

```
##TITLE= Acetophenone
##JCAMP-DX= 4.24 $$Exported GRAMS Data File
##DATA TYPE= INFRARED SPECTRUM
##ORIGIN=EPA-IR VAPOR PHASE LIBRARY
##OWNER=NIST OSRD
##CAS REGISTRY NO=98-86-2
##MOLFORM=C 8 H 8 O
##$ASSIGNMENT TYPE= CHIME
##$CHIME TARGET= MOLECULE
##PEAK ASSIGNMENT= (XYWA)
(3100, -1, 30, <load "3198.xyz"; select *;
wireframe 40; animation on>)
(3068, -1, 10, <load "3190.xyz"; select *;
wireframe 40; animation on>)
(3058, -1, 10, <load "3184.xyz"; select *;
wireframe 40; animation on>)
(3048, -1, 10, <load "3179.xyz"; select *;
wireframe 40; animation on>)
(3038, -1, 10, <load "3169.xyz"; select *;
wireframe 40; animation on>)
(3018, -1, 20, <load "3153.xyz"; select *;
wireframe 40; animation on>)
(2985, -1, 30, <load "3063.xyz"; select *;
wireframe 40; animation on>)
(2945, -1, 30, <load "3061.xyz"; select *;
wireframe 40; animation on>)
(1708, -1, 30, <load "2037.xyz"; select *;
wireframe 40; animation on>)
(1600, -1, 30, <load "1628.xyz"; select *;
wireframe 40; animation on>)
(1445, -1, 20, <load "1461.xyz"; select *;
wireframe 40; animation on>)
(1363, -1, 30, <load "1385.xyz"; select *;
wireframe 40; animation on>)
(1260, -1, 20, <load "1242.xyz"; select *;
wireframe 40; animation on>)
(1180, -1, 40, <load "1197.xyz"; select *;
wireframe 40; animation on>)
(1070, -1, 30, <load "1081.xyz"; select *;
wireframe 40; animation on>)
(1030, -1, 20, <load "1066.xyz"; select *;
wireframe 40; animation on>)
(1010, -1, 20, <load "1054.xyz"; select *;
wireframe 40; animation on>)
(953, -1, 20, <load "1011.xyz"; select *;
wireframe 40; animation on>)
(753, -1, 20, <load "891.xyz"; select *;
wireframe 40; animation on>)
(687, -1, 20, <load "808.xyz"; select *;
wireframe 40; animation on>)
(583, -1, 20, <load "582.xyz"; select *;
wireframe 40; animation on>)
(2400, -1, 2000, <load "acetoph.pdb"; spacefill off; wireframe 40;
color bonds none; color atoms cpk>)
##NPOINTS= 580
##XUNITS= 1/CM
##YUNITS= TRANSMITTANCE
```

```
##RESOLUTION=
##FIRSTX= 500
##LASTX= 3980.002
##XFACTOR= 1.0
##YFACTOR= 5.9604E-8
##FIRSTY= 89.485
##MAXY= 103.63
##MINY= 10.162
##XYDATA= (X++(Y..Y))
500 1501308335 1598526705 1663297352 1592098365 1592098365 1626372027
536.06 1545147331 1588436639 1624500674 1575686797 1546927272 1588436639
572.12 1432913242 1096402195 925166494 814647813 986778994 1376321506
608.18 1499580886 1518692668 1585695873 1605905169 1603134262 1624500674
644.24 1618899527 1625436081 1618899527 1599447156 1493550446 1363703314
680.31 1200797835 1068980778 900989845 1168745350 1210514221 1382674317
716.37 1530981334 1534510611 1548709264 1539819787 1332661638 1189788854
752.43 1077010397 790623823 1146753030 1266105502 1455358196 1581138437
788.49 1628245535 1647099730 1639531994 1658516880 1649946628 1644257745
824.55 1669052109 1659471874 1639531994 1659471874 1663297352 1645204527
860.62 1662340156 1669052109 1649946628 1655655195 1655655195 1625436081
896.68 1614246658 1614246658 1594850195 1600368137 1594850195 1572062817
932.74 1541593590 1439527269 1256666090 1200106799 1216101702 1348093132
968.8 1516072241 1589351280 1600368137 1608680865 1621697683 1608680865
1004.8 1591182143 1568447174 1484123001 1414066703 1442015392 1480709614
1040.9 1593932390 1634819826 1631059846 1598526705 1573873764 1531862892
1076.9 1492690937 1497855423 1527460176 1541593590 1581138437 1605905169
1113 1610533994 1627308511 1640476057 1637645499 1643311506 1648048150
1149.1 1628245535 1608680865 1600368137 1551386099 1437870905 1373156054
1185.1 1374737869 1405950065 1546927272 1576594096 1557650060 1547818012
1221.2 1509106522 1407569656 1278556416 1162036839 946171573 547608141
1257.3 236984475 170498238 186840016 633096475 1355095478 1473058166
1293.3 1480709614 1460393516 1427150901 1452847050 1496131945 1549601029
1329.4 1585695873 1567544563 1530100286 1389056451 1086350318 844733847
1365.4 795188144 816055876 1144115570 1385861711 1499580886 1543369438
1401.5 1569350305 1554067563 1541593590 1540706434 1485832645 1435389932
1437.6 1384267097 1261013964 1240851746 1285197570 1360566884 1509975484
1473.6 1584783336 1613317690 1606829868 1626372027 1626372027 1618899527
1509.7 1648048150 1636703066 1631059846 1613317690 1602211691 1603134262
1545.8 1617967881 1606829868 1610533994 1604981001 1589351280 1546037045
1581.8 1489257844 1451175361 1391457340 1373156054 1388257076 1397880015
1617.9 1495270950 1560342351 1593932390 1618899527 1615176160 1601289649
1653.9 1577501918 1530100286 1490973403 1479005865 1442015392 1344992603
1690 629825001 275879795 204277199 202520922 398767629 913523862
1726.1 1309844967 1474755063 1493550446 1505635673 1504769209 1523070112
1762.1 1563039293 1613317690 1625436081 1643311506 1648997116 1634819826
1798.2 1617036772 1600368137 1602211691 1610533994 1640476057 1642365812
1834.3 1633879020 1651847293 1641420663 1636703066 1651847293 1656608540
1870.3 1639531994 1633879020 1621697683 1610533994 1610533994 1613317690
1906.4 1620764427 1635761175 1648048150 1645204527 1645204527 1636703066
1942.4 1623565807 1614246658 1612389258 1601289649 1610533994 1617967881
1978.5 1617036772 1626372027 1633879020 1630121202 1640476057 1646151855
2014.6 1646151855 1646151855 1652798447 1654702398 1653750148 1657562435
2050.6 1655655195 1660427418 1672899672 1676756105 1672899672 1670974783
2086.7 1664255099 1658516880 1658516880 1658516880 1657562435 1662340156
2122.7 1667131647 1662340156 1666172247 1669052109 1663297352 1664255099
2158.8 1667131647 1663297352 1668091602 1664255099 1660427418 1658516880
2194.9 1661383512 1653750148 1654702398 1656608540 1655655195 1656608540
```

2230.9 1661383512 1661383512 1659471874 1662340156 1658516880 1659471874
2267 1661383512 1655655195 1653750148 1661383512 1662340156 1665213397
2303.1 1672899672 1674826779 1669052109 1676756105 1671936951 1646151855
2339.1 1656608540 1642365812 1677721600 1676756105 1614246658 1583871324
2375.2 1594850195 1625436081 1640476057 1650896687 1659471874 1655655195
2411.2 1657562435 1659471874 1649946628 1655655195 1653750148 1650896687
2447.3 1654702398 1659471874 1658516880 1657562435 1657562435 1653750148
2483.4 1657562435 1654702398 1651847293 1648048150 1645204527 1640476057
2519.4 1642365812 1643311506 1648997116 1648997116 1649946628 1646151855
2555.5 1641420663 1645204527 1646151855 1645204527 1649946628 1647099730
2591.6 1634819826 1636703066 1630121202 1627308511 1629183099 1631999030
2627.6 1628245535 1635761175 1641420663 1635761175 1640476057 1637645499
2663.7 1642365812 1662340156 1670974783 1665213397 1660427418 1656608540
2699.7 1647099730 1649946628 1649946628 1647099730 1649946628 1653750148
2735.8 1647099730 1646151855 1645204527 1643311506 1647099730 1645204527
2771.9 1648048150 1643311506 1646151855 1644257745 1644257745 1648997116
2807.9 1642365812 1638588475 1647099730 1637645499 1633879020 1629183099
2844 1624500674 1613317690 1609607163 1608680865 1608680865 1612389258
2880.1 1617036772 1617967881 1620764427 1617967881 1619831708 1614246658
2916.1 1600368137 1591182143 1569350305 1564839845 1559444404 1564839845
2952.2 1572062817 1564839845 1554067563 1543369438 1522193615 1538048024
2988.2 1558546974 1559444404 1546037045 1490973403 1439527269 1420593738
3024.3 1414066703 1404332337 1372365829 1351200808 1352757330 1344992603
3060.4 1329596600 1214702418 1153373307 1150720621 1183640716 1309091177
3096.4 1316648644 1362918529 1460393516 1520442134 1567544563 1602211691
3132.5 1618899527 1619831708 1617967881 1623565807 1621697683 1622631476
3168.5 1630121202 1632938754 1636703066 1644257745 1647099730 1639531994
3204.6 1634819826 1652798447 1645204527 1648048150 1649946628 1646151855
3240.7 1642365812 1646151855 1649946628 1649946628 1650896687 1652798447
3276.7 1650896687 1659471874 1653750148 1647099730 1657562435 1645204527
3312.8 1648048150 1653750148 1654702398 1650896687 1646151855 1652798447
3348.9 1649946628 1648997116 1655655195 1647099730 1629183099 1622631476
3384.9 1599447156 1598526705 1601289649 1597606784 1635761175 1646151855
3421 1650896687 1658516880 1661383512 1659471874 1661383512 1662340156
3457 1652798447 1654702398 1661383512 1662340156 1660427418 1667131647
3493.1 1660427418 1656608540 1659471874 1667131647 1659471874 1656608540
3529.2 1670013169 1652798447 1659471874 1659471874 1656608540 1661383512
3565.2 1670013169 1659471874 1662340156 1664255099 1651847293 1663297352
3601.3 1669052109 1657562435 1655655195 1653750148 1654702398 1649946628
3637.4 1648997116 1655655195 1658516880 1664255099 1659471874 1666172247
3673.4 1654702398 1662340156 1663297352 1664255099 1654702398 1667131647
3709.5 1659471874 1648997116 1656608540 1660427418 1642365812 1653750148
3745.5 1650896687 1655655195 1656608540 1666172247 1657562435 1652798447
3781.6 1668091602 1653750148 1654702398 1657562435 1646151855 1646151855
3817.7 1651847293 1651847293 1653750148 1655655195 1652798447 1654702398
3853.7 1663297352 1661383512 1663297352 1659471874 1650896687 1652798447
3889.8 1673862948 1650896687 1663297352 1645204527 1645204527 1671936951
3925.8 1661383512 1668091602 1628245535 1666172247 1653750148 1670013169
3961.9 1670974783 1678687650 1675791164 1738680949

##END=