044	-0.026				
3.O	0.135	-0.041	-0.024	0.194	-0.005	0.002
-0.115	-0.044	-0.026				
4.O	0.000	0.000	0.111	-0.249	-0.140	0.000
0.000	0.000	-0.025				
5.C	0.000	0.000	-0.127	-0.005	0.021	0.000
0.000	0.000	-0.083				
6.C	0.000	0.000	0.243	-0.264	-0.227	0.000

0.000 0.000 -0.039
7.H -0.020 0.289 0.446 -0.425 -0.203 -0.001
0.306 0.331 0.232
8.H 0.020 -0.289 0.446 -0.425 -0.203 0.001
-0.306 -0.331 0.232
9.H 0.000 0.000 0.119 -0.160 -0.477 0.000
0.000 0.000 -0.556
10.H 0.045 -0.238 -0.295 0.109 -0.012 -0.008
-0.099 -0.139 -0.197
11.H -0.045 0.238 -0.295 0.109 -0.012 0.008
0.099 0.139 -0.197

241.755 246.161
276.476

1.Re 0.000 0.000 -0.016 -0.054 -0.046 0.000
-0.065 0.021 0.000
2.O -0.076 -0.032 0.012 0.301 0.045 -0.123
0.201 -0.007 -0.014
3.O 0.076 0.032 0.012 0.301 0.045 0.123
0.201 -0.007 0.014
4.O 0.000 0.000 0.005 0.438 0.288 0.000
-0.069 0.036 0.000
5.C 0.000 0.000 0.170 -0.175 0.107 0.000
0.108 -0.248 0.000
6.C 0.000 0.000 -0.004 -0.262 0.072 0.000
0.339 -0.070 0.000
7.H 0.351 0.213 0.186 -0.311 0.079 0.001
0.494 -0.087 0.003
8.H -0.351 -0.213 0.186 -0.311 0.079 -0.001
0.494 -0.087 -0.003
9.H 0.000 0.000 -0.529 -0.233 0.000 0.000
0.228 0.201 0.000
10.H 0.053 0.188 0.313 -0.236 0.092 -0.011
0.092 -0.227 0.011
11.H -0.053 -0.188 0.313 -0.236 0.092 0.011
0.092 -0.227 -0.011

318.890 320.466
524.492

1.Re 0.011 -0.069 0.000 0.000 0.000 0.077
-0.033 -0.015 0.000
2.O -0.047 0.530 -0.402 -0.271 0.338 -0.066
-0.002 -0.010 -0.004
3.O -0.047 0.530 0.402 0.271 -0.338 -0.066
-0.002 -0.010 0.004
4.O -0.134 -0.207 0.000 0.000 0.000 -0.773
0.033 0.012 0.000
5.C 0.036 -0.033 0.000 0.000 0.000 0.000
0.351 0.278 0.000

6.C	0.070	-0.024	0.000	0.000	0.000	0.002
0.066	-0.028	0.000				
7.H	0.112	-0.023	0.006	-0.017	-0.026	-0.019
-0.166	-0.005	-0.007				
8.H	0.112	-0.023	-0.006	0.017	0.026	-0.019
-0.166	-0.005	0.007				
9.H	0.048	0.032	0.000	0.000	0.000	0.024
0.239	-0.438	0.000				
10.H	0.050	-0.049	-0.005	0.023	0.041	0.040
0.436	0.230	-0.016				
11.H	0.050	-0.049	0.005	-0.023	-0.041	0.040
0.436	0.230	0.016				

648.358 912.834
931.721

1.Re	0.000	0.000	-0.003	0.000	0.000	-0.006
0.004	-0.007	0.000				
2.O	-0.020	-0.010	-0.011	0.013	0.030	0.047
0.003	0.016	0.017				
3.O	0.020	0.010	-0.011	-0.013	-0.030	0.047
0.003	0.016	-0.017				
4.O	0.000	0.000	-0.002	0.000	0.000	0.004
-0.045	0.062	0.000				
5.C	0.000	0.000	0.149	0.000	0.000	-0.050
-0.057	0.033	0.000				
6.C	0.000	0.000	0.009	0.000	0.000	0.067
0.132	-0.020	0.000				
7.H	0.154	-0.219	-0.134	0.254	-0.315	-0.138
-0.246	-0.034	-0.046				
8.H	-0.154	0.219	-0.134	-0.254	0.315	-0.138
-0.246	-0.034	0.046				
9.H	0.000	0.000	-0.102	0.000	0.000	-0.247
0.340	-0.541	0.000				
10.H	-0.246	-0.512	-0.265	0.523	-0.071	-0.035
-0.456	0.094	-0.005				
11.H	0.246	0.512	-0.265	-0.523	0.071	-0.035
-0.456	0.094	0.005				

956.824 960.449
985.315

1.Re	0.020	-0.073	0.000	0.000	0.000	-0.067
-0.038	-0.007	0.000				
2.O	0.030	0.187	0.251	0.045	0.224	0.367
0.071	0.283	0.431				
3.O	0.030	0.187	-0.251	-0.045	-0.224	0.367
0.071	0.283	-0.431				
4.O	-0.302	0.453	0.000	0.000	0.000	0.021
0.327	-0.473	0.000				
5.C	0.123	-0.076	0.000	0.000	0.000	0.079

-0.028	-0.047	0.000					
6.C	-0.152	0.085	0.000	0.000	0.000	-0.063	
0.022	0.044	0.000					
7.H	0.085	0.093	0.030	-0.206	0.252	0.099	
-0.138	0.014	-0.034					
8.H	0.085	0.093	-0.030	0.206	-0.252	0.099	
-0.138	0.014	0.034					
9.H	-0.253	0.347	0.000	0.000	0.000	0.175	
0.127	-0.217	0.000					
10.H	0.314	-0.131	-0.011	-0.414	-0.054	-0.018	
-0.087	-0.011	0.024					
11.H	0.314	-0.131	0.011	0.414	0.054	-0.018	
-0.087	-0.011	-0.024					

	995.699		1185.010				
1200.444							
-----	-----		-----				

1.Re	-0.002	0.007	0.000	-0.001	0.002	0.000	
0.000	0.000	-0.002					
2.O	-0.003	-0.022	-0.035	-0.001	0.001	0.003	
-0.001	0.003	0.006					
3.O	-0.003	-0.022	0.035	-0.001	0.001	-0.003	
0.001	-0.003	0.006					
4.O	0.005	-0.029	0.000	0.003	-0.013	0.000	
0.000	0.000	0.001					
5.C	0.203	-0.252	0.000	0.168	0.027	0.000	
0.000	0.000	-0.090					
6.C	-0.088	0.257	0.000	-0.074	-0.063	0.000	
0.000	0.000	0.128					
7.H	-0.478	0.239	-0.054	0.224	0.005	0.075	
0.181	-0.320	-0.087					
8.H	-0.478	0.239	0.054	0.224	0.005	-0.075	
-0.181	0.320	-0.087					
9.H	0.151	-0.322	0.000	-0.202	0.270	0.000	
0.000	0.000	-0.238					
10.H	-0.108	-0.212	-0.005	-0.601	0.017	-0.085	
-0.479	0.289	0.065					
11.H	-0.108	-0.212	0.005	-0.601	0.017	0.085	
0.479	-0.289	0.065					

	1364.460		1378.240				
1448.677							
-----	-----		-----				

1.Re	0.000	0.001	0.000	0.000	0.000	0.000	
0.000	0.000	0.000					
2.O	0.001	-0.001	-0.002	0.001	0.000	-0.001	
-0.001	0.001	0.001					
3.O	0.001	-0.001	0.002	0.001	0.000	0.001	
0.001	-0.001	0.001					
4.O	0.000	0.000	0.000	-0.001	0.001	0.000	
0.000	0.000	0.000					

5.C	-0.008	0.009	0.000	0.016	-0.082	0.000
0.000	0.000	-0.019				
6.C	-0.090	0.089	0.000	-0.023	0.000	0.000
0.000	0.000	-0.046				
7.H	0.462	-0.276	-0.180	0.067	-0.034	-0.012
0.507	0.023	0.051				
8.H	0.462	-0.276	0.180	0.067	-0.034	0.012
-0.507	-0.023	0.051				
9.H	0.195	-0.538	0.000	-0.015	-0.020	0.000
0.000	0.000	0.687				
10.H	-0.002	-0.062	-0.045	-0.003	0.552	0.431
-0.031	0.037	0.002				
11.H	-0.002	-0.062	0.045	-0.003	0.552	-0.431
0.031	-0.037	0.002				

	1453.643	2945.569
2955.290		

1.Re	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000
0.000	0.000	0.000				
2.O	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000
0.000	0.000	0.000				
3.O	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000
0.000	0.000	0.000				
4.O	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000
0.000	0.000	0.000				
5.C	0.022	0.009	0.000	-0.009	-0.066	0.000
-0.001	-0.001	0.000				
6.C	0.032	0.041	0.000	0.005	0.007	0.000
-0.048	0.019	0.000				
7.H	-0.210	-0.480	-0.386	-0.001	-0.025	0.039
-0.056	-0.266	0.380				
8.H	-0.210	-0.480	0.386	-0.001	-0.025	-0.039
-0.056	-0.266	-0.380				
9.H	-0.125	0.360	0.000	-0.067	-0.028	0.000
0.684	0.303	0.000				
10.H	-0.037	0.010	-0.007	0.062	0.394	-0.578
0.001	0.005	-0.006				
11.H	-0.037	0.010	0.007	0.062	0.394	0.578
0.001	0.005	0.006				

	2994.230	3023.036
3045.836		

1.Re	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000
0.000	0.000	0.000				
2.O	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000
0.000	0.000	0.000				
3.O	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000
0.000	0.000	0.000				
4.O	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000

```

0.000 0.000 0.000
  5.C    0.000 0.000 0.091    0.002 0.007 0.000
0.000 0.000 0.018
  6.C    0.000 0.000 -0.018    0.056 0.071 0.000
0.000 0.000 0.091
  7.H    -0.016 -0.081 0.112    -0.039 -0.295 0.442
0.071 0.404 -0.555
  8.H    0.016 0.081 0.112    -0.039 -0.295 -0.442
-0.071 -0.404 -0.555
  9.H    0.000 0.000 -0.006    -0.593 -0.247 0.000
0.000 0.000 0.021
 10.H    0.071 0.409 -0.551    -0.007 -0.042 0.057
0.012 0.083 -0.110
 11.H    -0.071 -0.409 -0.551    -0.007 -0.042 -0.057
-0.012 -0.083 -0.110
    
```

List of All Frequencies:

Intensities

Frequency Intensity (degeneracy not counted) cm-1	Dipole Strength 1e-40 esu ² cm ²	Absorption km/mole
-----	-----	-----
83.867643	10.000347	0.210227
133.316608	3.732124	0.124715
170.332699	0.272242	0.011623
241.754946	2.988017	0.181066
246.160932	114.537398	7.067153
276.475588	43.559978	3.018718
318.889833	10.610321	0.848100
320.465696	10.001040	0.803350
524.492227	93.096035	12.239067
648.358263	4.533928	0.736831
912.833860	87.267841	19.967516
931.720670	56.031974	13.085783
956.823714	482.167020	115.639845
960.448548	474.330077	114.191253
985.315076	115.127935	28.433735
995.698590	21.136583	5.275222
1185.009807	44.872796	13.328557
1200.444451	0.407669	0.122667
1364.460050	12.560709	4.295889
1378.240098	13.433053	4.640638
1448.676785	36.815018	13.368251
1453.642581	12.162459	4.431565
2945.569306	11.252760	8.308189
2955.290098	17.079644	12.651936
2994.230310	0.086824	0.065163
3023.035850	5.530821	4.190936

3045.836025 6.422284 4.903138
1

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

Pressure: 1.000000 atm.
Temperature: 298.150000 K

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

504.6128	989.3773	998.7717

0.9900	0.1414	0.0000
-0.1414	0.9900	0.0000
0.0000	0.0000	1.0000

Temp			
Transl	Rotat	Vibrat	Total
----	-----	-----	
-----	-----	-----	

298.15	Entropy (cal/mole-K):		
42.612	27.702	18.654	88.968
	Internal Energy (Kcal/mole):		
0.889	0.889	48.424	50.202
	Constant Volume Heat Capacity (cal/mole-K):		
2.981	2.981	19.818	25.780