

Harmonic vibrational frequencies of circumovalene ($C_{66}H_{20}$) in the four charge states -1, 0, +1 and +2. All calculations were performed at the B3LYP/4-31g level of theory.

Numb. of the mode	Anion		Neutral		Cation		Dication	
	Freq. (cm^{-1})	Int. ($km\ mol^{-1}$)	Freq. (cm^{-1})	Int. ($km\ mol^{-1}$)	Freq. (cm^{-1})	Int. ($km\ mol^{-1}$)	Freq. (cm^{-1})	Int. ($km\ mol^{-1}$)
1	31	0.0	32	0.0	33	0.0	33	0.0
2	33	0.1	34	0.2	34	0.4	34	0.8
3	49	0.5	47	1.8	46	3.8	45	6.6
4	63	0.0	64	0.0	64	0.0	64	0.0
5	78	0.0	79	0.0	79	0.0	79	0.0
6	99	0.0	97	0.0	97	0.0	96	0.0
7	111	0.0	112	0.0	112	0.1	112	0.4
8	121	0.0	121	0.0	119	0.0	117	0.0
9	126	0.0	127	0.0	127	0.0	127	0.0
10	174	0.0	174	3.2	173	0.0	172	0.0
11	175	0.0	175	0.0	174	3.6	173	4.0
12	176	2.9	178	0.0	176	0.0	175	0.0
13	179	0.0	178	0.0	179	0.0	179	0.0
14	210	21.8	212	5.8	211	2.2	211	0.6
15	222	1.4	222	1.8	219	1.8	216	1.9
16	223	0.0	224	0.0	222	0.0	219	0.0
17	227	0.0	228	0.0	228	0.0	228	0.0
18	247	0.0	248	0.7	246	1.8	244	3.5
19	247	0.0	249	0.0	249	0.0	249	0.0
20	248	0.1	250	0.0	250	0.0	250	0.0
21	262	0.0	266	0.0	268	0.0	268	0.0
22	271	10.5	271	6.5	271	9.8	270	0.0
23	279	0.0	275	0.0	273	0.0	271	12.7
24	290	0.0	291	0.0	291	0.0	291	0.0
25	311	0.0	314	0.0	313	0.2	312	0.0
26	314	0.0	314	1.6	315	0.0	312	0.0
27	317	0.0	318	0.0	315	0.0	314	0.1
28	320	0.0	318	0.0	316	0.0	316	0.0
29	331	0.0	331	0.0	331	0.0	331	0.0
30	348	0.0	352	0.0	352	0.2	351	0.0
31	350	3.1	355	0.0	353	0.0	352	0.8
32	358	0.0	360	0.0	359	0.0	355	2.8
33	364	0.0	362	2.2	360	2.5	355	0.0
34	367	1.9	365	0.0	364	0.0	362	0.0
35	386	0.0	389	0.0	389	0.0	390	0.0
36	394	0.0	398	2.4	397	3.0	393	0.0
37	396	0.0	398	0.0	401	0.0	396	3.5
38	398	1.7	403	0.0	401	0.0	404	0.0
39	406	0.0	407	0.0	407	0.0	409	0.0
40	411	0.0	412	0.0	412	0.0	412	0.0
41	420	0.0	421	0.0	420	0.0	419	0.0
42	426	0.0	432	0.0	431	0.0	432	0.0
43	439	0.5	440	1.1	439	1.0	438	0.2
44	440	0.3	442	1.2	442	2.1	441	1.9
45	452	0.0	455	0.0	453	0.0	451	0.0
46	457	0.0	456	0.0	454	0.0	452	0.0
47	474	0.0	474	0.0	475	0.0	474	0.0
48	481	6.1	482	2.6	481	0.0	481	0.1
49	489	12.5	492	0.4	491	3.4	490	19.3
50	508	0.0	508	0.0	508	0.0	504	0.1
51	510	0.9	516	0.6	509	0.1	508	0.0
52	518	0.0	518	1.9	519	2.2	519	3.7

continued on next page

Table 1 - continued from previous page

Numb. of the mode	Anion		Neutral		Cation		Dication	
	Freq. (cm^{-1})	Int. (km mol^{-1})	Freq. (cm^{-1})	Int. (km mol^{-1})	Freq. (cm^{-1})	Int. (km mol^{-1})	Freq. (cm^{-1})	Int. (km mol^{-1})
53	519	0.7	519	0.2	519	0.1	520	0.7
54	530	0.0	531	0.0	531	0.0	531	0.0
55	541	0.0	544	0.0	546	0.0	548	0.0
56	547	0.3	548	0.0	549	0.0	549	0.0
57	550	0.0	553	0.0	552	0.0	550	0.0
58	556	0.0	561	0.0	560	0.0	557	16.0
59	563	7.0	565	9.0	560	12.4	559	0.0
60	565	0.0	567	0.0	567	0.0	565	0.0
61	567	0.0	568	0.0	569	0.0	571	0.0
62	570	0.0	573	0.0	573	0.0	572	0.0
63	573	0.0	574	0.0	574	0.0	574	0.0
64	579	0.2	580	0.0	580	0.0	579	0.0
65	584	0.1	585	0.3	585	0.0	584	0.5
66	598	0.0	598	0.0	599	0.9	598	0.0
67	599	14.2	601	0.0	600	0.0	599	2.3
68	600	0.3	602	16.1	604	17.5	604	0.0
69	600	0.0	606	0.0	605	0.0	605	0.0
70	602	0.0	606	0.0	606	0.0	606	17.6
71	608	0.0	611	0.0	607	0.0	607	0.0
72	612	0.0	614	0.0	612	0.0	610	0.0
73	617	5.3	619	4.2	618	3.8	616	4.8
74	623	0.0	621	0.0	623	0.0	624	0.0
75	633	13.9	632	3.7	634	1.1	634	0.1
76	635	0.0	636	0.0	636	0.0	636	0.0
77	641	6.5	643	0.6	642	1.3	642	1.6
78	645	0.0	645	0.0	645	0.0	644	0.0
79	655	0.0	656	0.0	657	0.0	656	0.0
80	675	2.7	677	3.4	674	4.0	671	5.1
81	680	0.0	681	0.0	682	0.0	682	0.0
82	682	0.0	682	0.0	683	0.0	684	0.0
83	683	0.0	688	0.0	688	0.1	687	0.0
84	688	0.0	690	0.0	689	0.0	690	0.0
85	689	0.4	690	1.0	690	0.0	690	0.0
86	693	0.0	695	0.0	694	0.0	693	0.0
87	703	4.2	706	5.3	706	7.0	705	8.6
88	707	0.0	709	0.0	708	0.0	706	0.0
89	715	0.0	718	0.0	717	0.0	715	0.0
90	715	0.0	718	0.0	719	0.0	720	0.0
91	731	0.0	732	0.0	729	0.0	727	0.0
92	731	0.9	733	0.0	733	1.0	732	4.9
93	739	0.0	742	0.0	742	0.0	742	0.0
94	748	6.5	749	7.3	746	7.6	744	8.2
95	754	0.0	761	0.0	761	0.0	761	0.0
96	762	0.0	764	0.1	764	0.2	764	0.7
97	764	0.0	769	0.0	768	0.0	766	0.0
98	765	0.0	771	0.0	769	0.0	769	0.0
99	769	0.0	775	0.8	772	0.3	771	0.8
100	771	2.2	777	0.0	774	0.0	771	0.0
101	773	0.0	777	0.0	777	1.6	775	0.4
102	775	0.0	778	3.7	780	0.0	778	0.0
103	776	0.0	782	0.0	781	0.0	780	0.0
104	776	32.1	784	0.0	783	0.0	782	0.0
105	778	0.8	785	0.0	790	0.0	797	0.0
106	782	0.0	787	48.2	794	57.0	799	62.7

continued on next page

Table 1 - continued from previous page

Numb. of the mode	Anion		Neutral		Cation		Dication	
	Freq. (cm^{-1})	Int. (km mol^{-1})	Freq. (cm^{-1})	Int. (km mol^{-1})	Freq. (cm^{-1})	Int. (km mol^{-1})	Freq. (cm^{-1})	Int. (km mol^{-1})
107	782	0.0	791	0.0	802	0.0	812	0.0
108	790	0.0	800	0.0	809	0.0	818	0.0
109	793	0.0	810	0.0	818	0.0	825	13.8
110	802	1.3	815	2.0	822	4.6	826	0.0
111	823	3.3	826	0.6	825	6.3	828	1.6
112	827	0.2	828	0.0	829	0.0	829	9.3
113	828	0.0	839	0.0	839	0.0	838	0.0
114	830	0.0	849	0.0	849	0.0	848	0.0
115	839	0.0	856	7.5	857	0.8	857	0.0
116	848	0.0	862	0.0	875	0.0	878	0.0
117	857	3.3	864	0.0	877	0.0	882	61.5
118	862	0.0	877	0.0	878	0.0	889	0.0
119	865	34.1	885	1.5	884	17.4	897	0.0
120	869	0.0	887	0.0	890	0.0	900	0.0
121	873	0.0	890	0.0	900	0.0	911	0.0
122	876	0.0	891	0.0	903	0.0	912	1.5
123	879	0.0	896	47.6	910	53.5	916	0.0
124	881	230.3	900	0.0	912	0.3	922	115.7
125	882	0.0	909	0.0	914	0.0	925	0.0
126	887	0.0	910	202.0	923	0.0	950	0.0
127	910	6.0	913	4.3	924	188.9	950	120.4
128	952	0.0	970	0.0	982	9.1	984	27.4
129	953	0.0	970	0.0	983	0.0	986	0.0
130	953	0.0	975	0.0	983	0.0	993	0.0
131	954	0.0	976	0.0	985	0.0	994	0.0
132	958	0.0	976	0.0	985	0.0	994	0.0
133	958	0.0	977	0.0	985	0.1	996	0.0
134	976	4.6	978	0.6	988	0.0	997	4.2
135	982	0.0	983	0.0	988	0.0	998	0.0
136	996	4.7	997	0.0	998	1.7	999	0.0
137	1001	0.5	1004	6.6	1004	3.5	1001	0.3
138	1012	0.0	1012	0.0	1015	0.0	1015	0.0
139	1027	0.0	1033	0.0	1032	0.0	1029	0.0
140	1035	0.0	1037	0.0	1039	0.0	1039	0.0
141	1051	0.0	1056	0.0	1054	0.0	1050	0.0
142	1078	0.1	1078	6.0	1082	5.0	1084	4.8
143	1078	1.0	1080	1.0	1085	2.4	1088	7.6
144	1100	0.0	1104	0.0	1107	0.0	1109	0.0
145	1130	4.2	1134	1.3	1136	7.8	1135	0.0
146	1130	17.1	1134	6.1	1138	1.4	1137	25.2
147	1140	0.0	1142	0.0	1147	0.0	1139	0.6
148	1144	1.6	1148	0.2	1152	3.7	1151	0.0
149	1150	0.0	1154	0.0	1158	0.0	1154	3.1
150	1160	3.5	1155	0.0	1168	9.5	1162	0.0
151	1162	0.9	1168	9.9	1171	13.1	1167	13.6
152	1164	0.0	1174	0.0	1175	0.0	1180	0.2
153	1169	0.0	1180	0.0	1178	0.0	1181	0.0
154	1184	0.0	1185	0.0	1190	0.0	1195	0.0
155	1191	0.0	1197	0.0	1196	0.0	1196	0.0
156	1193	7.7	1198	3.8	1198	130.8	1199	294.6
157	1193	229.0	1202	0.0	1198	82.7	1206	218.3
158	1198	0.0	1203	14.4	1204	0.0	1209	0.0
159	1206	14.6	1213	31.9	1213	93.8	1213	108.9
160	1214	4.9	1220	0.1	1220	20.9	1224	35.8

continued on next page

Table 1 - continued from previous page

Numb. of the mode	Anion		Neutral		Cation		Dication	
	Freq. (cm^{-1})	Int. (km mol^{-1})	Freq. (cm^{-1})	Int. (km mol^{-1})	Freq. (cm^{-1})	Int. (km mol^{-1})	Freq. (cm^{-1})	Int. (km mol^{-1})
161	1224	0.0	1228	0.0	1227	0.0	1226	0.0
162	1250	0.0	1253	0.0	1258	0.0	1259	0.0
163	1261	18.3	1259	2.7	1266	5.8	1265	114.2
164	1267	4.7	1269	0.0	1270	33.5	1270	277.3
165	1269	607.5	1270	6.4	1272	269.7	1273	22.7
166	1270	0.0	1274	0.1	1273	0.0	1274	0.0
167	1274	0.0	1280	22.7	1277	0.0	1274	0.0
168	1277	40.6	1283	0.0	1283	10.5	1284	0.0
169	1282	0.0	1287	0.0	1285	0.0	1285	8.0
170	1284	0.0	1288	0.0	1287	0.0	1285	0.0
171	1303	323.7	1300	1.6	1310	239.7	1308	0.0
172	1306	0.0	1311	0.0	1316	0.0	1319	45.4
173	1309	192.2	1319	5.2	1320	18.5	1325	35.7
174	1313	5.4	1320	1.6	1321	23.2	1325	0.0
175	1321	0.0	1327	0.0	1326	0.0	1327	0.0
176	1327	101.6	1338	0.0	1334	122.6	1331	935.1
177	1331	0.0	1344	0.0	1337	0.0	1340	84.2
178	1333	0.0	1345	5.4	1340	293.8	1351	631.0
179	1336	80.0	1353	0.0	1346	0.0	1352	0.0
180	1352	0.0	1354	0.9	1358	0.0	1361	56.7
181	1353	0.0	1364	0.0	1363	0.9	1363	0.0
182	1359	4.5	1365	5.0	1363	0.0	1366	0.0
183	1362	0.0	1367	3.2	1372	0.0	1372	0.0
184	1363	0.0	1372	0.0	1373	7.2	1373	23.0
185	1366	0.0	1376	3.4	1375	0.0	1378	0.0
186	1367	0.0	1376	0.0	1378	28.8	1380	0.0
187	1370	9.1	1381	0.0	1378	0.0	1380	38.9
188	1375	0.0	1385	7.8	1381	16.1	1384	28.5
189	1375	129.8	1387	11.1	1387	1.7	1385	5.7
190	1379	12.6	1389	0.0	1387	5.3	1386	46.6
191	1383	11.6	1391	3.8	1395	2.8	1396	0.0
192	1384	0.0	1394	0.0	1396	0.0	1397	0.1
193	1392	0.0	1397	0.0	1400	0.0	1400	0.0
194	1401	0.0	1404	0.5	1409	0.0	1410	0.0
195	1403	0.0	1406	0.0	1412	0.0	1412	0.0
196	1404	12.8	1413	0.1	1416	0.2	1417	0.0
197	1407	0.1	1415	0.0	1416	16.0	1427	155.8
198	1422	0.0	1424	0.0	1426	0.0	1428	0.1
199	1423	1.5	1428	1.0	1429	0.2	1428	0.0
200	1424	17.2	1433	0.0	1431	0.0	1429	0.0
201	1426	0.0	1439	0.0	1436	22.5	1432	13.9
202	1431	57.1	1440	1.2	1440	0.0	1437	0.0
203	1434	0.0	1443	0.0	1441	0.0	1442	0.0
204	1435	0.0	1443	0.4	1442	61.1	1445	139.7
205	1448	11.3	1455	0.0	1451	7.4	1452	0.0
206	1452	0.0	1464	0.0	1464	0.0	1453	26.6
207	1463	6.1	1468	0.0	1466	9.6	1467	81.5
208	1468	8.4	1474	1.6	1470	3.9	1468	20.1
209	1468	0.0	1480	0.0	1479	0.0	1471	0.0
210	1474	0.0	1481	0.0	1480	164.5	1480	0.0
211	1478	12.3	1482	4.7	1482	0.0	1485	0.0
212	1480	0.0	1483	0.0	1482	0.0	1485	315.4
213	1482	0.0	1491	0.0	1485	0.0	1488	0.0
214	1484	25.7	1502	4.7	1503	6.9	1510	136.1

continued on next page

Table 1 - continued from previous page

Numb. of the mode	Anion		Neutral		Cation		Dication	
	Freq. (cm^{-1})	Int. (km mol^{-1})	Freq. (cm^{-1})	Int. (km mol^{-1})	Freq. (cm^{-1})	Int. (km mol^{-1})	Freq. (cm^{-1})	Int. (km mol^{-1})
215	1515	49.7	1512	8.2	1520	2.5	1513	147.0
216	1516	6.8	1535	11.4	1522	80.9	1521	0.0
217	1526	0.0	1537	0.0	1530	0.0	1525	24.6
218	1527	0.0	1555	0.0	1539	0.0	1528	0.0
219	1542	0.7	1557	1.5	1544	2.2	1536	69.8
220	1546	0.0	1559	0.0	1548	0.0	1547	0.0
221	1561	0.0	1569	0.5	1561	5.3	1556	2.9
222	1564	5.5	1576	0.6	1568	0.0	1562	0.0
223	1565	34.0	1579	0.0	1569	0.0	1564	0.0
224	1571	0.0	1581	0.0	1570	263.6	1572	51.3
225	1577	226.5	1585	0.0	1579	0.0	1573	0.0
226	1580	85.5	1590	5.7	1579	78.9	1578	294.6
227	1583	0.0	1593	0.0	1581	209.6	1580	0.0
228	1585	0.0	1594	25.4	1585	70.6	1580	65.5
229	1588	10.5	1603	0.0	1586	0.0	1582	1246.2
230	1588	0.0	1608	26.8	1590	0.0	1596	24.3
231	1604	2.5	1609	18.4	1602	56.9	1599	0.0
232	1606	0.0	1614	0.0	1604	0.0	1601	0.0
233	3025	0.0	3043	0.0	3057	0.0	3064	0.0
234	3025	1.5	3043	3.7	3057	0.5	3064	0.0
235	3026	3.4	3043	5.3	3057	2.7	3066	3.3
236	3026	0.0	3044	0.0	3058	0.0	3066	0.0
237	3027	0.0	3044	0.0	3058	0.0	3069	0.0
238	3027	0.7	3045	1.2	3058	34.0	3069	1.9
239	3029	123.9	3045	37.8	3059	15.8	3069	16.8
240	3029	0.0	3046	0.0	3060	0.0	3069	0.0
241	3030	0.0	3046	0.0	3061	0.0	3072	0.0
242	3030	36.3	3047	22.5	3061	25.6	3072	0.5
243	3032	18.7	3048	53.8	3062	8.9	3073	1.5
244	3032	0.0	3048	0.0	3062	0.0	3073	0.0
245	3036	88.0	3049	43.3	3062	0.0	3073	0.0
246	3036	0.0	3049	0.0	3062	1.5	3073	0.1
247	3050	45.4	3066	34.0	3078	51.8	3088	27.4
248	3050	0.0	3066	0.0	3078	0.0	3088	0.0
249	3050	0.0	3066	0.0	3079	0.0	3089	0.0
250	3051	436.0	3066	236.2	3079	109.5	3089	37.6
251	3051	453.9	3066	249.0	3079	114.5	3089	32.5
252	3051	0.0	3067	0.0	3080	0.0	3089	0.0