

## Normal mode analysis (NMA)

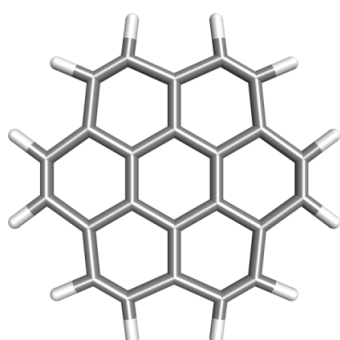
### 1. Calculation setup

The following setup is used.

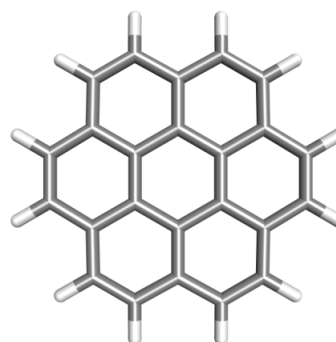
- Methods: GE00PT, NMA
- Potential: SMASH (b3lyp/cc-pvdz)
- System: Coronene ( $C_{24}H_{12}$ )

### 2. Results

The geometry optimization (GE00PT) must be done first. The geometry is optimized as follows.

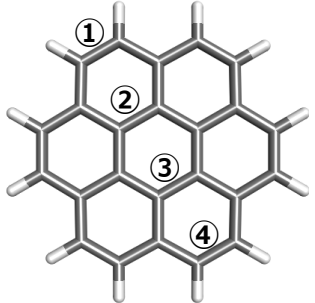


(a) initial structure



(b) optimized structure

The carbon bond distances are obtained as follows.

C-C bond length [Å]	(a) initial	(b) optimized
	1.115	1.375
	1.409	1.430
	1.409	1.430
	1.115	1.375

Next, the normal mode analysis (NMA) is done. The eigenvalues and the eigenvectors of the normal modes are printed in "nma.out" in a Gaussian-like format.

Standard orientation:										
Center Number	Atomic Number	Atomic Type	Coordinates (Angstroms)							
			X	Y	Z					
1	6	0	-1.238466	-0.715152	0.000000					
2	6	0	-1.238466	0.715152	0.000000					
3	6	0	0.000000	1.430010	0.000000					
4	6	0	1.238466	0.715152	0.000000					
5	6	0	1.238466	-0.715152	0.000000					
6	6	0	0.000000	-1.430010	0.000000					
7	6	0	-2.471511	-1.427080	0.000000					
8	6	0	-2.471511	1.427080	0.000000					
9	6	0	0.000000	2.854059	0.000000					
...omitted...										
35	1	0	-3.389026	3.397836	0.000000					
36	1	0	-1.246508	4.633954	0.000000					

Harmonic frequencies (cm <sup>-1</sup> ), IR intensities (KM/Mole), Raman scattering activities (A <sup>4</sup> /AMU), Raman depolarization ratios, reduced masses (AMU), force constants (mDyne/A) and normal coordinates:										
		1			2			3		
		?A			?A			?A		
Frequencies --		0.0000			0.0000			0.0000		
Red. masses --		8.1077			7.1737			6.6919		
Frc consts --		0.0000			0.0000			0.0000		
IR inten --		0.0000			0.0000			0.0000		
Raman Activ --		0.0000			0.0000			0.0000		
Depolar --		0.0000			0.0000			0.0000		
Atom AN		X	Y	Z	X	Y	Z	X	Y	Z
1	6	-0.02	0.15	0.00	-0.09	-0.06	-0.05	0.01	0.01	-0.16
2	6	-0.02	0.15	0.00	-0.13	-0.06	-0.04	0.03	0.01	-0.12
3	6	-0.02	0.15	0.03	-0.15	-0.02	-0.02	0.04	-0.01	-0.05
4	6	-0.02	0.16	0.05	-0.13	0.02	-0.01	0.03	-0.02	-0.02
5	6	-0.02	0.16	0.05	-0.09	0.02	-0.02	0.01	-0.02	-0.06
6	6	-0.02	0.15	0.03	-0.07	-0.02	-0.04	0.00	-0.01	-0.13
7	6	-0.02	0.15	-0.02	-0.07	-0.09	-0.07	0.00	0.03	-0.23
8	6	-0.02	0.15	-0.02	-0.15	-0.09	-0.05	0.04	0.03	-0.14
9	6	-0.03	0.15	0.03	-0.20	-0.02	-0.01	0.06	-0.01	0.00
10	6	-0.02	0.16	0.07	-0.15	0.05	0.01	0.04	-0.04	0.05
11	6	-0.02	0.16	0.07	-0.07	0.05	-0.01	0.00	-0.04	-0.03
12	6	-0.01	0.15	0.03	-0.03	-0.02	-0.05	-0.02	-0.01	-0.17
13	6	-0.03	0.16	0.05	-0.22	0.02	0.01	0.07	-0.02	0.06
14	6	-0.03	0.16	0.07	-0.20	0.05	0.02	0.06	-0.04	0.09
15	6	-0.02	0.16	0.10	-0.13	0.09	0.02	0.03	-0.06	0.08
16	6	-0.02	0.16	0.10	-0.09	0.09	0.01	0.01	-0.06	0.04
17	6	-0.01	0.16	0.07	-0.03	0.05	-0.02	-0.02	-0.04	-0.08
18	6	-0.01	0.16	0.05	-0.01	0.02	-0.04	-0.03	-0.02	-0.14
19	6	-0.01	0.15	-0.02	-0.03	-0.09	-0.08	-0.02	0.03	-0.27
20	6	-0.01	0.15	0.00	-0.01	-0.06	-0.07	-0.03	0.01	-0.24
21	6	-0.02	0.15	-0.05	-0.09	-0.13	-0.08	0.01	0.05	-0.25
22	6	-0.02	0.15	-0.05	-0.13	-0.13	-0.07	0.03	0.05	-0.21
23	6	-0.03	0.15	-0.02	-0.20	-0.09	-0.04	0.06	0.03	-0.10
24	6	-0.03	0.15	0.00	-0.22	-0.06	-0.02	0.07	0.01	-0.03
25	1	-0.03	0.16	0.05	-0.25	0.02	0.02	0.08	-0.02	0.10
26	1	-0.03	0.16	0.09	-0.21	0.08	0.04	0.07	-0.05	0.14

27	1	-0.02	0.17	0.12	-0.15	0.12	0.04	0.03	-0.07	0.13
28	1	-0.02	0.17	0.12	-0.08	0.12	0.02	0.00	-0.07	0.06
29	1	-0.01	0.16	0.09	-0.01	0.08	-0.01	-0.03	-0.05	-0.06
30	1	-0.01	0.16	0.05	0.03	0.02	-0.05	-0.05	-0.02	-0.18
31	1	-0.01	0.15	-0.04	-0.01	-0.12	-0.09	-0.03	0.04	-0.32
32	1	-0.01	0.15	0.00	0.03	-0.06	-0.08	-0.05	0.01	-0.27
33	1	-0.02	0.14	-0.07	-0.08	-0.16	-0.09	0.00	0.06	-0.31
34	1	-0.02	0.14	-0.07	-0.15	-0.16	-0.08	0.03	0.06	-0.23
35	1	-0.03	0.15	-0.04	-0.21	-0.12	-0.05	0.07	0.04	-0.12
36	1	-0.03	0.15	0.00	-0.25	-0.06	-0.01	0.08	0.01	0.00
...omitted...										

The lowest frequency mode is obtained as follows.

