

Supporting Information

Physicochemical properties and plastic crystal
structures of phosphonium fluorohydrogenate salts

*Takeshi Enomoto,^a Shunsuke Kanematsu,^a Katsuhiko Tsunashima,^b Kazuhiko Matsumoto,^{*a} Rika
Hagiwara^a*

^a Graduate School of Energy Science, Kyoto University, Yoshida, Sakyo-ku, Kyoto 606-8501, Japan

^b Department of Materials Science, Wakayama National College of Technology, 77 Nada-cho, Noshima,
Gobo 644-0023, Japan

* E-mail: k-matsumoto@energy.kyoto-u.ac.jp

Table S1. Results of elemental analysis for $P_{222m}(FH)_nF$ ($m = 2, 5, 8,$ and 101)

Salt	Found			Calc.		
	C / %	H / %	F / %	C / %	H / %	F / %
$P_{222(101)}(FH)_{2.1}F$	42.4	10.1	25.9	42.85	9.9	26.3
$P_{2225}(FH)_{2.1}F$	52.5	11.3	23.4	52.8	11.3	23.5
$P_{2228}(FH)_{2.1}F$	57.2	11.7	20.4	57.5	11.75	20.1
$P_{2222}(FH)_2F(H_2O)_{0.5}^a$	44.8	10.6	26.15	44.6	10.8	26.5

^a The sample absorbed moisture during the elemental analysis measurement due to the high hygroscopic property.

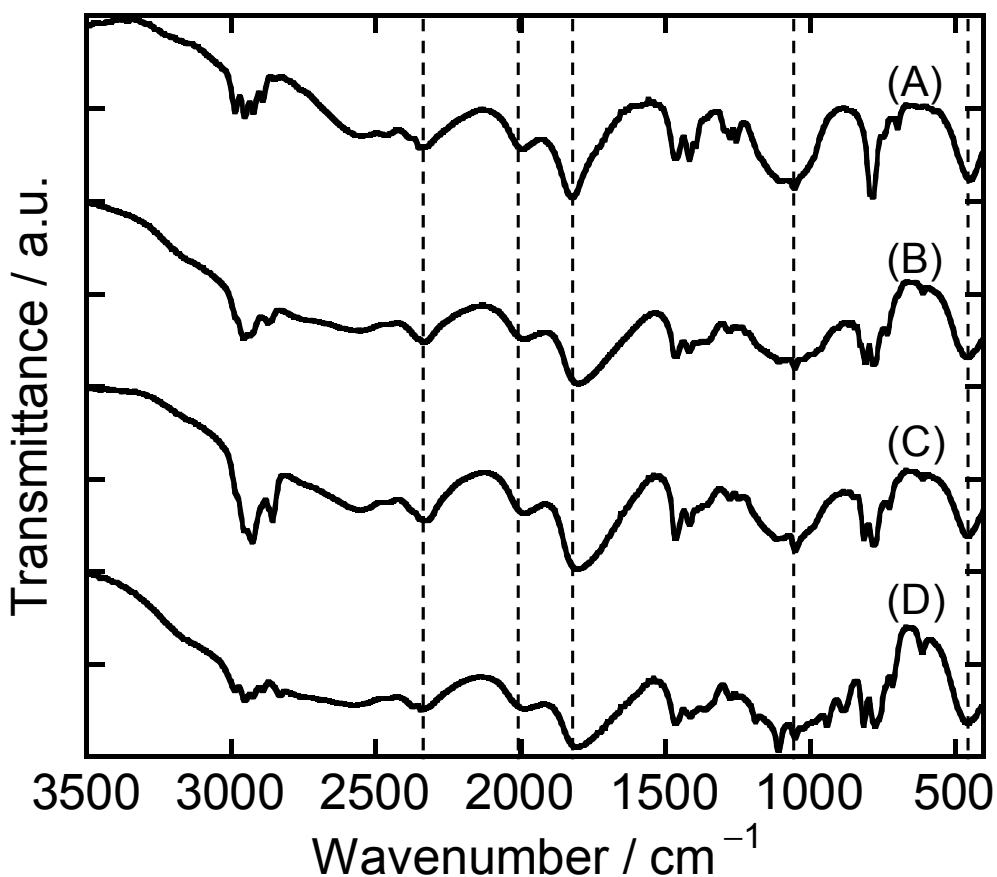


Figure S1. Infrared spectra of (A) $P_{2222}(\text{FH})_2\text{F}$ (supercooled liquid), (B) $P_{2225}(\text{FH})_{2.1}\text{F}$ (liquid), (C) $P_{2228}(\text{FH})_{2.1}\text{F}$ (liquid), and (D) $P_{222(101)}(\text{FH})_{2.1}\text{F}$ (liquid) at 25°C. The dashed lines denote the positions where the absorption bands of $(\text{FH})_2\text{F}^-$. [R. Hagiwara, Y. Nakamori, K. Matsumoto and Y. Ito, *J. Phys. Chem. B*, 2005, **109**, 5445-5449. F. Xu, K. Matsumoto and R. Hagiwara, *Chem.-Eur. J.*, 2010, **16**, 12970-12976.] $(\text{FH})_2\text{F}^-$: $\tilde{\nu} = 2334$ (m), 1997 (m), 1820 (s), 1055 (w), 446 (s) cm^{-1} for $P_{2222}(\text{FH})_2\text{F}$; 2336 (m), 1990 (m), 1801 (s), 1051 (w), 457 (s) cm^{-1} for $P_{2225}(\text{FH})_{2.1}\text{F}$; 2327 (m), 1986 (m), 1804 (s), 1051 (w), 453 (s) cm^{-1} for $P_{2228}(\text{FH})_{2.1}\text{F}$; 2345 (m), 1985 (m), 1804 (s), 1051 (w), 453 (s) cm^{-1} for $P_{222(101)}(\text{FH})_{2.1}\text{F}$. The symbols w, m, and s denote weak, medium, and strong, respectively.

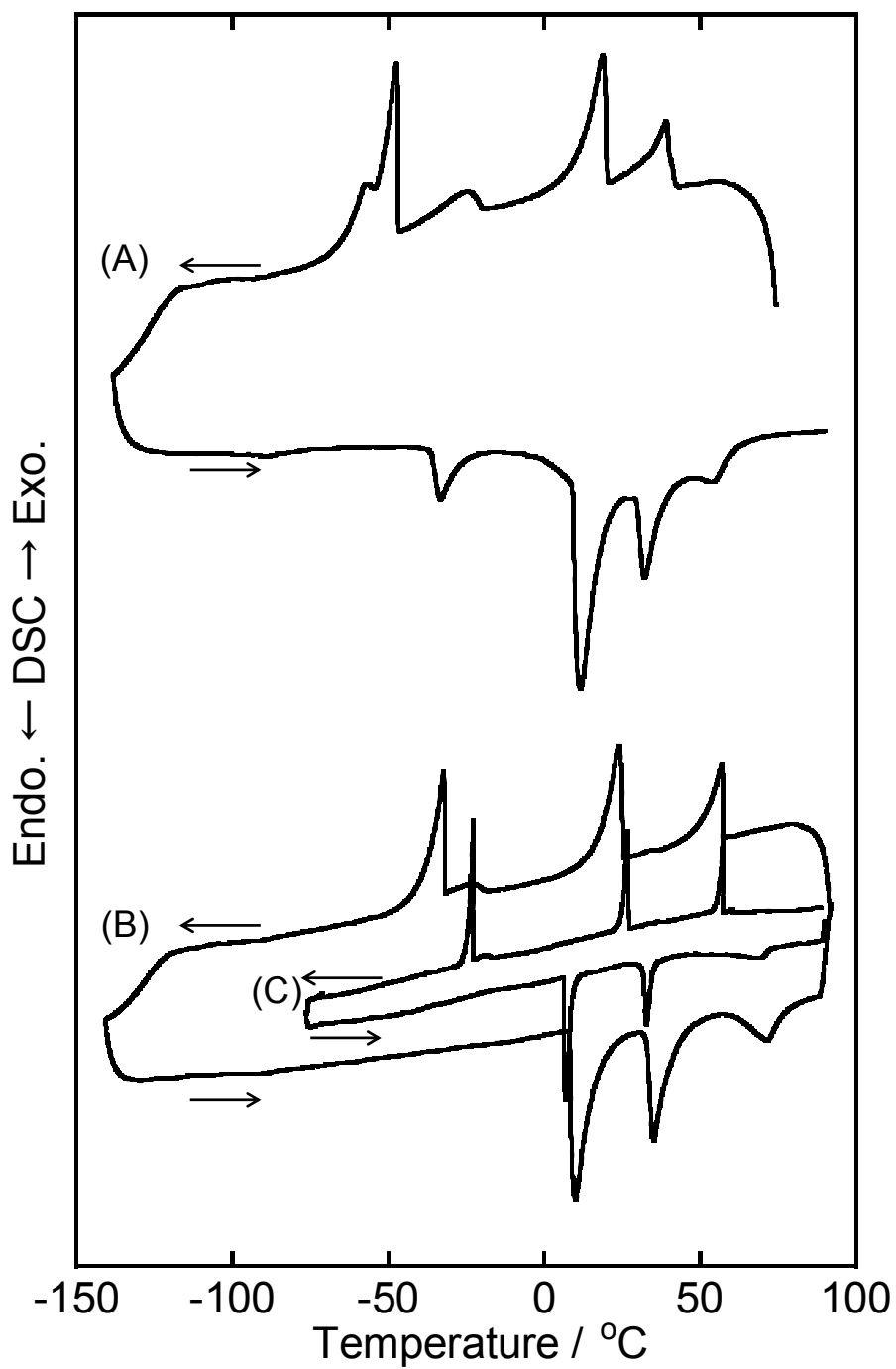


Figure S2. Differential scanning calorimetric curves for (A) $P_{2222}(\text{FH})_{2.2}\text{F}$ (5°C min^{-1}), (B) $P_{2222}(\text{FH})_2\text{F}$ (5°C min^{-1}), and (C) $P_{2222}(\text{FH})_2\text{F}$ (1°C min^{-1}). Scan rates of 1°C min^{-1} and 5°C min^{-1} were used.

Table S2. Viscosities of $P_{222m}(\text{FH})_{2.1}\text{Fs}$ ($m = 5, 8, \text{ and } 101$)

$T / ^\circ\text{C}$	η / cP		
	$P_{2225}(\text{FH})_{2.1}\text{F}$	$P_{2228}(\text{FH})_{2.1}\text{F}$	$P_{222(101)}(\text{FH})_{2.1}\text{F}$
5	72	120	22
15	46	75	16
25	28	47	11
35	20	31	8.6
45	15	22	6.7
55	11	16	5.4
65	8.5	12	4.4

Table S3. Conductivities of $P_{222m}(\text{FH})_{2,1}\text{Fs}$ ($m = 5, 8, \text{ and } 101$)

$T / ^\circ\text{C}$	$\sigma / \text{mS cm}^{-1}$			
	$P_{2222}(\text{FH})_{2,1}\text{F}$	$P_{2225}(\text{FH})_{2,1}\text{F}$	$P_{2228}(\text{FH})_{2,1}\text{F}$	$P_{222(101)}(\text{FH})_{2,1}\text{F}$
5	-	5.87	2.65	26.7
10	-	-	-	-
15	0.0051	8.69	4.11	34.6
20	0.014	-	-	-
25	0.025	12.4	6.10	43.9
30	0.038	-	-	-
35	1.30	17.2	8.60	53.9
40	2.70	-	-	-
45	3.64	24.1	11.6	64.9
50	4.76	-	-	-
55	6.47	30.7	15.2	76.7
60	10.8	-	-	-
65	23.8	38.5	19.4	89.3
70	62.5	-	-	-
75	99.0	-	-	-
80	106.0	-	-	-
85	113.0	-	-	-
90	120.2	-	-	-
95	127.3	-	-	-

Table S4. X-ray powder diffraction data for P₂₂₂₂(FH)₂F at -10°C, 10°C, and 35°C

2θ / deg.	d / Å	Relative intensity
-10°C		
6.45	6.32	100
7.01	5.81	74
7.63	5.34	26
8.08	5.04	49
10.61	3.84	87
11.44	3.57	63
12.80	3.19	45
13.53	3.02	63
14.25	2.87	19
15.33	2.66	35
16.79	2.43	32
17.46	2.34	27
18.65	2.19	22
19.81	2.07	22
21.48	1.91	17
22.50	1.82	20
23.59	1.74	15
10°C		
5.94	6.86	40
6.94	5.87	100
9.23	4.38	20
10.08	4.05	24
12.26	3.33	82
13.70	2.98	16
16.14	2.53	18
17.53	2.33	15
18.86	2.17	15
21.39	1.92	13

35°C		
5.88	6.93	67
6.82	5.97	100
9.05	4.50	18
10.17	4.01	23
11.77	3.47	31
12.24	3.33	29
13.58	3.01	22
15.68	2.61	16

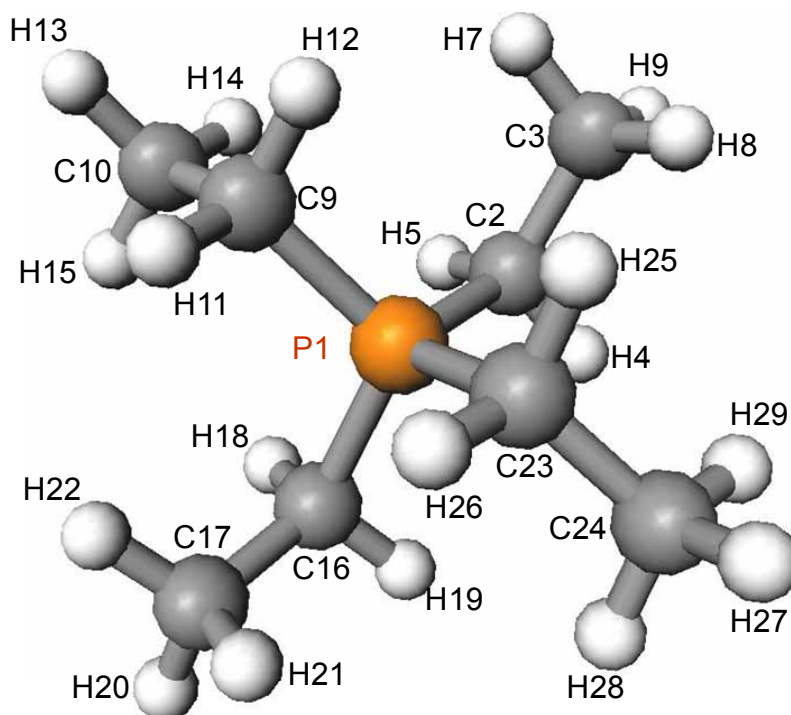


Figure S3. The optimized geometry of P_{2222}^+ (D_{2d}).

Table S5. Calculated geometrical parameters for P_{2222}^+ (D_{2d}) using cc-pVTZ basis set ^{a, b}

	HF	B3LYP	PBE1PBE	MPW1PW91	MP2
P1–C2	1.819	1.826	1.813	1.814	1.808
C2–C3	1.532	1.532	1.524	1.524	1.529
P1–C2–C3	115.4	115.2	114.6	114.9	113.5
C2–P1–C9	110.7	110.4	110.3	110.4	110.0
C2–P1–C16	107.0	107.6	107.8	107.7	108.4

^a Bond lengths and angles are given in Å and deg., respectively. ^b Symbol of atoms are shown in Figure S3.

Table S6. Calculated volumes for optimized P_{2222}^+ (D_{2d}) using cc-pVTZ basis set ^a

HF	B3LYP	PBE1PBE	MPW1PW91	MP2
228	236	231	224	231

^a Volumes are given in Å³.

Table S7. Calculated frequencies and intensities for $P_{2222}^+ (D_{2d})$ using cc-pVTZ basis set ^a

Mode*	Representation	HF	B3LYP	PBE1PBE	MPW1PW91	MP2
1	B ₁	62[0]	54[0]	46[0]	50[0]	35[0]
2,3	E	79[<1]	70[<1]	67[<1]	69[<1]	65[<1]
4	A ₂	103[0]	98[0]	98[0]	97[0]	100[0]
5	A ₁	122[0]	110[0]	111[0]	110[0]	115[0]
6	B ₂	178[2]	161[1]	160[1]	159[1]	164[1]
7,8	E	191[<1]	171[<1]	173[<1]	171[<1]	184[<1]
9	B ₁	207[0]	183[0]	188[0]	185[0]	204[0]
10	A ₂	260[0]	232[0]	236[0]	233[0]	253[0]
11,12	E	263[<1]	240[0]	241[<1]	239[<1]	253[<1]
13	B ₁	271[0]	255[0]	256[0]	256[0]	259[0]
14	A ₁	343[0]	320[0]	322[0]	322[0]	324[0]
15	B ₂	345[2]	321[2]	326[2]	325[2]	329[2]
16,17	E	410[5]	383[3]	379[3]	380[3]	378[3]
18	A ₁	623[0]	584[0]	605[0]	602[0]	616[0]
19	A ₂	740[0]	691[0]	679[0]	682[0]	683[0]
20,21	E	724[1]	675[1]	696[<1]	693[<1]	712[<1]
22	B ₁	820[0]	765[0]	758[0]	760[0]	763[0]
23,24	E	832[36]	777[40]	776[45]	777[45]	785[42]
25	B ₂	830[28]	768[32]	789[35]	787[35]	803[32]
26	A ₂	1058[0]	986[0]	975[0]	980[0]	982[0]
27,28	E	1040[4]	981[<1]	987[2]	991[1]	993[1]
29	A ₁	1043[0]	984[0]	997[0]	998[0]	1001[0]
30	B ₂	1056[<1]	995[<1]	1014[<1]	1014[<1]	1019[<1]
31,32	E	1091[3]	1014[5]	1020[<1]	1021[1]	1024[1]
33	B ₁	1139[0]	1056[0]	1047[0]	1052[0]	1053[0]
34,35	E	1150[50]	1065[42]	1063[47]	1066[47]	1067[48]
36	B ₂	1158[1]	1073[<1]	1079[<1]	1080[<1]	1081[1]
37	A ₁	1159[0]	1076[0]	1086[0]	1086[0]	1089[0]
38	A ₂	1364[0]	1262[0]	1254[0]	1260[0]	1261[0]
39	B ₁	1372[0]	1270[0]	1262[0]	1268[0]	1270[0]

40,41	E	1380[1]	1275[2]	1267[1]	1273[2]	1273[1]
42	B ₂	1421[5]	1301[2]	1292[1]	1298[1]	1293[1]
43,44	E	1424[2]	1303[1]	1297[3]	1302[3]	1300[4]
45	A ₁	1444[0]	1322[0]	1313[0]	1319[0]	1313[0]
46	A ₁	1548[0]	1432[0]	1418[0]	1426[0]	1424[0]
47,48	E	1548[<1]	1430[3]	1419[5]	1426[4]	1425[3]
49	B ₂	1550[1]	1429[1]	1419[2]	1426[1]	1425[2]
50,51	E	1573[1]	1454[1]	1439[<1]	1447[<1]	1452[<1]
52	A ₁	1585[0]	1464[0]	1452[0]	1459[0]	1464[0]
53	B ₂	1587[48]	1469[54]	1455[67]	1463[64]	1466[60]
54	B ₂	1613[5]	1498[7]	1488[6]	1496[6]	1510[4]
55,56	E	1616[4]	1501[5]	1491[6]	1499[6]	1513[6]
57	A ₁	1621[0]	1507[0]	1497[0]	1505[0]	1518[0]
58	A ₂	1621[0]	1505[0]	1496[0]	1503[0]	1519[0]
59	B ₁	1623[0]	1508[0]	1499[0]	1506[0]	1522[0]
60,61	E	1624[17]	1508[18]	1500[20]	1507[20]	1523[19]
62,63	E	3181[10]	3044[2]	3061[1]	3068[2]	3086[1]
64	B ₂	3180[13]	3045[4]	3062[7]	3069[6]	3086[8]
65	A ₁	3181[0]	3048[0]	3064[0]	3070[0]	3087[0]
66	A ₁	3191[0]	3050[0]	3066[0]	3073[0]	3089[0]
67,68	E	3185[11]	3050[13]	3066[12]	3073[12]	3091[10]
69	B ₂	3192[7]	3054[8]	3070[5]	3076[6]	3095[4]
70	B ₁	3219[0]	3079[0]	3104[0]	3109[0]	3138[0]
71	A ₂	3224[0]	3082[0]	3106[0]	3111[0]	3141[0]
72,73	E	3226[1]	3084[<1]	3108[1]	3113[<1]	3142[1]
74	A ₂	3246[0]	3115[0]	3141[0]	3147[0]	3178[0]
75,76	E	3251[43]	3117[21]	3142[16]	3148[17]	3179[12]
77	B ₁	3253[0]	3118[0]	3143[0]	3149[0]	3180[0]
78	A ₁	3255[0]	3118[0]	3145[0]	3150[0]	3185[0]
79,80	E	3255[1]	3118[1]	3146[<1]	3151[<1]	3186[<1]
81	B ₂	3255[28]	3118[12]	3146[7]	3151[8]	3186[4]

^a Frequencies are given in cm⁻¹. Values in square brackets are IR intensities (km mol⁻¹). * Modes correspond to the extracted Gaussian result files shown at the end of SI.

* Calculated frequency and vibrational modes of P_{2222}^+ in Gaussian output file at MP2/cc-pVTZ

level.

	1			2			3			
	B1			E			E			
Frequencies	--	35.0753			64.7721			64.7722		
Red. masses	--	2.5065			2.4271			2.4271		
Frc consts	--	0.0018			0.0060			0.0060		
IR Inten	--	0.0000			0.3816			0.3816		
Atom AN	X	Y	Z	X	Y	Z	X	Y	Z	
1	15	0.00	0.00	0.00	-0.02	-0.06	0.00	-0.06	0.02	0.00
2	6	0.01	0.00	0.00	-0.01	-0.06	0.00	-0.03	0.02	0.00
3	6	0.18	0.00	0.00	0.07	-0.07	-0.01	0.21	0.02	0.00
4	1	-0.06	0.07	-0.08	-0.04	-0.03	-0.03	-0.12	0.11	-0.11
5	1	-0.06	-0.07	0.08	-0.04	-0.09	0.04	-0.12	-0.08	0.11
6	1	0.17	0.00	0.00	0.05	-0.06	-0.02	0.16	0.02	0.01
7	1	0.26	-0.06	0.10	0.11	-0.10	0.04	0.33	-0.05	0.16
8	1	0.26	0.06	-0.10	0.11	-0.05	-0.06	0.33	0.10	-0.15
9	6	0.00	0.01	0.00	-0.02	-0.03	0.00	-0.06	0.01	0.00
10	6	0.00	0.18	0.00	-0.02	0.21	0.00	-0.07	-0.07	0.01
11	1	0.07	-0.06	0.08	0.08	-0.12	0.11	-0.09	0.04	-0.04
12	1	-0.07	-0.06	-0.08	-0.11	-0.12	-0.11	-0.03	0.04	0.03
13	1	0.00	0.17	0.00	-0.02	0.16	0.01	-0.06	-0.05	0.02
14	1	-0.06	0.26	-0.10	-0.10	0.33	-0.15	-0.05	-0.11	0.06
15	1	0.06	0.26	0.10	0.05	0.33	0.16	-0.10	-0.11	-0.04
16	6	-0.01	0.00	0.00	-0.01	-0.06	0.00	-0.03	0.02	0.00
17	6	-0.18	0.00	0.00	0.07	-0.07	0.01	0.21	0.02	0.00
18	1	0.06	-0.07	-0.08	-0.04	-0.03	0.03	-0.12	0.11	0.11
19	1	0.06	0.07	0.08	-0.04	-0.09	-0.04	-0.12	-0.08	-0.11
20	1	-0.17	0.00	0.00	0.05	-0.06	0.02	0.16	0.02	-0.01
21	1	-0.26	0.06	0.10	0.11	-0.10	-0.04	0.33	-0.05	-0.16
22	1	-0.26	-0.06	-0.10	0.11	-0.05	0.06	0.33	0.10	0.15
23	6	0.00	-0.01	0.00	-0.02	-0.03	0.00	-0.06	0.01	0.00
24	6	0.00	-0.18	0.00	-0.02	0.21	0.00	-0.07	-0.07	-0.01
25	1	-0.07	0.06	0.08	0.08	-0.12	-0.11	-0.09	0.04	0.04
26	1	0.07	0.06	-0.08	-0.11	-0.12	0.11	-0.03	0.04	-0.03
27	1	0.00	-0.17	0.00	-0.02	0.16	-0.01	-0.06	-0.05	-0.02
28	1	0.06	-0.26	-0.10	-0.10	0.33	0.15	-0.05	-0.11	-0.06
29	1	-0.06	-0.26	0.10	0.05	0.33	-0.16	-0.10	-0.11	0.04

4				5			6			
A2				A1			B2			
Frequencies	--	99.9810			114.8811			163.8619		
Red. masses	--	1.3940			3.0021			3.1220		
Frc consts	--	0.0082			0.0233			0.0494		
IR Inten	--	0.0000			0.0000			1.4708		
Atom AN		X	Y	Z	X	Y	Z	X	Y	Z
1	15	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.17
2	6	-0.08	0.00	0.00	0.00	-0.05	0.07	0.00	0.07	0.06
3	6	0.04	0.00	0.00	0.00	0.02	0.19	0.00	-0.04	-0.14
4	1	-0.17	0.02	-0.11	0.00	-0.11	0.06	0.00	0.16	0.07
5	1	-0.17	-0.02	0.11	0.00	-0.11	0.06	0.00	0.16	0.07
6	1	-0.14	0.00	0.00	0.00	-0.04	0.28	0.00	0.07	-0.26
7	1	0.18	0.03	0.20	0.00	0.08	0.20	0.00	-0.14	-0.15
8	1	0.18	-0.03	-0.20	0.00	0.08	0.20	0.00	-0.14	-0.15
9	6	0.00	0.08	0.00	-0.05	0.00	-0.07	-0.07	0.00	0.06
10	6	0.00	-0.04	0.00	0.02	0.00	-0.19	0.04	0.00	-0.14
11	1	-0.02	0.17	-0.11	-0.11	0.00	-0.06	-0.16	0.00	0.07
12	1	0.02	0.17	0.11	-0.11	0.00	-0.06	-0.16	0.00	0.07
13	1	0.00	0.14	0.00	-0.04	0.00	-0.28	-0.07	0.00	-0.26
14	1	-0.03	-0.18	0.20	0.08	0.00	-0.20	0.14	0.00	-0.15
15	1	0.03	-0.18	-0.20	0.08	0.00	-0.20	0.14	0.00	-0.15
16	6	0.08	0.00	0.00	0.00	0.05	0.07	0.00	-0.07	0.06
17	6	-0.04	0.00	0.00	0.00	-0.02	0.19	0.00	0.04	-0.14
18	1	0.17	-0.02	-0.11	0.00	0.11	0.06	0.00	-0.16	0.07
19	1	0.17	0.02	0.11	0.00	0.11	0.06	0.00	-0.16	0.07
20	1	0.14	0.00	0.00	0.00	0.04	0.28	0.00	-0.07	-0.26
21	1	-0.18	-0.03	0.20	0.00	-0.08	0.20	0.00	0.14	-0.15
22	1	-0.18	0.03	-0.20	0.00	-0.08	0.20	0.00	0.14	-0.15
23	6	0.00	-0.08	0.00	0.05	0.00	-0.07	0.07	0.00	0.06
24	6	0.00	0.04	0.00	-0.02	0.00	-0.19	-0.04	0.00	-0.14
25	1	0.02	-0.17	-0.11	0.11	0.00	-0.06	0.16	0.00	0.07
26	1	-0.02	-0.17	0.11	0.11	0.00	-0.06	0.16	0.00	0.07
27	1	0.00	-0.14	0.00	0.04	0.00	-0.28	0.07	0.00	-0.26
28	1	0.03	0.18	0.20	-0.08	0.00	-0.20	-0.14	0.00	-0.15
29	1	-0.03	0.18	-0.20	-0.08	0.00	-0.20	-0.14	0.00	-0.15

	7			8			9		
	E			E			B1		
Frequencies	--	184.3657			184.3657			204.4023	
Red. masses	--	1.3425			1.3425			1.1917	
Frc consts	--	0.0269			0.0269			0.0293	
IR Inten	--	0.0544			0.0544			0.0000	
Atom AN	X	Y	Z	X	Y	Z	X	Y	Z
1	15	0.00	-0.03	0.00	-0.03	0.00	0.00	0.00	0.00
2	6	-0.01	-0.02	-0.01	0.07	0.00	0.00	-0.06	0.00
3	6	-0.01	-0.05	-0.06	0.03	-0.01	-0.01	-0.03	0.00
4	1	-0.02	0.00	-0.02	0.14	0.03	0.10	-0.11	-0.02
5	1	-0.02	0.01	0.01	0.14	-0.03	-0.10	-0.11	0.02
6	1	-0.06	-0.02	-0.10	0.38	0.00	-0.02	-0.28	0.00
7	1	0.03	-0.06	-0.02	-0.15	-0.14	-0.29	0.11	0.09
8	1	0.03	-0.10	-0.11	-0.15	0.12	0.27	0.11	-0.09
9	6	0.00	0.07	0.00	-0.02	0.01	0.01	0.00	-0.06
10	6	0.01	0.03	-0.01	-0.05	0.01	0.06	0.00	-0.03
11	1	0.03	0.14	-0.10	0.01	0.02	-0.01	-0.02	-0.11
12	1	-0.03	0.14	0.10	0.00	0.02	0.02	0.02	-0.11
13	1	0.00	0.38	-0.02	-0.02	0.06	0.10	0.00	-0.28
14	1	-0.12	-0.15	0.27	-0.10	-0.03	0.11	0.09	0.11
15	1	0.14	-0.15	-0.29	-0.06	-0.03	0.02	-0.09	0.11
16	6	-0.01	-0.02	0.01	0.07	0.00	0.00	0.06	0.00
17	6	-0.01	-0.05	0.06	0.03	-0.01	0.01	0.03	0.00
18	1	-0.02	0.00	0.02	0.14	0.03	-0.10	0.11	0.02
19	1	-0.02	0.01	-0.01	0.14	-0.03	0.10	0.11	-0.02
20	1	-0.06	-0.02	0.10	0.38	0.00	0.02	0.28	0.00
21	1	0.03	-0.06	0.02	-0.15	-0.14	0.29	-0.11	-0.09
22	1	0.03	-0.10	0.11	-0.15	0.12	-0.27	-0.11	0.09
23	6	0.00	0.07	0.00	-0.02	0.01	-0.01	0.00	0.06
24	6	0.01	0.03	0.01	-0.05	0.01	-0.06	0.00	0.03
25	1	0.03	0.14	0.10	0.01	0.02	0.01	0.02	0.11
26	1	-0.03	0.14	-0.10	0.00	0.02	-0.02	-0.02	0.11
27	1	0.00	0.38	0.02	-0.02	0.06	-0.10	0.00	0.28
28	1	-0.12	-0.15	-0.27	-0.10	-0.03	-0.11	-0.09	-0.11
29	1	0.14	-0.15	0.29	-0.06	-0.03	-0.02	0.09	-0.11

		10			11			12		
		A2			E			E		
Frequencies	--	252.5025			252.5641			252.5641		
Red. masses	--	1.2990			1.6590			1.6590		
Frc consts	--	0.0488			0.0623			0.0623		
IR Inten	--	0.0000			0.0060			0.0060		
Atom AN		X	Y	Z	X	Y	Z	X	Y	Z
1	15	0.00	0.00	0.00	0.01	-0.01	0.00	-0.01	-0.01	0.00
2	6	-0.08	0.00	0.00	0.09	0.02	-0.03	-0.08	0.02	-0.03
3	6	0.02	0.00	0.00	-0.01	0.06	0.04	0.01	0.07	0.05
4	1	-0.12	0.02	-0.05	0.15	-0.02	0.05	-0.13	0.01	-0.09
5	1	-0.12	-0.02	0.05	0.14	0.02	-0.10	-0.14	-0.02	0.04
6	1	0.31	0.00	0.00	-0.27	0.02	0.09	0.24	0.02	0.11
7	1	-0.08	-0.16	-0.16	0.07	0.24	0.19	-0.06	-0.02	-0.07
8	1	-0.08	0.16	0.16	0.07	-0.05	-0.09	-0.07	0.24	0.18
9	6	0.00	0.08	0.00	-0.02	-0.08	-0.03	0.02	-0.09	0.03
10	6	0.00	-0.02	0.00	-0.07	0.01	0.05	0.06	0.01	-0.04
11	1	-0.02	0.12	-0.05	0.02	-0.14	0.04	0.02	-0.14	0.10
12	1	0.02	0.12	0.05	-0.01	-0.13	-0.09	-0.02	-0.15	-0.05
13	1	0.00	-0.31	0.00	-0.02	0.24	0.11	0.02	0.27	-0.09
14	1	0.16	0.08	-0.16	-0.24	-0.07	0.18	-0.05	-0.07	0.09
15	1	-0.16	0.08	0.16	0.02	-0.06	-0.07	0.24	-0.07	-0.19
16	6	0.08	0.00	0.00	0.09	0.02	0.03	-0.08	0.02	0.03
17	6	-0.02	0.00	0.00	-0.01	0.06	-0.04	0.01	0.07	-0.05
18	1	0.12	-0.02	-0.05	0.15	-0.02	-0.05	-0.13	0.01	0.09
19	1	0.12	0.02	0.05	0.14	0.02	0.10	-0.14	-0.02	-0.04
20	1	-0.31	0.00	0.00	-0.27	0.02	-0.09	0.24	0.02	-0.11
21	1	0.08	0.16	-0.16	0.07	0.24	-0.19	-0.06	-0.02	0.07
22	1	0.08	-0.16	0.16	0.07	-0.05	0.09	-0.07	0.24	-0.18
23	6	0.00	-0.08	0.00	-0.02	-0.08	0.03	0.02	-0.09	-0.03
24	6	0.00	0.02	0.00	-0.07	0.01	-0.05	0.06	0.01	0.04
25	1	0.02	-0.12	-0.05	0.02	-0.14	-0.04	0.02	-0.14	-0.10
26	1	-0.02	-0.12	0.05	-0.01	-0.13	0.09	-0.02	-0.15	0.05
27	1	0.00	0.31	0.00	-0.02	0.24	-0.11	0.02	0.27	0.09
28	1	-0.16	-0.08	-0.16	-0.24	-0.07	-0.18	-0.05	-0.07	-0.09
29	1	0.16	-0.08	0.16	0.02	-0.06	0.07	0.24	-0.07	0.19

		13			14			15		
		B1			A1			B2		
Frequencies		258.5844			323.7793			328.5200		
Red. masses		1.5614			3.2743			3.4651		
Frc consts		0.0615			0.2022			0.2203		
IR Inten		0.0000			0.0000			1.6855		
Atom	AN	X	Y	Z	X	Y	Z	X	Y	Z
1	15	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	-0.05
2	6	0.11	0.00	0.00	0.00	0.11	-0.07	0.00	-0.13	0.04
3	6	0.01	0.00	0.00	0.00	0.19	0.01	0.00	-0.19	-0.01
4	1	0.21	0.01	0.13	0.00	0.12	-0.07	-0.01	-0.15	0.03
5	1	0.21	-0.01	-0.13	0.00	0.12	-0.07	0.01	-0.15	0.03
6	1	-0.21	0.00	0.00	0.00	0.10	0.12	0.00	-0.12	-0.09
7	1	0.07	0.13	0.11	0.00	0.26	0.03	0.00	-0.25	-0.02
8	1	0.07	-0.13	-0.11	0.00	0.26	0.03	0.00	-0.25	-0.02
9	6	0.00	0.11	0.00	0.11	0.00	0.07	0.13	0.00	0.04
10	6	0.00	0.01	0.00	0.19	0.00	-0.01	0.19	0.00	-0.01
11	1	0.01	0.21	-0.13	0.12	0.00	0.07	0.15	0.01	0.03
12	1	-0.01	0.21	0.13	0.12	0.00	0.07	0.15	-0.01	0.03
13	1	0.00	-0.21	0.00	0.10	0.00	-0.12	0.12	0.00	-0.09
14	1	0.13	0.07	-0.11	0.26	0.00	-0.03	0.25	0.00	-0.02
15	1	-0.13	0.07	0.11	0.26	0.00	-0.03	0.25	0.00	-0.02
16	6	-0.11	0.00	0.00	0.00	-0.11	-0.07	0.00	0.13	0.04
17	6	-0.01	0.00	0.00	0.00	-0.19	0.01	0.00	0.19	-0.01
18	1	-0.21	-0.01	0.13	0.00	-0.12	-0.07	0.01	0.15	0.03
19	1	-0.21	0.01	-0.13	0.00	-0.12	-0.07	-0.01	0.15	0.03
20	1	0.21	0.00	0.00	0.00	-0.10	0.12	0.00	0.12	-0.09
21	1	-0.07	-0.13	0.11	0.00	-0.26	0.03	0.00	0.25	-0.02
22	1	-0.07	0.13	-0.11	0.00	-0.26	0.03	0.00	0.25	-0.02
23	6	0.00	-0.11	0.00	-0.11	0.00	0.07	-0.13	0.00	0.04
24	6	0.00	-0.01	0.00	-0.19	0.00	-0.01	-0.19	0.00	-0.01
25	1	-0.01	-0.21	-0.13	-0.12	0.00	0.07	-0.15	-0.01	0.03
26	1	0.01	-0.21	0.13	-0.12	0.00	0.07	-0.15	0.01	0.03
27	1	0.00	0.21	0.00	-0.10	0.00	-0.12	-0.12	0.00	-0.09
28	1	-0.13	-0.07	-0.11	-0.26	0.00	-0.03	-0.25	0.00	-0.02
29	1	0.13	-0.07	0.11	-0.26	0.00	-0.03	-0.25	0.00	-0.02

		16			17			18		
		E			E			A1		
Frequencies	--	378.0924			378.0924			616.4387		
Red. masses	--	2.4923			2.4923			3.1275		
Frc consts	--	0.2099			0.2099			0.7002		
IR Inten	--	3.1803			3.1803			0.0000		
Atom AN		X	Y	Z	X	Y	Z	X	Y	Z
1	15	0.08	0.12	0.00	0.12	-0.08	0.00	0.00	0.00	0.00
2	6	-0.02	0.02	0.14	-0.04	-0.01	-0.09	0.00	0.12	0.18
3	6	-0.01	-0.08	-0.01	-0.01	0.05	0.01	0.00	0.03	0.01
4	1	-0.12	-0.02	0.00	-0.18	-0.09	-0.27	-0.01	0.13	0.17
5	1	-0.10	0.07	0.24	-0.19	0.06	0.13	0.01	0.13	0.17
6	1	0.06	0.05	-0.17	0.10	-0.03	0.10	0.00	0.20	-0.20
7	1	-0.04	-0.22	-0.08	-0.05	0.06	-0.05	-0.01	-0.12	-0.03
8	1	-0.03	-0.16	0.01	-0.06	0.17	0.09	0.01	-0.12	-0.03
9	6	0.01	-0.04	-0.09	0.02	0.02	-0.14	0.12	0.00	-0.18
10	6	-0.05	-0.01	0.01	-0.08	0.01	0.01	0.03	0.00	-0.01
11	1	-0.06	-0.19	0.13	0.07	0.10	-0.24	0.13	-0.01	-0.17
12	1	0.09	-0.18	-0.27	-0.02	0.12	0.00	0.13	0.01	-0.17
13	1	0.03	0.10	0.10	0.05	-0.06	0.17	0.20	0.00	0.20
14	1	-0.17	-0.06	0.09	-0.16	0.03	-0.01	-0.12	-0.01	0.03
15	1	-0.06	-0.05	-0.05	-0.22	0.04	0.08	-0.12	0.01	0.03
16	6	-0.02	0.02	-0.14	-0.04	-0.01	0.09	0.00	-0.12	0.18
17	6	-0.01	-0.08	0.01	-0.01	0.05	-0.01	0.00	-0.03	0.01
18	1	-0.12	-0.02	0.00	-0.18	-0.09	0.27	0.01	-0.13	0.17
19	1	-0.10	0.07	-0.24	-0.19	0.06	-0.13	-0.01	-0.13	0.17
20	1	0.06	0.05	0.17	0.10	-0.03	-0.10	0.00	-0.20	-0.20
21	1	-0.04	-0.22	0.08	-0.05	0.06	0.05	0.01	0.12	-0.03
22	1	-0.03	-0.16	-0.01	-0.06	0.17	-0.09	-0.01	0.12	-0.03
23	6	0.01	-0.04	0.09	0.02	0.02	0.14	-0.12	0.00	-0.18
24	6	-0.05	-0.01	-0.01	-0.08	0.01	-0.01	-0.03	0.00	-0.01
25	1	-0.06	-0.19	-0.13	0.07	0.10	0.24	-0.13	0.01	-0.17
26	1	0.09	-0.18	0.27	-0.02	0.12	0.00	-0.13	-0.01	-0.17
27	1	0.03	0.10	-0.10	0.05	-0.06	-0.17	-0.20	0.00	0.20
28	1	-0.17	-0.06	-0.09	-0.16	0.03	0.01	0.12	0.01	0.03
29	1	-0.06	-0.05	0.05	-0.22	0.04	-0.08	0.12	-0.01	0.03

19				20			21			
A2				E			E			
Frequencies	--	682.9121			711.6017			711.6017		
Red. masses	--	1.1734			2.0999			2.0999		
Frc consts	--	0.3224			0.6265			0.6265		
IR Inten	--	0.0000			0.0521			0.0521		
Atom AN		X	Y	Z	X	Y	Z	X	Y	Z
1	15	0.00	0.00	0.00	0.04	0.09	0.00	0.09	-0.04	0.00
2	6	-0.06	0.00	0.00	0.03	-0.08	-0.13	0.07	0.04	0.06
3	6	0.00	0.00	0.00	0.00	-0.05	0.00	0.01	0.02	0.00
4	1	0.15	0.01	0.27	-0.06	-0.11	-0.26	-0.14	0.05	-0.22
5	1	0.15	-0.01	-0.27	-0.07	-0.10	0.01	-0.13	0.06	0.34
6	1	0.05	0.00	0.00	-0.03	-0.17	0.15	-0.06	0.08	-0.07
7	1	0.07	-0.11	0.09	-0.03	0.12	-0.02	-0.08	0.10	-0.11
8	1	0.07	0.11	-0.09	-0.04	0.00	0.07	-0.07	-0.16	0.09
9	6	0.00	0.06	0.00	-0.04	0.07	0.06	-0.08	-0.03	0.13
10	6	0.00	0.00	0.00	-0.02	0.01	0.00	-0.05	0.00	0.00
11	1	-0.01	-0.15	0.27	-0.06	-0.13	0.34	-0.10	0.07	-0.01
12	1	0.01	-0.15	-0.27	-0.05	-0.14	-0.22	-0.11	0.06	0.26
13	1	0.00	-0.05	0.00	-0.08	-0.06	-0.07	-0.17	0.03	-0.15
14	1	0.11	-0.07	0.09	0.16	-0.07	0.09	0.00	0.04	-0.07
15	1	-0.11	-0.07	-0.09	-0.10	-0.08	-0.11	0.12	0.03	0.02
16	6	0.06	0.00	0.00	0.03	-0.08	0.13	0.07	0.04	-0.06
17	6	0.00	0.00	0.00	0.00	-0.05	0.00	0.01	0.02	0.00
18	1	-0.15	-0.01	0.27	-0.06	-0.11	0.26	-0.14	0.05	0.22
19	1	-0.15	0.01	-0.27	-0.07	-0.10	-0.01	-0.13	0.06	-0.34
20	1	-0.05	0.00	0.00	-0.03	-0.17	-0.15	-0.06	0.08	0.07
21	1	-0.07	0.11	0.09	-0.03	0.12	0.02	-0.08	0.10	0.11
22	1	-0.07	-0.11	-0.09	-0.04	0.00	-0.07	-0.07	-0.16	-0.09
23	6	0.00	-0.06	0.00	-0.04	0.07	-0.06	-0.08	-0.03	-0.13
24	6	0.00	0.00	0.00	-0.02	0.01	0.00	-0.05	0.00	0.00
25	1	0.01	0.15	0.27	-0.06	-0.13	-0.34	-0.10	0.07	0.01
26	1	-0.01	0.15	-0.27	-0.05	-0.14	0.22	-0.11	0.06	-0.26
27	1	0.00	0.05	0.00	-0.08	-0.06	0.07	-0.17	0.03	0.15
28	1	-0.11	0.07	0.09	0.16	-0.07	-0.09	0.00	0.04	0.07
29	1	0.11	0.07	-0.09	-0.10	-0.08	0.11	0.12	0.03	-0.02

	22			23			24			
	B1			E			E			
Frequencies	--	763.1058			784.5704			784.5704		
Red. masses	--	1.2050			1.7316			1.7316		
Frc consts	--	0.4134			0.6280			0.6280		
IR Inten	--	0.0000			42.1472			42.1472		
Atom AN	X	Y	Z	X	Y	Z	X	Y	Z	
1	15	0.00	0.00	0.00	0.10	-0.07	0.00	0.07	0.10	0.00
2	6	0.07	0.00	0.00	-0.06	0.02	0.04	-0.04	-0.03	-0.05
3	6	0.01	0.00	0.00	-0.02	0.03	0.00	-0.01	-0.04	0.00
4	1	-0.12	0.06	-0.24	0.13	-0.06	0.28	0.09	-0.16	0.11
5	1	-0.12	-0.06	0.24	0.13	0.17	-0.20	0.09	0.00	-0.22
6	1	-0.10	0.00	0.00	0.11	0.06	-0.04	0.08	-0.08	0.05
7	1	-0.08	0.15	-0.11	0.09	-0.17	0.11	0.06	-0.13	0.10
8	1	-0.08	-0.15	0.11	0.09	0.18	-0.13	0.06	0.12	-0.07
9	6	0.00	0.07	0.00	-0.03	0.04	0.05	-0.02	-0.06	0.04
10	6	0.00	0.01	0.00	-0.04	0.01	0.00	-0.03	-0.02	0.00
11	1	0.06	-0.12	0.24	0.00	-0.09	0.22	-0.17	0.13	-0.20
12	1	-0.06	-0.12	-0.24	-0.16	-0.09	-0.11	0.06	0.13	0.28
13	1	0.00	-0.10	0.00	-0.08	-0.08	-0.05	-0.06	0.11	-0.04
14	1	0.15	-0.08	0.11	0.12	-0.06	0.07	-0.18	0.09	-0.13
15	1	-0.15	-0.08	-0.11	-0.13	-0.06	-0.10	0.17	0.09	0.11
16	6	-0.07	0.00	0.00	-0.06	0.02	-0.04	-0.04	-0.03	0.05
17	6	-0.01	0.00	0.00	-0.02	0.03	0.00	-0.01	-0.04	0.00
18	1	0.12	-0.06	-0.24	0.13	-0.06	-0.28	0.09	-0.16	-0.11
19	1	0.12	0.06	0.24	0.13	0.17	0.20	0.09	0.00	0.22
20	1	0.10	0.00	0.00	0.11	0.06	0.04	0.08	-0.08	-0.05
21	1	0.08	-0.15	-0.11	0.09	-0.17	-0.11	0.06	-0.13	-0.10
22	1	0.08	0.15	0.11	0.09	0.18	0.13	0.06	0.12	0.07
23	6	0.00	-0.07	0.00	-0.03	0.04	-0.05	-0.02	-0.06	-0.04
24	6	0.00	-0.01	0.00	-0.04	0.01	0.00	-0.03	-0.02	0.00
25	1	-0.06	0.12	0.24	0.00	-0.09	-0.22	-0.17	0.13	0.20
26	1	0.06	0.12	-0.24	-0.16	-0.09	0.11	0.06	0.13	-0.28
27	1	0.00	0.10	0.00	-0.08	-0.08	0.05	-0.06	0.11	0.04
28	1	-0.15	0.08	0.11	0.12	-0.06	-0.07	-0.18	0.09	0.13
29	1	0.15	0.08	-0.11	-0.13	-0.06	0.10	0.17	0.09	-0.11

25				26			27		
B2				A2			E		
Frequencies	802.5151			981.5785			992.9760		
Red. masses	3.3757			1.1275			1.2744		
Frc consts	1.2809			0.6401			0.7404		
IR Inten	32.0408			0.0000			0.8588		
Atom AN	X	Y	Z	X	Y	Z	X	Y	Z
1 15	0.00	0.00	0.21	0.00	0.00	0.00	-0.02	-0.01	0.00
2 6	0.00	-0.07	-0.13	-0.03	0.00	0.00	0.01	0.02	0.00
3 6	0.00	-0.05	-0.02	0.04	0.00	0.00	-0.01	-0.03	-0.01
4 1	0.01	0.00	-0.10	0.01	0.25	0.08	-0.01	0.06	-0.02
5 1	-0.01	0.00	-0.10	0.01	-0.25	-0.08	0.00	0.18	0.04
6 1	0.00	-0.28	0.26	-0.12	0.00	0.00	0.03	-0.12	0.10
7 1	0.02	0.14	0.04	-0.07	0.17	-0.12	0.03	0.01	0.06
8 1	-0.02	0.14	0.04	-0.07	-0.17	0.12	0.01	0.11	-0.01
9 6	0.07	0.00	-0.13	0.00	0.03	0.00	0.05	0.00	-0.01
10 6	0.05	0.00	-0.02	0.00	-0.04	0.00	-0.08	0.00	0.02
11 1	0.00	-0.01	-0.10	-0.25	-0.01	0.08	0.28	-0.01	-0.01
12 1	0.00	0.01	-0.10	0.25	-0.01	-0.08	0.33	0.00	-0.04
13 1	0.28	0.00	0.26	0.00	0.12	0.00	-0.30	0.01	-0.26
14 1	-0.14	-0.02	0.04	-0.17	0.07	-0.12	0.13	0.04	-0.08
15 1	-0.14	0.02	0.04	0.17	0.07	0.12	0.17	-0.02	-0.06
16 6	0.00	0.07	-0.13	0.03	0.00	0.00	0.01	0.02	0.00
17 6	0.00	0.05	-0.02	-0.04	0.00	0.00	-0.01	-0.03	0.01
18 1	-0.01	0.00	-0.10	-0.01	-0.25	0.08	-0.01	0.06	0.02
19 1	0.01	0.00	-0.10	-0.01	0.25	-0.08	0.00	0.18	-0.04
20 1	0.00	0.28	0.26	0.12	0.00	0.00	0.03	-0.12	-0.10
21 1	-0.02	-0.14	0.04	0.07	-0.17	-0.12	0.03	0.01	-0.06
22 1	0.02	-0.14	0.04	0.07	0.17	0.12	0.01	0.11	0.01
23 6	-0.07	0.00	-0.13	0.00	-0.03	0.00	0.05	0.00	0.01
24 6	-0.05	0.00	-0.02	0.00	0.04	0.00	-0.08	0.00	-0.02
25 1	0.00	0.01	-0.10	0.25	0.01	0.08	0.28	-0.01	0.01
26 1	0.00	-0.01	-0.10	-0.25	0.01	-0.08	0.33	0.00	0.04
27 1	-0.28	0.00	0.26	0.00	-0.12	0.00	-0.30	0.01	0.26
28 1	0.14	0.02	0.04	0.17	-0.07	-0.12	0.13	0.04	0.08
29 1	0.14	-0.02	0.04	-0.17	-0.07	0.12	0.17	-0.02	0.06

28				29			30			
E				A1			B2			
Frequencies	--	992.9760			1001.0455			1018.6371		
Red. masses	--	1.2744			1.6102			1.9070		
Frc consts	--	0.7404			0.9507			1.1659		
IR Inten	--	0.8588			0.0000			0.0032		
Atom AN	X	Y	Z	X	Y	Z	X	Y	Z	
1	15	-0.01	0.02	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.07	
2	6	0.00	-0.05	-0.01	0.00	-0.07	0.01	0.00	-0.09	0.00
3	6	0.00	0.08	0.02	0.00	0.09	-0.01	0.00	0.10	-0.02
4	1	0.00	-0.33	-0.04	0.01	-0.24	0.00	0.01	-0.27	0.00
5	1	-0.01	-0.28	-0.01	-0.01	-0.24	0.00	-0.01	-0.27	0.00
6	1	0.01	0.30	-0.26	0.00	0.24	-0.20	0.00	0.21	-0.16
7	1	-0.02	-0.17	-0.06	-0.02	-0.07	-0.07	-0.02	-0.05	-0.07
8	1	0.04	-0.13	-0.08	0.02	-0.07	-0.07	0.02	-0.05	-0.07
9	6	0.02	-0.01	0.00	-0.07	0.00	-0.01	0.09	0.00	0.00
10	6	-0.03	0.01	0.01	0.09	0.00	0.01	-0.10	0.00	-0.02
11	1	0.18	0.00	-0.04	-0.24	0.01	0.00	0.27	-0.01	0.00
12	1	0.06	0.01	0.02	-0.24	-0.01	0.00	0.27	0.01	0.00
13	1	-0.12	-0.03	-0.10	0.24	0.00	0.20	-0.21	0.00	-0.16
14	1	0.11	-0.01	0.01	-0.07	-0.02	0.07	0.05	0.02	-0.07
15	1	0.01	-0.03	-0.06	-0.07	0.02	0.07	0.05	-0.02	-0.07
16	6	0.00	-0.05	0.01	0.00	0.07	0.01	0.00	0.09	0.00
17	6	0.00	0.08	-0.02	0.00	-0.09	-0.01	0.00	-0.10	-0.02
18	1	0.00	-0.33	0.04	-0.01	0.24	0.00	-0.01	0.27	0.00
19	1	-0.01	-0.28	0.01	0.01	0.24	0.00	0.01	0.27	0.00
20	1	0.01	0.30	0.26	0.00	-0.24	-0.20	0.00	-0.21	-0.16
21	1	-0.02	-0.17	0.06	0.02	0.07	-0.07	0.02	0.05	-0.07
22	1	0.04	-0.13	0.08	-0.02	0.07	-0.07	-0.02	0.05	-0.07
23	6	0.02	-0.01	0.00	0.07	0.00	-0.01	-0.09	0.00	0.00
24	6	-0.03	0.01	-0.01	-0.09	0.00	0.01	0.10	0.00	-0.02
25	1	0.18	0.00	0.04	0.24	-0.01	0.00	-0.27	0.01	0.00
26	1	0.06	0.01	-0.02	0.24	0.01	0.00	-0.27	-0.01	0.00
27	1	-0.12	-0.03	0.10	-0.24	0.00	0.20	0.21	0.00	-0.16
28	1	0.11	-0.01	-0.01	0.07	0.02	0.07	-0.05	-0.02	-0.07
29	1	0.01	-0.03	0.06	0.07	-0.02	0.07	-0.05	0.02	-0.07

		31			32			33		
		E			E			B1		
Frequencies --		1024.1402			1024.1402			1053.1360		
Red. masses --		1.9351			1.9351			1.2749		
Frc consts --		1.1958			1.1958			0.8331		
IR Inten --		1.1967			1.1967			0.0000		
Atom AN		X	Y	Z	X	Y	Z	X	Y	Z
1	15	0.02	0.01	0.00	-0.01	0.02	0.00	0.00	0.00	0.00
2	6	-0.05	0.08	-0.04	0.04	0.09	-0.05	0.07	0.00	0.00
3	6	0.04	-0.06	0.06	-0.03	-0.07	0.07	-0.04	0.00	0.00
4	1	0.02	0.25	0.06	-0.02	-0.14	-0.16	-0.02	-0.23	-0.14
5	1	0.02	-0.17	-0.16	-0.02	0.23	0.04	-0.02	0.23	0.14
6	1	-0.11	0.01	-0.03	0.09	0.01	-0.03	0.11	0.00	0.00
7	1	-0.06	0.02	-0.07	0.04	-0.28	0.14	0.06	-0.15	0.11
8	1	-0.05	-0.28	0.14	0.06	-0.01	-0.05	0.06	0.15	-0.11
9	6	0.09	-0.04	0.05	-0.08	-0.05	-0.04	0.00	0.07	0.00
10	6	-0.07	0.03	-0.07	0.06	0.04	0.06	0.00	-0.04	0.00
11	1	0.23	0.02	-0.04	0.17	0.02	-0.16	-0.23	-0.02	0.14
12	1	-0.14	0.02	0.16	-0.25	0.02	0.06	0.23	-0.02	-0.14
13	1	0.01	-0.09	0.03	-0.01	-0.11	-0.03	0.00	0.11	0.00
14	1	-0.01	-0.06	0.05	0.28	-0.05	0.14	-0.15	0.06	-0.11
15	1	-0.28	-0.04	-0.14	-0.02	-0.06	-0.07	0.15	0.06	0.11
16	6	-0.05	0.08	0.04	0.04	0.09	0.05	-0.07	0.00	0.00
17	6	0.04	-0.06	-0.06	-0.03	-0.07	-0.07	0.04	0.00	0.00
18	1	0.02	0.25	-0.06	-0.02	-0.14	0.16	0.02	0.23	-0.14
19	1	0.02	-0.17	0.16	-0.02	0.23	-0.04	0.02	-0.23	0.14
20	1	-0.11	0.01	0.03	0.09	0.01	0.03	-0.11	0.00	0.00
21	1	-0.06	0.02	0.07	0.04	-0.28	-0.14	-0.06	0.15	0.11
22	1	-0.05	-0.28	-0.14	0.06	-0.01	0.05	-0.06	-0.15	-0.11
23	6	0.09	-0.04	-0.05	-0.08	-0.05	0.04	0.00	-0.07	0.00
24	6	-0.07	0.03	0.07	0.06	0.04	-0.06	0.00	0.04	0.00
25	1	0.23	0.02	0.04	0.17	0.02	0.16	0.23	0.02	0.14
26	1	-0.14	0.02	-0.16	-0.25	0.02	-0.06	-0.23	0.02	-0.14
27	1	0.01	-0.09	-0.03	-0.01	-0.11	0.03	0.00	-0.11	0.00
28	1	-0.01	-0.06	-0.05	0.28	-0.05	-0.14	0.15	-0.06	-0.11
29	1	-0.28	-0.04	0.14	-0.02	-0.06	0.07	-0.15	-0.06	0.11

34				35			36			
E				E			B2			
Frequencies	--	1067.3162			1067.3163			1081.4178		
Red. masses	--	1.7542			1.7542			2.1440		
Frc consts	--	1.1774			1.1774			1.4773		
IR Inten	--	48.2183			48.2183			0.7218		
Atom AN		X	Y	Z	X	Y	Z	X	Y	Z
1	15	0.05	0.02	0.00	-0.02	0.05	0.00	0.00	0.00	0.04
2	6	-0.07	-0.03	0.03	0.03	-0.07	0.08	0.00	0.08	-0.09
3	6	0.05	0.01	-0.04	-0.02	0.03	-0.09	0.00	-0.03	0.09
4	1	0.02	0.20	0.17	-0.03	-0.11	0.00	0.01	-0.06	-0.10
5	1	0.04	-0.22	-0.13	0.00	0.06	0.12	-0.01	-0.06	-0.10
6	1	-0.12	-0.06	0.06	0.05	-0.16	0.14	0.00	0.18	-0.15
7	1	-0.05	0.26	-0.13	0.06	0.16	0.04	-0.03	-0.27	0.01
8	1	-0.08	-0.08	0.12	-0.01	0.29	-0.06	0.03	-0.27	0.01
9	6	-0.07	-0.03	-0.08	0.03	-0.07	0.03	-0.08	0.00	-0.09
10	6	0.03	0.02	0.09	-0.01	0.05	-0.04	0.03	0.00	0.09
11	1	0.06	0.00	-0.12	0.22	0.04	-0.13	0.06	-0.01	-0.10
12	1	-0.11	0.03	0.00	-0.20	0.02	0.17	0.06	0.01	-0.10
13	1	-0.16	-0.05	-0.14	0.06	-0.12	0.06	-0.18	0.00	-0.15
14	1	0.29	0.01	0.06	0.08	-0.08	0.12	0.27	0.03	0.01
15	1	0.16	-0.06	-0.04	-0.26	-0.05	-0.13	0.27	-0.03	0.01
16	6	-0.07	-0.03	-0.03	0.03	-0.07	-0.08	0.00	-0.08	-0.09
17	6	0.05	0.01	0.04	-0.02	0.03	0.09	0.00	0.03	0.09
18	1	0.02	0.20	-0.17	-0.03	-0.11	0.00	-0.01	0.06	-0.10
19	1	0.04	-0.22	0.13	0.00	0.06	-0.12	0.01	0.06	-0.10
20	1	-0.12	-0.06	-0.06	0.05	-0.16	-0.14	0.00	-0.18	-0.15
21	1	-0.05	0.26	0.13	0.06	0.16	-0.04	0.03	0.27	0.01
22	1	-0.08	-0.08	-0.12	-0.01	0.29	0.06	-0.03	0.27	0.01
23	6	-0.07	-0.03	0.08	0.03	-0.07	-0.03	0.08	0.00	-0.09
24	6	0.03	0.02	-0.09	-0.01	0.05	0.04	-0.03	0.00	0.09
25	1	0.06	0.00	0.12	0.22	0.04	0.13	-0.06	0.01	-0.10
26	1	-0.11	0.03	0.00	-0.20	0.02	-0.17	-0.06	-0.01	-0.10
27	1	-0.16	-0.05	0.14	0.06	-0.12	-0.06	0.18	0.00	-0.15
28	1	0.29	0.01	-0.06	0.08	-0.08	-0.12	-0.27	-0.03	0.01
29	1	0.16	-0.06	0.04	-0.26	-0.05	0.13	-0.27	0.03	0.01

37				38			39			
A1				A2			B1			
Frequencies	--	1088.8074			1261.4805			1269.7112		
Red. masses	--	2.1899			1.2370			1.1892		
Frc consts	--	1.5296			1.1598			1.1296		
IR Inten	--	0.0000			0.0000			0.0000		
Atom AN		X	Y	Z	X	Y	Z	X	Y	Z
1	15	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
2	6	0.00	-0.08	0.10	0.04	0.00	0.00	-0.03	0.00	0.00
3	6	0.00	0.03	-0.10	-0.06	0.00	0.00	0.06	0.00	0.00
4	1	-0.02	0.02	0.09	-0.02	0.29	-0.06	0.02	-0.30	0.04
5	1	0.02	0.02	0.09	-0.02	-0.29	0.06	0.02	0.30	-0.04
6	1	0.00	-0.18	0.16	0.11	0.00	0.00	-0.11	0.00	0.00
7	1	0.04	0.27	-0.01	0.04	-0.12	0.12	-0.04	0.11	-0.11
8	1	-0.04	0.27	-0.01	0.04	0.12	-0.12	-0.04	-0.11	0.11
9	6	-0.08	0.00	-0.10	0.00	-0.04	0.00	0.00	-0.03	0.00
10	6	0.03	0.00	0.10	0.00	0.06	0.00	0.00	0.06	0.00
11	1	0.02	-0.02	-0.09	-0.29	0.02	-0.06	-0.30	0.02	-0.04
12	1	0.02	0.02	-0.09	0.29	0.02	0.06	0.30	0.02	0.04
13	1	-0.18	0.00	-0.16	0.00	-0.11	0.00	0.00	-0.11	0.00
14	1	0.27	0.04	0.01	0.12	-0.04	0.12	0.11	-0.04	0.11
15	1	0.27	-0.04	0.01	-0.12	-0.04	-0.12	-0.11	-0.04	-0.11
16	6	0.00	0.08	0.10	-0.04	0.00	0.00	0.03	0.00	0.00
17	6	0.00	-0.03	-0.10	0.06	0.00	0.00	-0.06	0.00	0.00
18	1	0.02	-0.02	0.09	0.02	-0.29	-0.06	-0.02	0.30	0.04
19	1	-0.02	-0.02	0.09	0.02	0.29	0.06	-0.02	-0.30	-0.04
20	1	0.00	0.18	0.16	-0.11	0.00	0.00	0.11	0.00	0.00
21	1	-0.04	-0.27	-0.01	-0.04	0.12	0.12	0.04	-0.11	-0.11
22	1	0.04	-0.27	-0.01	-0.04	-0.12	-0.12	0.04	0.11	0.11
23	6	0.08	0.00	-0.10	0.00	0.04	0.00	0.00	0.03	0.00
24	6	-0.03	0.00	0.10	0.00	-0.06	0.00	0.00	-0.06	0.00
25	1	-0.02	0.02	-0.09	0.29	-0.02	-0.06	0.30	-0.02	-0.04
26	1	-0.02	-0.02	-0.09	-0.29	-0.02	0.06	-0.30	-0.02	0.04
27	1	0.18	0.00	-0.16	0.00	0.11	0.00	0.00	0.11	0.00
28	1	-0.27	-0.04	0.01	-0.12	0.04	0.12	-0.11	0.04	0.11
29	1	-0.27	0.04	0.01	0.12	0.04	-0.12	0.11	0.04	-0.11

	40			41			42			
	E			E			B2			
Frequencies	--	1272.7467			1272.7467			1292.7210		
Red. masses	--	1.2894			1.2894			1.4677		
Frc consts	--	1.2306			1.2306			1.4451		
IR Inten	--	0.7074			0.7074			1.0010		
Atom AN	X	Y	Z	X	Y	Z	X	Y	Z	
1	15	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	
2	6	-0.03	0.05	0.02	-0.03	-0.04	-0.01	0.00	0.09	0.02
3	6	0.05	-0.02	-0.02	0.05	0.01	0.02	0.00	-0.02	-0.03
4	1	0.01	-0.40	0.02	0.03	-0.13	0.07	-0.02	-0.31	-0.04
5	1	0.03	0.06	-0.06	0.01	0.41	-0.03	0.02	-0.31	-0.04
6	1	-0.09	-0.06	0.04	-0.10	0.05	-0.03	0.00	-0.13	0.09
7	1	0.00	0.14	-0.06	-0.06	0.06	-0.13	0.05	0.06	0.05
8	1	-0.06	-0.04	0.12	-0.01	-0.15	0.09	-0.05	0.06	0.05
9	6	-0.04	0.03	0.01	-0.05	-0.03	0.02	-0.09	0.00	0.02
10	6	0.01	-0.05	-0.02	0.02	0.05	-0.02	0.02	0.00	-0.03
11	1	0.41	-0.01	0.03	-0.06	0.03	-0.06	0.31	0.02	-0.04
12	1	-0.13	-0.03	-0.07	0.40	0.01	0.02	0.31	-0.02	-0.04
13	1	0.05	0.10	0.03	0.06	-0.09	0.04	0.13	0.00	0.09
14	1	-0.15	0.01	-0.09	0.04	-0.06	0.12	-0.06	-0.05	0.05
15	1	0.06	0.06	0.13	-0.14	0.00	-0.06	-0.06	0.05	0.05
16	6	-0.03	0.05	-0.02	-0.03	-0.04	0.01	0.00	-0.09	0.02
17	6	0.05	-0.02	0.02	0.05	0.01	-0.02	0.00	0.02	-0.03
18	1	0.01	-0.40	-0.02	0.03	-0.13	-0.07	0.02	0.31	-0.04
19	1	0.03	0.06	0.06	0.01	0.41	0.03	-0.02	0.31	-0.04
20	1	-0.09	-0.06	-0.04	-0.10	0.05	0.03	0.00	0.13	0.09
21	1	0.00	0.14	0.06	-0.06	0.06	0.13	-0.05	-0.06	0.05
22	1	-0.06	-0.04	-0.12	-0.01	-0.15	-0.09	0.05	-0.06	0.05
23	6	-0.04	0.03	-0.01	-0.05	-0.03	-0.02	0.09	0.00	0.02
24	6	0.01	-0.05	0.02	0.02	0.05	0.02	-0.02	0.00	-0.03
25	1	0.41	-0.01	-0.03	-0.06	0.03	0.06	-0.31	-0.02	-0.04
26	1	-0.13	-0.03	0.07	0.40	0.01	-0.02	-0.31	0.02	-0.04
27	1	0.05	0.10	-0.03	0.06	-0.09	-0.04	-0.13	0.00	0.09
28	1	-0.15	0.01	0.09	0.04	-0.06	-0.12	0.06	0.05	0.05
29	1	0.06	0.06	-0.13	-0.14	0.00	0.06	0.06	-0.05	0.05

43				44			45			
E				E			A1			
Frequencies	--	1300.2604			1300.2605			1312.6808		
Red. masses	--	1.3892			1.3892			1.4415		
Frc consts	--	1.3838			1.3838			1.4635		
IR Inten	--	3.9610			3.9610			0.0000		
Atom AN		X	Y	Z	X	Y	Z	X	Y	Z
1	15	0.01	0.03	0.00	-0.03	0.01	0.00	0.00	0.00	0.00
2	6	0.01	-0.10	-0.02	-0.01	-0.04	-0.01	0.00	-0.09	-0.01
3	6	-0.02	0.03	0.03	0.04	0.01	0.01	0.00	0.03	0.03
4	1	0.00	0.44	0.02	0.01	-0.11	0.02	0.01	0.32	0.04
5	1	-0.01	0.21	0.03	0.01	0.40	0.01	-0.01	0.32	0.04
6	1	0.03	0.11	-0.07	-0.07	0.05	-0.03	0.00	0.09	-0.05
7	1	-0.03	-0.11	-0.01	-0.04	0.03	-0.09	-0.04	-0.07	-0.05
8	1	0.05	-0.05	-0.08	0.00	-0.10	0.05	0.04	-0.07	-0.05
9	6	-0.04	0.01	0.01	0.10	0.01	-0.02	-0.09	0.00	0.01
10	6	0.01	-0.04	-0.01	-0.03	-0.02	0.03	0.03	0.00	-0.03
11	1	0.40	-0.01	-0.01	-0.21	-0.01	0.03	0.32	0.01	-0.04
12	1	-0.11	-0.01	-0.02	-0.44	0.00	0.02	0.32	-0.01	-0.04
13	1	0.05	0.07	0.03	-0.11	0.03	-0.07	0.09	0.00	0.05
14	1	-0.10	0.00	-0.05	0.05	0.05	-0.08	-0.07	-0.04	0.05
15	1	0.03	0.04	0.09	0.11	-0.03	-0.01	-0.07	0.04	0.05
16	6	0.01	-0.10	0.02	-0.01	-0.04	0.01	0.00	0.09	-0.01
17	6	-0.02	0.03	-0.03	0.04	0.01	-0.01	0.00	-0.03	0.03
18	1	0.00	0.44	-0.02	0.01	-0.11	-0.02	-0.01	-0.32	0.04
19	1	-0.01	0.21	-0.03	0.01	0.40	-0.01	0.01	-0.32	0.04
20	1	0.03	0.11	0.07	-0.07	0.05	0.03	0.00	-0.09	-0.05
21	1	-0.03	-0.11	0.01	-0.04	0.03	0.09	0.04	0.07	-0.05
22	1	0.05	-0.05	0.08	0.00	-0.10	-0.05	-0.04	0.07	-0.05
23	6	-0.04	0.01	-0.01	0.10	0.01	0.02	0.09	0.00	0.01
24	6	0.01	-0.04	0.01	-0.03	-0.02	-0.03	-0.03	0.00	-0.03
25	1	0.40	-0.01	0.01	-0.21	-0.01	-0.03	-0.32	-0.01	-0.04
26	1	-0.11	-0.01	0.02	-0.44	0.00	-0.02	-0.32	0.01	-0.04
27	1	0.05	0.07	-0.03	-0.11	0.03	0.07	-0.09	0.00	0.05
28	1	-0.10	0.00	0.05	0.05	0.05	0.08	0.07	0.04	0.05
29	1	0.03	0.04	-0.09	0.11	-0.03	0.01	0.07	-0.04	0.05

46				47			48			
A1				E			E			
Frequencies	--	1424.3527			1424.7874			1424.7874		
Red. masses	--	1.1769			1.1954			1.1954		
Frc consts	--	1.4068			1.4298			1.4298		
IR Inten	--	0.0000			2.5831			2.5831		
Atom AN		X	Y	Z	X	Y	Z	X	Y	Z
1	15	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
2	6	0.00	0.00	0.01	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
3	6	0.00	-0.05	0.03	0.00	0.08	-0.04	0.00	0.00	0.00
4	1	-0.07	0.01	-0.09	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
5	1	0.07	0.01	-0.09	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
6	1	0.00	0.18	-0.23	0.00	-0.24	0.33	0.01	0.00	0.00
7	1	-0.08	0.24	-0.04	0.13	-0.37	0.09	0.00	0.00	0.00
8	1	0.08	0.24	-0.04	-0.13	-0.37	0.09	0.00	0.00	0.00
9	6	0.00	0.00	-0.01	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
10	6	-0.05	0.00	-0.03	0.00	0.00	0.00	0.08	0.00	0.04
11	1	0.01	-0.07	0.09	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
12	1	0.01	0.07	0.09	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
13	1	0.18	0.00	0.23	0.00	0.01	0.00	-0.24	0.00	-0.33
14	1	0.24	-0.08	0.04	0.00	0.00	0.00	-0.37	0.13	-0.09
15	1	0.24	0.08	0.04	0.00	0.00	0.00	-0.37	-0.13	-0.09
16	6	0.00	0.00	0.01	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
17	6	0.00	0.05	0.03	0.00	0.08	0.04	0.00	0.00	0.00
18	1	0.07	-0.01	-0.09	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
19	1	-0.07	-0.01	-0.09	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
20	1	0.00	-0.18	-0.23	0.00	-0.24	-0.33	0.01	0.00	0.00
21	1	0.08	-0.24	-0.04	0.13	-0.37	-0.09	0.00	0.00	0.00
22	1	-0.08	-0.24	-0.04	-0.13	-0.37	-0.09	0.00	0.00	0.00
23	6	0.00	0.00	-0.01	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
24	6	0.05	0.00	-0.03	0.00	0.00	0.00	0.08	0.00	-0.04
25	1	-0.01	0.07	0.09	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
26	1	-0.01	-0.07	0.09	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
27	1	-0.18	0.00	0.23	0.00	0.01	0.00	-0.24	0.00	0.33
28	1	-0.24	0.08	0.04	0.00	0.00	0.00	-0.37	0.13	0.09
29	1	-0.24	-0.08	0.04	0.00	0.00	0.00	-0.37	-0.13	0.09

			49			50			51		
			B2			E			E		
Frequencies	--		1425.1696			1452.1269			1452.1269		
Red. masses	--		1.2079			1.0749			1.0749		
Frc consts	--		1.4455			1.3354			1.3354		
IR Inten	--		1.5017			0.0965			0.0965		
Atom AN			X	Y	Z	X	Y	Z	X	Y	Z
1	15		0.00	0.00	-0.01	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
2	6		0.00	-0.01	0.01	0.00	0.00	-0.02	0.00	0.01	-0.05
3	6		0.00	0.06	-0.03	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
4	1		-0.05	0.04	-0.05	0.13	0.00	0.17	0.28	-0.05	0.34
5	1		0.05	0.04	-0.05	-0.13	-0.04	0.17	-0.28	-0.03	0.34
6	1		0.00	-0.16	0.22	-0.07	-0.01	0.01	0.03	-0.02	0.01
7	1		0.10	-0.26	0.07	-0.01	-0.04	-0.02	0.00	0.03	0.00
8	1		-0.10	-0.26	0.07	0.00	0.05	0.01	0.01	-0.02	-0.02
9	6		0.01	0.00	0.01	0.01	0.00	0.05	0.00	0.00	-0.02
10	6		-0.06	0.00	-0.03	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
11	1		-0.04	0.05	-0.05	-0.03	0.28	-0.34	0.04	-0.13	0.17
12	1		-0.04	-0.05	-0.05	-0.05	-0.28	-0.34	0.00	0.13	0.17
13	1		0.16	0.00	0.22	-0.02	-0.03	-0.01	0.01	-0.07	0.01
14	1		0.26	-0.10	0.07	-0.02	-0.01	0.02	-0.05	0.00	0.01
15	1		0.26	0.10	0.07	0.03	0.00	0.00	0.04	-0.01	-0.02
16	6		0.00	0.01	0.01	0.00	0.00	0.02	0.00	0.01	0.05
17	6		0.00	-0.06	-0.03	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
18	1		0.05	-0.04	-0.05	0.13	0.00	-0.17	0.28	-0.05	-0.34
19	1		-0.05	-0.04	-0.05	-0.13	-0.04	-0.17	-0.28	-0.03	-0.34
20	1		0.00	0.16	0.22	-0.07	-0.01	-0.01	0.03	-0.02	-0.01
21	1		-0.10	0.26	0.07	-0.01	-0.04	0.02	0.00	0.03	0.00
22	1		0.10	0.26	0.07	0.00	0.05	-0.01	0.01	-0.02	0.02
23	6		-0.01	0.00	0.01	0.01	0.00	-0.05	0.00	0.00	0.02
24	6		0.06	0.00	-0.03	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
25	1		0.04	-0.05	-0.05	-0.03	0.28	0.34	0.04	-0.13	-0.17
26	1		0.04	0.05	-0.05	-0.05	-0.28	0.34	0.00	0.13	-0.17
27	1		-0.16	0.00	0.22	-0.02	-0.03	0.01	0.01	-0.07	-0.01
28	1		-0.26	0.10	0.07	-0.02	-0.01	-0.02	-0.05	0.00	-0.01
29	1		-0.26	-0.10	0.07	0.03	0.00	0.00	0.04	-0.01	0.02

52				53			54			
A1				B2			B2			
Frequencies	--	1463.8883			1465.9144			1509.6582		
Red. masses	--	1.0873			1.0833			1.0393		
Frc consts	--	1.3728			1.3716			1.3956		
IR Inten	--	0.0000			60.4743			4.1958		
Atom AN		X	Y	Z	X	Y	Z	X	Y	Z
1	15	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	-0.01	0.00	0.00	0.00
2	6	0.00	-0.01	0.04	0.00	0.01	-0.04	0.00	0.01	0.01
3	6	0.00	0.02	-0.01	0.00	0.01	-0.01	0.00	0.01	0.02
4	1	-0.21	0.03	-0.26	0.22	-0.03	0.26	0.02	-0.02	0.03
5	1	0.21	0.03	-0.26	-0.22	-0.03	0.26	-0.02	-0.02	0.03
6	1	0.00	-0.03	0.05	0.00	-0.03	0.03	0.00	-0.13	0.17
7	1	0.04	-0.08	0.04	0.04	-0.05	0.04	-0.18	-0.04	-0.25
8	1	-0.04	-0.08	0.04	-0.04	-0.05	0.04	0.18	-0.04	-0.25
9	6	-0.01	0.00	-0.04	-0.01	0.00	-0.04	-0.01	0.00	0.01
10	6	0.02	0.00	0.01	-0.01	0.00	-0.01	-0.01	0.00	0.02
11	1	0.03	-0.21	0.26	0.03	-0.22	0.26	0.02	-0.02	0.03
12	1	0.03	0.21	0.26	0.03	0.22	0.26	0.02	0.02	0.03
13	1	-0.03	0.00	-0.05	0.03	0.00	0.03	0.13	0.00	0.17
14	1	-0.08	0.04	-0.04	0.05	-0.04	0.04	0.04	0.18	-0.25
15	1	-0.08	-0.04	-0.04	0.05	0.04	0.04	0.04	-0.18	-0.25
16	6	0.00	0.01	0.04	0.00	-0.01	-0.04	0.00	-0.01	0.01
17	6	0.00	-0.02	-0.01	0.00	-0.01	-0.01	0.00	-0.01	0.02
18	1	0.21	-0.03	-0.26	-0.22	0.03	0.26	-0.02	0.02	0.03
19	1	-0.21	-0.03	-0.26	0.22	0.03	0.26	0.02	0.02	0.03
20	1	0.00	0.03	0.05	0.00	0.03	0.03	0.00	0.13	0.17
21	1	-0.04	0.08	0.04	-0.04	0.05	0.04	0.18	0.04	-0.25
22	1	0.04	0.08	0.04	0.04	0.05	0.04	-0.18	0.04	-0.25
23	6	0.01	0.00	-0.04	0.01	0.00	-0.04	0.01	0.00	0.01
24	6	-0.02	0.00	0.01	0.01	0.00	-0.01	0.01	0.00	0.02
25	1	-0.03	0.21	0.26	-0.03	0.22	0.26	-0.02	0.02	0.03
26	1	-0.03	-0.21	0.26	-0.03	-0.22	0.26	-0.02	-0.02	0.03
27	1	0.03	0.00	-0.05	-0.03	0.00	0.03	-0.13	0.00	0.17
28	1	0.08	-0.04	-0.04	-0.05	0.04	0.04	-0.04	-0.18	-0.25
29	1	0.08	0.04	-0.04	-0.05	-0.04	0.04	-0.04	0.18	-0.25

55				56			57			
E				E			A1			
Frequencies	--	1512.7431			1512.7432			1518.4343		
Red. masses	--	1.0440			1.0440			1.0455		
Frc consts	--	1.4077			1.4077			1.4203		
IR Inten	--	5.5431			5.5431			0.0000		
Atom AN		X	Y	Z	X	Y	Z	X	Y	Z
1	15	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
2	6	0.00	0.00	0.00	0.00	-0.02	-0.01	0.00	0.01	0.01
3	6	0.00	0.00	-0.01	0.00	-0.01	-0.03	0.00	0.01	0.02
4	1	0.00	0.00	0.00	0.01	0.04	0.01	-0.02	-0.03	-0.02
5	1	0.00	0.02	0.00	-0.01	0.03	0.01	0.02	-0.03	-0.02
6	1	0.02	0.04	-0.05	-0.01	0.16	-0.22	0.00	-0.11	0.15
7	1	0.07	0.02	0.09	0.26	0.03	0.35	-0.19	-0.02	-0.26
8	1	-0.06	-0.01	0.08	-0.26	0.04	0.36	0.19	-0.02	-0.26
9	6	-0.02	0.00	0.01	0.00	0.00	0.00	0.01	0.00	-0.01
10	6	-0.01	0.00	0.03	0.00	0.00	-0.01	0.01	0.00	-0.02
11	1	0.03	0.01	-0.01	-0.02	0.00	0.00	-0.03	-0.02	0.02
12	1	0.04	-0.01	-0.01	0.00	0.00	0.00	-0.03	0.02	0.02
13	1	0.16	0.01	0.22	-0.04	0.02	-0.05	-0.11	0.00	-0.15
14	1	0.04	0.26	-0.36	0.01	-0.06	0.08	-0.02	-0.19	0.26
15	1	0.03	-0.26	-0.35	-0.02	0.07	0.09	-0.02	0.19	0.26
16	6	0.00	0.00	0.00	0.00	-0.02	0.01	0.00	-0.01	0.01
17	6	0.00	0.00	0.01	0.00	-0.01	0.03	0.00	-0.01	0.02
18	1	0.00	0.00	0.00	0.01	0.04	-0.01	0.02	0.03	-0.02
19	1	0.00	0.02	0.00	-0.01	0.03	-0.01	-0.02	0.03	-0.02
20	1	0.02	0.04	0.05	-0.01	0.16	0.22	0.00	0.11	0.15
21	1	0.07	0.02	-0.09	0.26	0.03	-0.35	0.19	0.02	-0.26
22	1	-0.06	-0.01	-0.08	-0.26	0.04	-0.36	-0.19	0.02	-0.26
23	6	-0.02	0.00	-0.01	0.00	0.00	0.00	-0.01	0.00	-0.01
24	6	-0.01	0.00	-0.03	0.00	0.00	0.01	-0.01	0.00	-0.02
25	1	0.03	0.01	0.01	-0.02	0.00	0.00	0.03	0.02	0.02
26	1	0.04	-0.01	0.01	0.00	0.00	0.00	0.03	-0.02	0.02
27	1	0.16	0.01	-0.22	-0.04	0.02	0.05	0.11	0.00	-0.15
28	1	0.04	0.26	0.36	0.01	-0.06	-0.08	0.02	0.19	0.26
29	1	0.03	-0.26	0.35	-0.02	0.07	-0.09	0.02	-0.19	0.26

		58			59			60		
		A2			B1			E		
Frequencies	--	1518.9909			1521.7948			1522.7254		
Red. masses	--	1.0366			1.0348			1.0356		
Frc consts	--	1.4092			1.4119			1.4147		
IR Inten	--	0.0000			0.0000			19.2580		
Atom AN		X	Y	Z	X	Y	Z	X	Y	Z
1	15	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
2	6	-0.01	0.00	0.00	0.01	0.00	0.00	-0.01	0.00	-0.01
3	6	-0.02	0.00	0.00	0.02	0.00	0.00	-0.02	0.00	0.00
4	1	0.00	-0.02	0.01	0.00	0.03	-0.01	0.04	-0.03	0.05
5	1	0.00	0.02	-0.01	0.00	-0.03	0.01	-0.04	0.02	0.04
6	1	0.35	0.00	0.00	-0.35	0.00	0.00	0.30	-0.01	0.01
7	1	0.02	0.24	0.09	-0.02	-0.24	-0.08	0.01	0.21	0.06
8	1	0.02	-0.24	-0.09	-0.02	0.24	0.08	0.03	-0.21	-0.09
9	6	0.00	0.01	0.00	0.00	0.01	0.00	0.00	-0.01	0.00
10	6	0.00	0.02	0.00	0.00	0.02	0.00	0.00	-0.03	0.00
11	1	0.02	0.00	0.01	0.03	0.00	0.01	-0.03	0.03	-0.05
12	1	-0.02	0.00	-0.01	-0.03	0.00	-0.01	0.02	-0.03	-0.02
13	1	0.00	-0.35	0.00	0.00	-0.35	0.00	0.00	0.38	-0.01
14	1	-0.24	-0.02	0.09	-0.24	-0.02	0.08	0.26	0.02	-0.08
15	1	0.24	-0.02	-0.09	0.24	-0.02	-0.08	-0.26	0.04	0.10
16	6	0.01	0.00	0.00	-0.01	0.00	0.00	-0.01	0.00	0.01
17	6	0.02	0.00	0.00	-0.02	0.00	0.00	-0.02	0.00	0.00
18	1	0.00	0.02	0.01	0.00	-0.03	-0.01	0.04	-0.03	-0.05
19	1	0.00	-0.02	-0.01	0.00	0.03	0.01	-0.04	0.02	-0.04
20	1	-0.35	0.00	0.00	0.35	0.00	0.00	0.30	-0.01	-0.01
21	1	-0.02	-0.24	0.09	0.02	0.24	-0.08	0.01	0.21	-0.06
22	1	-0.02	0.24	-0.09	0.02	-0.24	0.08	0.03	-0.21	0.09
23	6	0.00	-0.01	0.00	0.00	-0.01	0.00	0.00	-0.01	0.00
24	6	0.00	-0.02	0.00	0.00	-0.02	0.00	0.00	-0.03	0.00
25	1	-0.02	0.00	0.01	-0.03	0.00	0.01	-0.03	0.03	0.05
26	1	0.02	0.00	-0.01	0.03	0.00	-0.01	0.02	-0.03	0.02
27	1	0.00	0.35	0.00	0.00	0.35	0.00	0.00	0.38	0.01
28	1	0.24	0.02	0.09	0.24	0.02	0.08	0.26	0.02	0.08
29	1	-0.24	0.02	-0.09	-0.24	0.02	-0.08	-0.26	0.04	-0.10

		61			62			63		
		E			E			E		
Frequencies	--	1522.7254			3085.6128			3085.6128		
Red. masses	--	1.0356			1.0522			1.0522		
Frc consts	--	1.4147			5.9026			5.9026		
IR Inten	--	19.2580			0.7259			0.7259		
Atom AN		X	Y	Z	X	Y	Z	X	Y	Z
1	15	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
2	6	-0.01	0.00	0.00	0.00	0.00	-0.01	0.00	0.00	0.04
3	6	-0.03	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.02	-0.02
4	1	-0.03	-0.02	-0.02	-0.08	-0.01	0.05	0.31	0.02	-0.22
5	1	0.03	0.03	-0.05	0.09	-0.01	0.07	-0.31	0.02	-0.21
6	1	0.38	0.00	-0.01	0.00	0.04	0.03	0.00	-0.14	-0.13
7	1	0.04	0.26	0.10	0.07	0.01	-0.05	-0.21	-0.02	0.15
8	1	0.02	-0.26	-0.08	-0.05	0.00	-0.04	0.22	-0.02	0.15
9	6	0.00	0.01	0.01	0.00	0.00	-0.04	0.00	0.00	-0.01
10	6	0.00	0.02	0.00	0.02	0.00	0.02	0.00	0.00	0.00
11	1	0.02	0.04	-0.04	0.02	0.31	0.21	0.01	0.09	0.07
12	1	-0.03	-0.04	-0.05	0.02	-0.31	0.22	0.01	-0.08	0.05
13	1	-0.01	-0.30	-0.01	-0.14	0.00	0.13	-0.04	0.00	0.03
14	1	-0.21	-0.03	0.09	-0.02	-0.22	-0.15	0.00	-0.05	-0.04
15	1	0.21	-0.01	-0.06	-0.02	0.21	-0.15	-0.01	0.07	-0.05
16	6	-0.01	0.00	0.00	0.00	0.00	0.01	0.00	0.00	-0.04
17	6	-0.03	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.02	0.02
18	1	-0.03	-0.02	0.02	-0.08	-0.01	-0.05	0.31	0.02	0.22
19	1	0.03	0.03	0.05	0.09	-0.01	-0.07	-0.31	0.02	0.21
20	1	0.38	0.00	0.01	0.00	0.04	-0.03	0.00	-0.14	0.13
21	1	0.04	0.26	-0.10	0.07	0.01	0.05	-0.21	-0.02	-0.15
22	1	0.02	-0.26	0.08	-0.05	0.00	0.04	0.22	-0.02	-0.15
23	6	0.00	0.01	-0.01	0.00	0.00	0.04	0.00	0.00	0.01
24	6	0.00	0.02	0.00	0.02	0.00	-0.02	0.00	0.00	0.00
25	1	0.02	0.04	0.04	0.02	0.31	-0.21	0.01	0.09	-0.07
26	1	-0.03	-0.04	0.05	0.02	-0.31	-0.22	0.01	-0.08	-0.05
27	1	-0.01	-0.30	0.01	-0.14	0.00	-0.13	-0.04	0.00	-0.03
28	1	-0.21	-0.03	-0.09	-0.02	-0.22	0.15	0.00	-0.05	0.04
29	1	0.21	-0.01	0.06	-0.02	0.21	0.15	-0.01	0.07	0.05

64				65			66			
B2				A1			A1			
Frequencies	--	3085.9152			3087.4709			3089.4737		
Red. masses	--	1.0486			1.0457			1.0500		
Frc consts	--	5.8836			5.8729			5.9050		
IR Inten	--	8.1496			0.0000			0.0000		
Atom AN		X	Y	Z	X	Y	Z	X	Y	Z
1	15	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
2	6	0.00	0.00	-0.02	0.00	0.00	0.02	0.00	0.00	-0.03
3	6	0.00	-0.01	0.01	0.00	0.02	-0.01	0.00	0.01	-0.01
4	1	-0.19	-0.01	0.14	0.17	0.01	-0.12	-0.23	-0.02	0.16
5	1	0.19	-0.01	0.14	-0.17	0.01	-0.12	0.23	-0.02	0.16
6	1	0.00	0.13	0.11	0.00	-0.15	-0.13	0.00	-0.12	-0.11
7	1	0.19	0.02	-0.13	-0.21	-0.02	0.14	-0.14	-0.01	0.10
8	1	-0.19	0.02	-0.13	0.21	-0.02	0.14	0.14	-0.01	0.10
9	6	0.00	0.00	-0.02	0.00	0.00	-0.02	0.00	0.00	0.03
10	6	0.01	0.00	0.01	0.02	0.00	0.01	0.01	0.00	0.01
11	1	0.01	0.19	0.14	0.01	0.17	0.12	-0.02	-0.23	-0.16
12	1	0.01	-0.19	0.14	0.01	-0.17	0.12	-0.02	0.23	-0.16
13	1	-0.13	0.00	0.11	-0.15	0.00	0.13	-0.12	0.00	0.11
14	1	-0.02	-0.19	-0.13	-0.02	-0.21	-0.14	-0.01	-0.14	-0.10
15	1	-0.02	0.19	-0.13	-0.02	0.21	-0.14	-0.01	0.14	-0.10
16	6	0.00	0.00	-0.02	0.00	0.00	0.02	0.00	0.00	-0.03
17	6	0.00	0.01	0.01	0.00	-0.02	-0.01	0.00	-0.01	-0.01
18	1	0.19	0.01	0.14	-0.17	-0.01	-0.12	0.23	0.02	0.16
19	1	-0.19	0.01	0.14	0.17	-0.01	-0.12	-0.23	0.02	0.16
20	1	0.00	-0.13	0.11	0.00	0.15	-0.13	0.00	0.12	-0.11
21	1	-0.19	-0.02	-0.13	0.21	0.02	0.14	0.14	0.01	0.10
22	1	0.19	-0.02	-0.13	-0.21	0.02	0.14	-0.14	0.01	0.10
23	6	0.00	0.00	-0.02	0.00	0.00	-0.02	0.00	0.00	0.03
24	6	-0.01	0.00	0.01	-0.02	0.00	0.01	-0.01	0.00	0.01
25	1	-0.01	-0.19	0.14	-0.01	-0.17	0.12	0.02	0.23	-0.16
26	1	-0.01	0.19	0.14	-0.01	0.17	0.12	0.02	-0.23	-0.16
27	1	0.13	0.00	0.11	0.15	0.00	0.13	0.12	0.00	0.11
28	1	0.02	0.19	-0.13	0.02	0.21	-0.14	0.01	0.14	-0.10
29	1	0.02	-0.19	-0.13	0.02	-0.21	-0.14	0.01	-0.14	-0.10

		67			68			69		
		E			E			B2		
Frequencies	--	3090.6373			3090.6373			3094.6099		
Red. masses	--	1.0431			1.0431			1.0468		
Frc consts	--	5.8702			5.8702			5.9064		
IR Inten	--	9.6362			9.6362			3.7701		
Atom AN		X	Y	Z	X	Y	Z	X	Y	Z
1	15	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
2	6	0.00	0.00	-0.01	0.00	0.00	-0.03	0.00	0.00	0.02
3	6	0.00	0.01	-0.01	0.00	0.02	-0.01	0.00	-0.01	0.01
4	1	-0.09	-0.01	0.07	-0.23	-0.02	0.16	0.21	0.01	-0.15
5	1	0.07	-0.01	0.05	0.24	-0.02	0.17	-0.21	0.01	-0.15
6	1	0.00	-0.08	-0.07	0.00	-0.22	-0.19	0.00	0.15	0.13
7	1	-0.08	-0.01	0.06	-0.26	-0.02	0.18	0.16	0.01	-0.11
8	1	0.10	-0.01	0.07	0.25	-0.02	0.18	-0.16	0.01	-0.11
9	6	0.00	0.00	-0.03	0.00	0.00	0.01	0.00	0.00	0.02
10	6	-0.02	0.00	-0.01	0.01	0.00	0.01	0.01	0.00	0.01
11	1	0.02	0.24	0.17	-0.01	-0.07	-0.05	-0.01	-0.21	-0.15
12	1	0.02	-0.23	0.16	-0.01	0.09	-0.07	-0.01	0.21	-0.15
13	1	0.22	0.00	-0.19	-0.08	0.00	0.07	-0.15	0.00	0.13
14	1	0.02	0.25	0.18	-0.01	-0.10	-0.07	-0.01	-0.16	-0.11
15	1	0.02	-0.26	0.18	-0.01	0.08	-0.06	-0.01	0.16	-0.11
16	6	0.00	0.00	0.01	0.00	0.00	0.03	0.00	0.00	0.02
17	6	0.00	0.01	0.01	0.00	0.02	0.01	0.00	0.01	0.01
18	1	-0.09	-0.01	-0.07	-0.23	-0.02	-0.16	-0.21	-0.01	-0.15
19	1	0.07	-0.01	-0.05	0.24	-0.02	-0.17	0.21	-0.01	-0.15
20	1	0.00	-0.08	0.07	0.00	-0.22	0.19	0.00	-0.15	0.13
21	1	-0.08	-0.01	-0.06	-0.26	-0.02	-0.18	-0.16	-0.01	-0.11
22	1	0.10	-0.01	-0.07	0.25	-0.02	-0.18	0.16	-0.01	-0.11
23	6	0.00	0.00	0.03	0.00	0.00	-0.01	0.00	0.00	0.02
24	6	-0.02	0.00	0.01	0.01	0.00	-0.01	-0.01	0.00	0.01
25	1	0.02	0.24	-0.17	-0.01	-0.07	0.05	0.01	0.21	-0.15
26	1	0.02	-0.23	-0.16	-0.01	0.09	0.07	0.01	-0.21	-0.15
27	1	0.22	0.00	0.19	-0.08	0.00	-0.07	0.15	0.00	0.13
28	1	0.02	0.25	-0.18	-0.01	-0.10	0.07	0.01	0.16	-0.11
29	1	0.02	-0.26	-0.18	-0.01	0.08	0.06	0.01	-0.16	-0.11

	70			71			72			
	B1			A2			E			
Frequencies	--	3138.3130			3140.9772			3142.2991		
Red. masses	--	1.1039			1.1016			1.1023		
Frc consts	--	6.4059			6.4033			6.4125		
IR Inten	--	0.0000			0.0000			0.8935		
Atom AN	X	Y	Z	X	Y	Z	X	Y	Z	
1	15	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	
2	6	-0.04	0.00	0.00	0.05	0.00	0.00	0.04	0.00	
3	6	0.01	0.00	0.00	-0.01	0.00	0.00	-0.01	0.00	
4	1	0.27	0.02	-0.20	-0.28	-0.02	0.21	-0.22	-0.02	0.17
5	1	0.27	-0.02	0.20	-0.28	0.02	-0.21	-0.22	0.02	-0.17
6	1	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	-0.02	-0.02
7	1	-0.08	-0.01	0.06	0.04	0.00	-0.03	0.05	0.00	-0.03
8	1	-0.08	0.01	-0.06	0.04	0.00	0.03	0.06	0.00	0.04
9	6	0.00	-0.04	0.00	0.00	-0.05	0.00	0.00	0.05	0.00
10	6	0.00	0.01	0.00	0.00	0.01	0.00	0.00	-0.01	0.00
11	1	0.02	0.27	0.20	0.02	0.28	0.21	-0.02	-0.32	-0.24
12	1	-0.02	0.27	-0.20	-0.02	0.28	-0.21	0.02	-0.31	0.24
13	1	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	-0.01	0.00	0.01
14	1	-0.01	-0.08	-0.06	0.00	-0.04	-0.03	0.01	0.07	0.05
15	1	0.01	-0.08	0.06	0.00	-0.04	0.03	-0.01	0.08	-0.06
16	6	0.04	0.00	0.00	-0.05	0.00	0.00	0.04	0.00	0.00
17	6	-0.01	0.00	0.00	0.01	0.00	0.00	-0.01	0.00	0.00
18	1	-0.27	-0.02	-0.20	0.28	0.02	0.21	-0.22	-0.02	-0.17
19	1	-0.27	0.02	0.20	0.28	-0.02	-0.21	-0.22	0.02	0.17
20	1	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	-0.02	0.02
21	1	0.08	0.01	0.06	-0.04	0.00	-0.03	0.05	0.00	0.03
22	1	0.08	-0.01	-0.06	-0.04	0.00	0.03	0.06	0.00	-0.04
23	6	0.00	0.04	0.00	0.00	0.05	0.00	0.00	0.05	0.00
24	6	0.00	-0.01	0.00	0.00	-0.01	0.00	0.00	-0.01	0.00
25	1	-0.02	-0.27	0.20	-0.02	-0.28	0.21	-0.02	-0.32	0.24
26	1	0.02	-0.27	-0.20	0.02	-0.28	-0.21	0.02	-0.31	-0.24
27	1	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	-0.01	0.00	-0.01
28	1	0.01	0.08	-0.06	0.00	0.04	-0.03	0.01	0.07	-0.05
29	1	-0.01	0.08	0.06	0.00	0.04	0.03	-0.01	0.08	0.06

		73			74			75		
		E			A2			E		
Frequencies	--	3142.2991			3178.1024			3179.4117		
Red. masses	--	1.1023			1.1033			1.1031		
Frc consts	--	6.4125			6.5657			6.5702		
IR Inten	--	0.8935			0.0000			11.7708		
Atom AN		X	Y	Z	X	Y	Z	X	Y	Z
1	15	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
2	6	-0.05	0.00	0.00	0.01	0.00	0.00	-0.02	0.00	0.00
3	6	0.01	0.00	0.00	0.05	0.00	0.00	-0.06	0.00	0.00
4	1	0.31	0.02	-0.24	-0.04	0.00	0.03	0.09	0.01	-0.07
5	1	0.32	-0.02	0.24	-0.04	0.00	-0.03	0.09	-0.01	0.07
6	1	0.00	-0.01	-0.01	0.01	0.00	0.00	-0.02	0.00	0.00
7	1	-0.08	-0.01	0.06	-0.28	-0.03	0.20	0.39	0.04	-0.28
8	1	-0.07	0.01	-0.05	-0.28	0.03	-0.20	0.39	-0.04	0.28
9	6	0.00	0.04	0.00	0.00	-0.01	0.00	0.00	0.00	0.00
10	6	0.00	-0.01	0.00	0.00	-0.05	0.00	0.00	-0.01	0.00
11	1	-0.02	-0.22	-0.17	0.00	0.04	0.03	0.00	-0.01	0.00
12	1	0.02	-0.22	0.17	0.00	0.04	-0.03	0.00	0.02	-0.01
13	1	0.02	0.00	-0.02	0.00	-0.01	0.00	0.01	0.00	0.00
14	1	0.00	0.06	0.04	0.03	0.28	0.20	0.00	0.03	0.02
15	1	0.00	0.05	-0.03	-0.03	0.28	-0.20	0.00	0.03	-0.02
16	6	-0.05	0.00	0.00	-0.01	0.00	0.00	-0.02	0.00	0.00
17	6	0.01	0.00	0.00	-0.05	0.00	0.00	-0.06	0.00	0.00
18	1	0.31	0.02	0.24	0.04	0.00	0.03	0.09	0.01	0.07
19	1	0.32	-0.02	-0.24	0.04	0.00	-0.03	0.09	-0.01	-0.07
20	1	0.00	-0.01	0.01	-0.01	0.00	0.00	-0.02	0.00	0.00
21	1	-0.08	-0.01	-0.06	0.28	0.03	0.20	0.39	0.04	0.28
22	1	-0.07	0.01	0.05	0.28	-0.03	-0.20	0.39	-0.04	-0.28
23	6	0.00	0.04	0.00	0.00	0.01	0.00	0.00	0.00	0.00
24	6	0.00	-0.01	0.00	0.00	0.05	0.00	0.00	-0.01	0.00
25	1	-0.02	-0.22	0.17	0.00	-0.04	0.03	0.00	-0.01	0.00
26	1	0.02	-0.22	-0.17	0.00	-0.04	-0.03	0.00	0.02	0.01
27	1	0.02	0.00	0.02	0.00	0.01	0.00	0.01	0.00	0.00
28	1	0.00	0.06	-0.04	-0.03	-0.28	0.20	0.00	0.03	-0.02
29	1	0.00	0.05	0.03	0.03	-0.28	-0.20	0.00	0.03	0.02

76				77			78			
E				B1			A1			
Frequencies	--	3179.4117			3180.1623			3185.3734		
Red. masses	--	1.1031			1.1033			1.1026		
Frc consts	--	6.5702			6.5743			6.5915		
IR Inten	--	11.7708			0.0000			0.0000		
Atom AN		X	Y	Z	X	Y	Z	X	Y	Z
1	15	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
2	6	0.00	0.00	0.00	-0.01	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
3	6	-0.01	0.00	0.00	-0.04	0.00	0.00	0.00	0.02	0.04
4	1	0.02	0.00	-0.01	0.08	0.01	-0.06	0.01	0.00	-0.01
5	1	-0.01	0.00	0.00	0.08	-0.01	0.06	-0.01	0.00	-0.01
6	1	0.00	-0.01	0.00	-0.01	0.00	0.00	0.00	-0.33	-0.28
7	1	0.03	0.00	-0.02	0.27	0.03	-0.20	0.15	0.02	-0.10
8	1	0.03	0.00	0.02	0.27	-0.03	0.20	-0.15	0.02	-0.10
9	6	0.00	0.02	0.00	0.00	-0.01	0.00	0.00	0.00	0.00
10	6	0.00	0.06	0.00	0.00	-0.04	0.00	0.02	0.00	-0.04
11	1	-0.01	-0.09	-0.07	0.01	0.08	0.06	0.00	0.01	0.01
12	1	0.01	-0.09	0.07	-0.01	0.08	-0.06	0.00	-0.01	0.01
13	1	0.00	0.02	0.00	0.00	-0.01	0.00	-0.33	0.00	0.28
14	1	-0.04	-0.39	-0.28	0.03	0.27	0.20	0.02	0.15	0.10
15	1	0.04	-0.39	0.28	-0.03	0.27	-0.20	0.02	-0.15	0.10
16	6	0.00	0.00	0.00	0.01	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
17	6	-0.01	0.00	0.00	0.04	0.00	0.00	0.00	-0.02	0.04
18	1	0.02	0.00	0.01	-0.08	-0.01	-0.06	-0.01	0.00	-0.01
19	1	-0.01	0.00	0.00	-0.08	0.01	0.06	0.01	0.00	-0.01
20	1	0.00	-0.01	0.00	0.01	0.00	0.00	0.00	0.33	-0.28
21	1	0.03	0.00	0.02	-0.27	-0.03	-0.20	-0.15	-0.02	-0.10
22	1	0.03	0.00	-0.02	-0.27	0.03	0.20	0.15	-0.02	-0.10
23	6	0.00	0.02	0.00	0.00	0.01	0.00	0.00	0.00	0.00
24	6	0.00	0.06	0.00	0.00	0.04	0.00	-0.02	0.00	-0.04
25	1	-0.01	-0.09	0.07	-0.01	-0.08	0.06	0.00	-0.01	0.01
26	1	0.01	-0.09	-0.07	0.01	-0.08	-0.06	0.00	0.01	0.01
27	1	0.00	0.02	0.00	0.00	0.01	0.00	0.33	0.00	0.28
28	1	-0.04	-0.39	0.28	-0.03	-0.27	0.20	-0.02	-0.15	0.10
29	1	0.04	-0.39	-0.28	0.03	-0.27	-0.20	-0.02	0.15	0.10

	79			80			81			
	E			E			B2			
Frequencies	--	3185.6568			3185.6568			3185.7510		
Red. masses	--	1.1024			1.1024			1.1024		
Frc consts	--	6.5916			6.5916			6.5921		
IR Inten	--	0.2203			0.2203			3.8915		
Atom AN	X	Y	Z	X	Y	Z	X	Y	Z	
1	15	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	
2	6	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	
3	6	0.00	0.02	0.03	0.00	-0.03	-0.05	0.00	0.02	0.04
4	1	0.00	0.00	0.00	-0.02	0.00	0.02	0.02	0.00	-0.01
5	1	-0.02	0.00	-0.02	0.01	0.00	0.01	-0.02	0.00	-0.01
6	1	0.00	-0.27	-0.22	0.00	0.38	0.32	0.00	-0.33	-0.27
7	1	0.12	0.01	-0.08	-0.17	-0.02	0.11	0.15	0.02	-0.10
8	1	-0.12	0.02	-0.08	0.17	-0.02	0.11	-0.15	0.02	-0.10
9	6	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
10	6	-0.03	0.00	0.05	-0.02	0.00	0.03	-0.02	0.00	0.04
11	1	0.00	-0.01	-0.01	0.00	-0.02	-0.02	0.00	-0.02	-0.01
12	1	0.00	0.02	-0.02	0.00	0.00	0.00	0.00	0.02	-0.01
13	1	0.38	0.00	-0.32	0.27	0.00	-0.22	0.33	0.00	-0.27
14	1	-0.02	-0.17	-0.11	-0.02	-0.12	-0.08	-0.02	-0.15	-0.10
15	1	-0.02	0.17	-0.11	-0.01	0.12	-0.08	-0.02	0.15	-0.10
16	6	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
17	6	0.00	0.02	-0.03	0.00	-0.03	0.05	0.00	-0.02	0.04
18	1	0.00	0.00	0.00	-0.02	0.00	-0.02	-0.02	0.00	-0.01
19	1	-0.02	0.00	0.02	0.01	0.00	-0.01	0.02	0.00	-0.01
20	1	0.00	-0.27	0.22	0.00	0.38	-0.32	0.00	0.33	-0.27
21	1	0.12	0.01	0.08	-0.17	-0.02	-0.11	-0.15	-0.02	-0.10
22	1	-0.12	0.02	0.08	0.17	-0.02	-0.11	0.15	-0.02	-0.10
23	6	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
24	6	-0.03	0.00	-0.05	-0.02	0.00	-0.03	0.02	0.00	0.04
25	1	0.00	-0.01	0.01	0.00	-0.02	0.02	0.00	0.02	-0.01
26	1	0.00	0.02	0.02	0.00	0.00	0.00	0.00	-0.02	-0.01
27	1	0.38	0.00	0.32	0.27	0.00	0.22	-0.33	0.00	-0.27
28	1	-0.02	-0.17	0.11	-0.02	-0.12	0.08	0.02	0.15	-0.10
29	1	-0.02	0.17	0.11	-0.01	0.12	0.08	0.02	-0.15	-0.10