

# Appendix A

## Wavelengths and Relative Intensities of Vibrational Modes

Computed frequencies (wave numbers) are scaled with mode-dependent scaling factors (0.974 for C-H<sub>oop</sub>, 0.972 for C-H<sub>in-plane</sub> and C-C<sub>stretching</sub> and 0.965 for C-H<sub>stretching</sub>) and converted into wavelength ( $\lambda$ ) for comparing the band position with observation. In chapter 4 and 5, intensities of the 3.3  $\mu\text{m}$  features are scaled (scaling factor  $\sim 0.6372$ ). Characteristic vibrational modes corresponding to 3-20  $\mu\text{m}$  with relative intensities ( $\text{Int}_{\text{rel}}$ ) above 0.05 are presented in tables below. The tables correspond to those molecules for which tables are not given in the corresponding chapter.

## A.1 Sample molecules studied in chapter 2

Table A.1: Theoretical spectral data for neutral pyrene, pyrene cation, deuterated pyrene and protonated pyrene

Neutral Pyrene		Pyrene Cation		Deuterated Pyrene		Protonated Pyrene	
$\lambda$ ( $\mu\text{m}$ )	Int <sub>rel</sub>	$\lambda$ ( $\mu\text{m}$ )	Int <sub>rel</sub>	$\lambda$ ( $\mu\text{m}$ )	Int <sub>rel</sub>	$\lambda$ ( $\mu\text{m}$ )	Int <sub>rel</sub>
14.12	0.42	14.81	0.05	15.49	0.08	13.82	0.23
13.57	0.15	14.70	0.26	14.64	0.14	11.92	0.51
11.95	1.00	11.71	0.51	13.89	0.60	10.69	0.10
9.29	0.07	10.37	0.06	13.16	0.09	10.65	0.18
8.57	0.13	10.24	0.09	12.17	0.45	10.14	0.13
7.69	0.06	9.22	0.08	12.09	0.62	9.56	0.19
7.08	0.09	8.35	0.12	11.43	0.07	8.80	0.06
6.31	0.14	8.17	0.44	11.30	0.08	8.53	0.15
3.28	0.21	7.51	0.65	11.05	0.12	8.10	0.09
3.27	0.76	7.10	0.22	9.29	0.11	7.82	1.00
3.26	0.69	7.04	0.16	8.65	0.08	7.53	0.67
		6.50	1.00	8.59	0.07	7.47	0.23
		6.49	0.15	8.29	0.04	7.20	0.14
				7.74	0.05	7.10	0.50
				7.10	0.11	7.01	0.10
				7.07	0.05	6.86	0.40
				6.98	0.06	6.67	0.29
				6.80	0.06	6.47	0.77
				6.31	0.20	6.29	0.24
				6.29	0.06	6.23	0.55
				4.44	0.13	3.51	0.05
				3.28	0.28	3.50	0.29
				3.28	0.41		
				3.27	0.57		
				3.26	1.00		
				3.26	0.05		

Table A.2: Theoretical spectral data for neutral perylene, perylene cation, deuterated perylene and protonated perylene

Neutral Perylene		Perylene Cation		Deuterated Perylene		Protonated Perylene	
$\lambda$ ( $\mu\text{m}$ )	Int <sub>rel</sub>	$\lambda$ ( $\mu\text{m}$ )	Int <sub>rel</sub>	$\lambda$ ( $\mu\text{m}$ )	Int <sub>rel</sub>	$\lambda$ ( $\mu\text{m}$ )	Int <sub>rel</sub>
18.00	0.07	13.24	0.28	18.00	0.15	17.76	0.05
12.85	0.54	12.08	0.43	17.08	0.05	13.33	0.05
12.44	0.07	9.57	0.07	16.68	0.05	13.24	0.18
12.07	1.00	8.72	0.07	13.91	0.27	12.90	0.28
7.41	0.07	8.20	0.19	12.90	1.00	12.22	0.08
6.61	0.05	7.67	0.55	12.78	0.10	12.16	0.08
6.28	0.08	7.41	0.73	12.69	0.06	10.49	0.10
6.22	0.19	7.12	0.17	12.27	0.73	10.42	0.10
6.18	0.08	6.40	1.00	11.76	0.87	8.89	0.11
3.26	0.07	6.39	0.13	11.64	0.16	7.91	0.10
3.24	0.97	3.19	0.06	10.82	0.08	7.85	0.15
3.24	0.25			9.51	0.05	7.82	0.77
3.23	0.26			7.90	0.06	7.55	0.30
3.21	0.62			7.42	0.13	7.44	0.26
				7.32	0.12	7.41	0.08
				7.20	0.51	7.34	0.16
				6.81	0.05	7.27	0.28
				6.61	0.11	7.13	0.49
				6.29	0.21	6.97	0.07
				6.24	0.06	6.72	0.14
				6.22	0.25	6.50	0.17
				6.18	0.17	6.44	1.00
				4.36	0.12	6.34	0.08
				3.26	0.14	6.31	0.17
				3.24	0.72	6.30	0.25
				3.24	0.91	3.51	0.15
				3.24	0.56	3.25	0.06
				3.23	0.64		
				3.23	0.30		
				3.22	0.45		
				3.21	0.62		

Table A.3: Theoretical spectral data for neutral coronene, coronene cation, deuterated coronene and protonated coronene

Neutral Coronene		Coronene Cation		Deuterated Coronene		Protonated Coronene	
$\lambda$ ( $\mu\text{m}$ )	Int <sub>rel</sub>	$\lambda$ ( $\mu\text{m}$ )	Int <sub>rel</sub>	$\lambda$ ( $\mu\text{m}$ )	Int <sub>rel</sub>	$\lambda$ ( $\mu\text{m}$ )	Int <sub>rel</sub>
18.12	0.26	18.03	0.08	18.23	0.29	18.19	0.14
11.76	1.00	12.75	0.09	13.25	0.05	11.51	0.60
8.93	0.06	11.48	0.36	13.13	0.05	10.31	0.06
7.71	0.16	8.84	0.07	12.27	0.06	10.05	0.12
6.23	0.07	8.42	0.07	11.83	1.00	8.89	0.08
3.27	0.73	8.29	0.05	11.17	0.16	8.72	0.06
		8.29	0.18	8.94	0.08	8.69	0.13
		7.34	0.58	7.75	0.17	8.37	0.11
		7.26	0.10	7.72	0.21	8.30	0.21
		6.75	0.12	6.25	0.05	8.28	0.14
		6.42	1.00	6.23	0.08	7.70	0.06
				4.44	0.10	7.67	0.05
				3.29	0.05	7.53	1.00
				3.28	0.13	7.49	0.25
				3.27	0.53	7.43	0.37
				3.27	0.97	7.39	0.29
				3.27	0.14	7.34	0.21
						7.23	0.08
						7.18	0.07
						7.15	0.06
						6.67	0.05
						6.65	0.59
						6.58	0.14
						6.50	0.30
						6.37	0.48
						6.31	0.34
						6.27	0.48
						6.25	0.17
						6.20	0.54
						3.48	0.08

Table A.4: Theoretical spectral data for DcorD<sup>+</sup> and deuterated circumcoronene

<b>DcorD<sup>+</sup></b>		<b>Deuterated Circumcoronene</b>	
$\lambda$ ( $\mu\text{m}$ )	Int <sub>rel</sub>	$\lambda$ ( $\mu\text{m}$ )	Int <sub>rel</sub>
19.48	0.08	12.81	0.10
18.31	0.18	11.20	0.12
12.53	0.05	11.11	0.16
12.31	0.13	8.77	0.09
12.01	0.10	8.72	0.10
11.55	0.21	8.68	0.12
11.51	0.86	8.67	0.05
8.88	0.17	8.63	0.15
8.81	0.08	8.52	0.10
8.75	0.09	8.16	0.07
8.72	0.16	7.92	0.13
8.69	0.26	7.91	0.11
8.53	0.07	7.88	0.14
8.46	0.49	7.68	1.00
8.33	0.48	7.56	0.30
8.30	0.20	7.52	0.08
8.28	0.25	7.43	0.12
8.17	0.05	7.20	0.07
7.82	0.08	6.71	0.08
7.74	0.08	6.62	0.07
7.53	0.74	6.48	0.33
7.50	0.97	6.43	0.12
7.41	0.88	6.42	0.06
7.38	0.17	6.35	0.16
7.28	0.42	6.33	0.05
7.18	0.16	6.33	0.54
7.17	0.10	6.30	0.17
7.02	0.06	6.29	0.33
6.97	0.10	6.25	0.22
6.82	0.07	6.21	0.08
6.67	0.51	3.26	0.05
6.66	0.91	3.25	0.11
6.59	0.30		
6.51	0.58		
6.40	0.60		
6.32	0.93		

*Continued on next page*

Table A.4 – *Continued from previous page*

6.27	0.82
6.25	0.51
6.21	1.00
4.74	0.07
3.48	0.08
3.25	0.05
3.25	0.08

## A.2 Sample molecules studied in chapter 3

Table A.5: Theoretical spectral data for neutral ovalene and ovalene cation

Neutral Ovalene		Ovalene Cation	
$\lambda$ ( $\mu\text{m}$ )	Int <sub>rel</sub>	$\lambda$ ( $\mu\text{m}$ )	Int <sub>rel</sub>
18.45	0.10	18.84	0.06
16.09	0.21	16.18	0.09
12.09	0.46	11.85	0.28
11.47	0.77	11.15	0.30
8.71	0.11	8.55	0.36
8.15	0.12	8.17	0.36
7.94	0.05	7.97	0.07
7.72	0.12	7.77	0.11
7.30	0.06	7.55	1.00
7.14	0.05	7.29	0.08
6.24	0.13	7.28	0.21
6.18	0.09	7.02	0.09
3.28	0.18	7.00	0.20
3.26	0.89	6.49	0.32
3.26	1.00	6.46	0.25
		6.32	0.68
		3.24	0.07
		3.24	0.12

Table A.6: Theoretical spectral data for deuterated ovalene (aromatic) and its isomers

<b>Deuterated Ovalene</b>		<b>Deuterated Ovalene (isomer 1)</b>	
$\lambda$ ( $\mu\text{m}$ )	Int <sub>rel</sub>	$\lambda$ ( $\mu\text{m}$ )	Int <sub>rel</sub>
18.48	0.07	19.15	0.11
18.44	0.06	16.07	0.20
16.28	0.24	11.99	0.78
12.11	0.55	11.49	0.45
11.66	0.19	8.71	0.11
11.51	0.54	8.15	0.12
11.12	0.19	7.94	0.05
8.65	0.05	7.74	0.12
8.15	0.15	7.29	0.07
7.94	0.06	7.13	0.05
7.79	0.05	6.24	0.12
7.71	0.09	6.18	0.09
7.29	0.06	4.44	0.08
7.13	0.06	3.28	0.06
6.24	0.09	3.28	0.05
6.23	0.07	3.26	0.85
6.18	0.11	3.26	1.00
4.43	0.12		
3.28	0.21		
3.27	0.21		
3.26	0.13		
3.26	0.52		
3.26	1.00		
3.26	0.25		
<b>Deuterated Ovalene (isomer 2)</b>		<b>Deuterated Ovalene (isomer 3)</b>	
$\lambda$ ( $\mu\text{m}$ )	Int <sub>rel</sub>	$\lambda$ ( $\mu\text{m}$ )	Int <sub>rel</sub>
18.66	0.12	18.48	0.13
16.10	0.20	16.30	0.25
15.97	0.07	13.03	0.06
13.02	0.05	13.01	0.05
12.17	0.46	12.49	0.21
12.02	0.13	12.37	0.11
11.52	0.40	12.02	0.23
11.49	0.61	11.51	0.34
11.16	0.20	11.50	0.62
10.81	0.06	11.23	0.29

*Continued on next page*

Table A.6 – *Continued from previous page*

8.75	0.05	8.70	0.19
8.70	0.10	8.17	0.17
8.65	0.06	7.95	0.10
8.18	0.15	7.72	0.13
7.99	0.06	7.71	0.08
7.74	0.11	7.67	0.05
7.71	0.11	7.32	0.08
7.33	0.05	7.02	0.05
7.29	0.11	6.25	0.19
7.13	0.09	6.18	0.16
6.60	0.05	4.43	0.15
6.25	0.09	3.28	0.05
6.24	0.13	3.28	0.09
6.18	0.15	3.28	0.05
4.42	0.11	3.27	0.15
3.28	0.18	3.26	0.55
3.27	0.15	3.26	1.00
3.26	0.15	3.26	0.28
3.26	0.47		
3.26	1.00		
3.26	0.15		

Table A.7: Theoretical spectral data for deuterated ovalene (aliphatic) and its isomers

Deuterated Ovalene		Deuterated Ovalene (isomer 1)	
$\lambda$ ( $\mu\text{m}$ )	Int <sub>rel</sub>	$\lambda$ ( $\mu\text{m}$ )	Int <sub>rel</sub>
19.62	0.07	18.72	0.07
16.46	0.14	16.40	0.12
15.66	0.05	16.24	0.08
15.52	0.06	16.02	0.07
13.29	0.05	12.38	0.33
12.23	0.51	11.99	0.66
11.82	0.70	11.81	0.06
11.67	0.44	11.57	0.78
8.77	0.17	11.29	0.13
8.58	0.05	10.95	0.08
8.22	0.16	8.77	0.05

*Continued on next page*



Table A.7 – Continued from previous page

7.96	0.05	8.73	0.08
7.92	0.09	8.64	0.07
7.87	0.14	8.21	0.13
7.57	0.06	8.03	0.06
7.55	0.09	8.00	0.07
7.48	0.05	7.76	0.08
7.13	0.07	7.71	0.10
6.73	0.11	7.59	0.10
6.62	0.06	7.44	0.07
6.26	0.16	7.40	0.05
4.73	0.13	7.32	0.11
3.47	0.18	7.02	0.06
3.29	0.18	6.38	0.06
3.28	0.06	6.28	0.06
3.28	0.05	6.24	0.14
3.26	0.13	6.21	0.10
3.26	0.53	4.77	0.20
3.26	1.00	3.50	0.30
3.26	0.09	3.29	0.14
		3.28	0.08
		3.28	0.09
		3.28	0.08
		3.28	0.06
		3.26	0.20
		3.26	0.45
		3.26	1.00
		3.26	0.22
<b>Deuterated Ovalene (isomer 2)</b>		<b>Deuterated Ovalene (isomer 3)</b>	
$\lambda$ ( $\mu\text{m}$ )	Int <sub>rel</sub>	$\lambda$ ( $\mu\text{m}$ )	Int <sub>rel</sub>
18.61	0.09	18.64	0.16
16.48	0.25	16.40	0.20
14.30	0.09	16.05	0.09
12.34	0.38	13.10	0.10
12.03	0.32	12.60	0.44
11.86	0.72	12.11	0.16
11.74	0.06	12.04	0.12
11.63	0.05	11.74	0.77
11.50	0.79	11.65	0.21
10.31	0.07	11.50	0.69

*Continued on next page*

Table A.7 – Continued from previous page

9.78	0.06	11.49	0.14
8.78	0.05	11.40	0.10
8.72	0.11	11.24	0.05
8.15	0.20	9.80	0.05
8.00	0.07	9.52	0.06
7.79	0.14	8.74	0.24
7.73	0.07	8.68	0.09
7.67	0.16	8.17	0.17
7.32	0.14	8.00	0.12
7.32	0.06	7.95	0.08
7.14	0.05	7.87	0.05
6.71	0.07	7.77	0.10
6.61	0.06	7.73	0.13
6.52	0.06	7.68	0.14
6.26	0.09	7.36	0.07
6.23	0.12	6.81	0.07
6.18	0.09	6.62	0.06
4.79	0.30	6.42	0.09
3.52	0.44	6.35	0.05
3.29	0.12	6.25	0.13
3.28	0.05	6.22	0.20
3.27	0.34	4.80	0.35
3.27	0.25	3.52	0.53
3.26	0.47	3.29	0.16
3.26	1.00	3.28	0.06
3.26	0.45	3.28	0.07
		3.28	0.20
		3.28	0.07
		3.28	0.06
		3.26	0.29
		3.26	0.48
		3.26	1.00
		3.26	0.61

Table A.8: Theoretical spectral data for deuterated ovalene cation (aromatic) and its isomers

Deuterated Ovalene Cation		Deuterated Ovalene Cation (isomer 1)	
$\lambda$ ( $\mu\text{m}$ )	Int <sub>rel</sub>	$\lambda$ ( $\mu\text{m}$ )	Int <sub>rel</sub>
18.84	0.06	18.83	0.07
16.43	0.08	16.35	0.09
12.22	0.08	11.87	0.28
12.11	0.06	11.18	0.18
11.77	0.10	10.86	0.08
11.16	0.20	8.55	0.40
10.91	0.08	8.18	0.35
8.56	0.34	7.98	0.09
8.19	0.27	7.80	0.11
7.98	0.06	7.56	1.00
7.79	0.14	7.35	0.09
7.55	1.00	7.28	0.11
7.31	0.07	7.27	0.12
7.30	0.05	7.06	0.07
7.29	0.10	7.01	0.18
7.01	0.28	6.99	0.07
6.49	0.31	6.49	0.36
6.46	0.22	6.48	0.20
6.32	0.66	6.46	0.05
3.24	0.06	6.33	0.65
3.24	0.05	6.30	0.05
Deuterated Ovalene Cation (isomer 2)		Deuterated Ovalene Cation (isomer 3)	
$\lambda$ ( $\mu\text{m}$ )	Int <sub>rel</sub>	$\lambda$ ( $\mu\text{m}$ )	Int <sub>rel</sub>
19.01	0.06	19.39	0.06
16.15	0.09	16.24	0.05
11.94	0.17	11.74	0.41
11.78	0.06	11.18	0.17
11.18	0.21	8.53	0.20
10.90	0.06	8.19	0.50
8.57	0.35	7.97	0.08
8.19	0.24	7.80	0.10
8.02	0.08	7.55	1.00
7.77	0.11	7.43	0.07
7.55	1.00	7.28	0.23
7.31	0.08	7.09	0.05
7.28	0.20	7.02	0.09

*Continued on next page*

Table A.8 – *Continued from previous page*

7.03	0.16	7.00	0.21
7.00	0.08	6.49	0.21
6.99	0.07	6.49	0.33
6.49	0.32	6.32	0.70
6.47	0.10	3.24	0.07
6.46	0.14	3.24	0.12
6.33	0.55		
6.30	0.09		
3.24	0.08		

Table A.9: Theoretical spectral data for deuterated ovalene and its isomers

Deuterated Ovalene		Deuterated Ovalene (isomer 1)			
$\lambda$ ( $\mu\text{m}$ )	Int <sub>rel</sub>	$\lambda$ ( $\mu\text{m}$ )	Int <sub>rel</sub>	$\lambda$ ( $\mu\text{m}$ )	Int <sub>rel</sub>
15.98	0.09	18.69	0.05	7.27	0.15
11.92	0.20	16.00	0.06	7.22	0.29
11.48	0.21	12.04	0.05	7.21	0.09
10.89	0.12	11.86	0.28	7.07	0.06
8.75	0.12	11.75	0.09	7.05	0.12
8.72	0.13	11.70	0.08	7.03	0.05
8.47	0.49	11.52	0.06	7.01	0.08
8.27	0.07	11.24	0.07	6.93	0.06
8.25	0.42	11.14	0.34	6.81	0.42
8.17	0.10	10.74	0.06	6.76	0.19
7.87	0.13	9.80	0.06	6.68	0.12
7.74	0.29	8.78	0.07	6.64	0.43
7.62	0.13	8.74	0.13	6.59	1.00
7.61	0.87	8.72	0.07	6.48	0.28
7.47	0.13	8.58	0.20	6.40	0.50
7.45	0.16	8.45	0.50	6.34	0.55
7.39	0.24	8.34	0.08	6.30	1.00
7.34	0.09	8.32	0.61	6.28	0.05
7.29	0.14	8.23	0.28	6.25	0.74
7.04	0.10	8.21	0.11	6.22	0.42
6.88	0.06	8.16	0.15	6.19	0.31
6.69	0.10	7.95	0.16	3.25	0.07
6.62	0.05	7.81	0.07	3.24	0.10
6.47	0.54	7.68	0.06	3.24	0.05

*Continued on next page*

Table A.9 – Continued from previous page

6.37	0.28	7.64	0.05
6.31	0.21	7.61	0.55
6.29	1.00	7.48	1.00
6.26	0.86	7.38	0.39
3.24	0.08	7.32	0.15
Deuterated Ovalene (isomer 2)		Deuterated Ovalene (isomer 3)	
$\lambda$ ( $\mu\text{m}$ )	Int <sub>rel</sub>	$\lambda$ ( $\mu\text{m}$ )	Int <sub>rel</sub>
16.55	0.06	12.39	0.09
12.16	0.11	11.76	0.08
11.77	0.14	11.51	0.05
11.72	0.05	11.22	0.13
11.45	0.17	11.13	0.13
11.22	0.10	9.77	0.06
11.21	0.21	8.79	0.09
9.72	0.09	8.70	0.11
8.77	0.13	8.43	0.34
8.70	0.17	8.37	0.11
8.56	0.05	8.29	0.11
8.47	0.47	8.12	0.19
8.32	0.05	8.02	0.11
8.15	0.13	7.65	0.12
8.04	0.17	7.52	0.19
7.92	0.05	7.49	0.36
7.70	0.21	7.41	0.37
7.64	0.14	7.35	0.20
7.57	0.15	7.24	0.10
7.53	0.12	7.07	0.08
7.50	0.68	6.94	0.12
7.37	0.18	6.80	0.12
7.35	0.07	6.77	0.16
7.30	0.28	6.65	0.11
7.02	0.15	6.62	0.16
6.80	0.08	6.57	0.27
6.65	0.20	6.48	0.17
6.60	0.42	6.40	0.11
6.54	0.13	6.34	0.20
6.52	0.38	6.31	1.00
6.44	0.07	6.28	0.15
6.34	1.00	6.24	0.06

Continued on next page

Table A.9 – Continued from previous page

6.31	0.08	6.23	0.23
6.29	0.35	6.19	0.10
6.26	0.85	3.24	0.06
6.23	0.16		
6.19	0.17		
3.48	0.05		
3.25	0.07		
3.24	0.08		
3.24	0.06		

Table A.10: Theoretical spectral data for DovaleneD<sup>+</sup>, isomer of DovaleneD<sup>+</sup> and protonated ovalene

DovaleneD <sup>+</sup>		isomer of DovaleneD <sup>+</sup>				Protonated Ovalene	
$\lambda$ ( $\mu\text{m}$ )	Int <sub>rel</sub>	$\lambda$ ( $\mu\text{m}$ )	Int <sub>rel</sub>	$\lambda$ ( $\mu\text{m}$ )	Int <sub>rel</sub>	$\lambda$ ( $\mu\text{m}$ )	Int <sub>rel</sub>
16.06	0.07	19.14	0.05	6.82	0.48	15.93	0.07
11.92	0.21	16.16	0.08	6.77	0.11	11.83	0.32
11.59	0.08	11.90	0.08	6.68	0.13	11.08	0.08
11.54	0.05	11.86	0.27	6.65	0.62	10.89	0.12
10.90	0.06	11.72	0.20	6.60	0.91	8.75	0.11
10.83	0.11	11.71	0.09	6.48	0.27	8.71	0.12
8.74	0.12	11.14	0.22	6.42	0.80	8.47	0.50
8.71	0.06	11.07	0.06	6.35	0.77	8.27	0.07
8.47	0.56	10.76	0.09	6.30	1.00	8.24	0.34
8.37	0.10	10.43	0.08	6.26	0.73	8.16	0.10
8.26	0.07	8.77	0.07	6.22	0.46	7.87	0.12
8.25	0.42	8.74	0.14	6.19	0.36	7.73	0.28
8.16	0.07	8.72	0.08	3.25	0.05	7.62	0.12
7.88	0.16	8.51	0.63	3.24	0.08	7.60	0.95
7.74	0.31	8.40	0.25			7.45	0.16
7.67	0.06	8.32	0.66			7.40	0.08
7.61	0.77	8.23	0.37			7.37	0.18
7.50	0.46	8.22	0.05			7.35	0.16
7.45	0.17	7.96	0.24			7.29	0.14
7.41	0.23	7.83	0.13			7.28	0.07
7.34	0.10	7.72	0.13			7.24	0.08
7.29	0.15	7.69	0.14			7.04	0.09
7.04	0.09	7.62	0.56			6.88	0.05
6.97	0.06	7.49	0.90			6.69	0.10

Continued on next page

Table A.10 – Continued from previous page

6.90	0.07	7.41	0.21	6.62	0.05
6.73	0.05	7.38	0.40	6.46	0.54
6.71	0.06	7.32	0.22	6.41	0.05
6.48	0.58	7.27	0.20	6.37	0.28
6.38	0.43	7.23	0.33	6.31	0.19
6.33	0.26	7.09	0.12	6.29	1.00
6.30	0.99	7.05	0.13	6.26	0.86
6.26	1.00	7.03	0.07	3.24	0.06
6.21	0.05	7.01	0.05		
3.24	0.06	6.94	0.10		

### A.3 Sample molecules studied in chapter 4

Table A.11: Theoretical spectral data for  $\text{HC}_{24}\text{H}_{12}$ ,  $\text{C}_{24}\text{H}_{11}\text{-CH}_3$ ,  $\text{C}_{24}\text{H}_{11}\text{-CH}_2\text{-CH}_3$  and  $\text{C}_{24}\text{H}_{11}\text{-CH=CH}_2$ 

$\text{HC}_{24}\text{H}_{12}$		$\text{C}_{24}\text{H}_{11}\text{-CH}_3$		$\text{C}_{24}\text{H}_{11}\text{-CH}_2\text{-CH}_3$		$\text{C}_{24}\text{H}_{11}\text{-CH=CH}_2$	
$\lambda$ ( $\mu\text{m}$ )	Int <sub>rel</sub>	$\lambda$ ( $\mu\text{m}$ )	Int <sub>rel</sub>	$\lambda$ ( $\mu\text{m}$ )	Int <sub>rel</sub>	$\lambda$ ( $\mu\text{m}$ )	Int <sub>rel</sub>
18.51	0.28	18.32	0.17	18.27	0.20	18.33	0.16
12.39	0.13	17.52	0.14	17.96	0.06	17.80	0.11
11.93	1.00	13.02	0.09	13.05	0.09	13.64	0.06
10.13	0.06	12.33	0.06	12.33	0.07	13.04	0.08
8.94	0.06	11.82	1.00	11.83	1.00	11.80	1.00
8.89	0.06	11.36	0.42	11.27	0.30	11.25	0.36
7.81	0.12	8.87	0.08	9.59	0.13	10.79	0.25
7.74	0.10	8.81	0.05	8.87	0.08	10.01	0.10
7.67	0.09	7.73	0.19	7.73	0.19	9.97	0.11
6.22	0.06	7.64	0.25	7.66	0.26	8.86	0.06
3.53	0.10	6.92	0.09	6.86	0.05	8.81	0.05
3.52	0.30	6.85	0.06	6.80	0.07	7.75	0.14
3.29	0.06	6.77	0.05	6.73	0.05	7.65	0.21
3.28	0.07	6.73	0.05	6.24	0.05	6.25	0.05
3.26	0.06	6.23	0.07	6.21	0.16	6.22	0.10
3.26	0.24	6.20	0.23	3.42	0.28	6.09	0.17
3.26	0.52	3.43	0.29	3.41	0.20	3.32	0.10
3.26	0.14	3.38	0.13	3.35	0.35	3.28	0.09

Continued on next page

Table A.11 – Continued from previous page

	3.33	0.12	3.34	0.20	3.27	0.08
	3.28	0.10	3.29	0.12	3.26	0.12
	3.28	0.06	3.27	0.05	3.26	0.56
	3.27	0.06	3.26	0.05	3.26	0.24
	3.26	0.11	3.26	0.08	3.22	0.07
	3.26	0.62	3.26	0.55	3.21	0.10
	3.26	0.28	3.26	0.29		
	3.24	0.14	3.24	0.15		

Table A.12: Theoretical spectral data for DC<sub>24</sub>H<sub>12</sub>, C<sub>24</sub>H<sub>11</sub>-CH<sub>2</sub>D, C<sub>24</sub>H<sub>11</sub>-CH<sub>2</sub>-CH<sub>2</sub>D and C<sub>24</sub>H<sub>11</sub>-CH=CHD

DC <sub>24</sub> H <sub>12</sub>		C <sub>24</sub> H <sub>11</sub> -CH <sub>2</sub> D		C <sub>24</sub> H <sub>11</sub> -CH <sub>2</sub> -CH <sub>2</sub> D		C <sub>24</sub> H <sub>11</sub> -CH=CHD	
$\lambda$ ( $\mu\text{m}$ )	Int <sub>rel</sub>	$\lambda$ ( $\mu\text{m}$ )	Int <sub>rel</sub>	$\lambda$ ( $\mu\text{m}$ )	Int <sub>rel</sub>	$\lambda$ ( $\mu\text{m}$ )	Int <sub>rel</sub>
18.61	0.21	18.32	0.17	18.28	0.16	18.37	0.12
18.46	0.06	17.54	0.15	18.10	0.10	18.07	0.21
12.42	0.14	13.04	0.09	13.07	0.08	16.84	0.08
11.95	1.00	12.34	0.07	12.28	0.06	16.01	0.07
11.63	0.13	11.83	1.00	11.83	1.00	13.04	0.12
8.94	0.06	11.39	0.45	11.28	0.30	11.85	0.38
8.89	0.06	8.87	0.08	8.87	0.08	11.78	1.00
7.85	0.11	8.82	0.05	7.73	0.14	11.65	0.24
7.75	0.11	7.87	0.05	7.69	0.11	11.23	0.27
7.67	0.07	7.80	0.12	7.63	0.28	10.95	0.06
7.61	0.06	7.72	0.15	6.82	0.08	10.08	0.44
6.22	0.06	7.61	0.24	6.74	0.05	8.87	0.07
4.81	0.11	6.74	0.06	6.24	0.06	8.82	0.06
3.53	0.21	6.23	0.07	6.21	0.16	8.11	0.05
3.29	0.06	6.21	0.22	4.61	0.21	7.74	0.12
3.28	0.07	4.56	0.12	3.41	0.20	7.71	0.12
3.26	0.07	3.41	0.20	3.39	0.19	7.63	0.30
3.26	0.25	3.38	0.13	3.34	0.19	6.31	0.09
3.26	0.56	3.29	0.09	3.29	0.12	6.25	0.07
3.26	0.15	3.28	0.07	3.27	0.05	6.22	0.14
		3.27	0.06	3.26	0.06	6.22	0.05
		3.26	0.12	3.26	0.07	6.17	0.17
		3.26	0.65	3.26	0.55	3.31	0.16
		3.26	0.29	3.26	0.29	3.28	0.12

Continued on next page



Table A.12 – Continued from previous page

	3.24	0.15	3.24	0.15	3.28	0.05
					3.27	0.11
					3.26	0.18
					3.26	0.75
					3.26	0.31
					3.25	0.07
					3.22	0.06

Table A.13: Theoretical spectral data for  $\text{HC}_{24}\text{H}_{12}^+$ ,  $\text{C}_{24}\text{H}_{11}\text{-CH}_3^+$ ,  $\text{C}_{24}\text{H}_{11}\text{-CH}_2\text{-CH}_3^+$  and  $\text{C}_{24}\text{H}_{11}\text{-CH=CH}_2^+$ 

$\text{HC}_{24}\text{H}_{12}^+$		$\text{C}_{24}\text{H}_{11}\text{-CH}_3^+$		$\text{C}_{24}\text{H}_{11}\text{-CH}_2\text{-CH}_3^+$		$\text{C}_{24}\text{H}_{11}\text{-CH=CH}_2^+$	
$\lambda$ ( $\mu\text{m}$ )	Int <sub>rel</sub>	$\lambda$ ( $\mu\text{m}$ )	Int <sub>rel</sub>	$\lambda$ ( $\mu\text{m}$ )	Int <sub>rel</sub>	$\lambda$ ( $\mu\text{m}$ )	Int <sub>rel</sub>
18.21	0.14	12.8667	0.06	12.88	0.05	13.09	0.09
11.48	0.59	11.6086	0.07	11.56	0.19	12.63	0.06
10.04	0.11	11.5622	0.18	11.06	0.06	12.37	0.13
8.88	0.07	11.1667	0.09	9.66	0.10	10.41	0.09
8.71	0.08	8.35652	0.05	8.26	0.14	9.33	0.07
8.68	0.11	8.23526	0.07	8.23	0.06	9.13	0.06
8.36	0.10	8.18914	0.10	7.73	0.05	8.95	0.17
8.29	0.18	7.72248	0.07	7.41	0.09	8.80	0.06
8.26	0.14	7.42027	0.07	7.38	0.57	8.68	0.06
8.20	0.05	7.36328	0.52	6.66	0.07	8.64	0.07
7.69	0.07	7.26522	0.07	6.40	1.00	8.48	0.15
7.51	1.00	7.10379	0.07			8.40	0.08
7.47	0.25	6.78339	0.05			8.34	0.17
7.42	0.31	6.69685	0.08			8.11	0.10
7.36	0.26	6.39587	1.00			7.87	0.17
7.33	0.19					7.78	0.50
7.23	0.06					7.76	0.24
7.16	0.07					7.68	0.13
7.14	0.05					7.55	0.13
6.95	0.05					7.54	0.49
6.66	0.05					7.20	0.25
6.64	0.52					7.12	0.07
6.57	0.14					7.06	0.06
6.49	0.31					7.02	0.06

Continued on next page

Table A.13 – Continued from previous page

6.36	0.45			6.88	0.09
6.29	0.36			6.79	0.24
6.26	0.44			6.73	0.46
6.24	0.19			6.57	0.36
6.20	0.49			6.41	1.00
3.47	0.05			6.39	0.11
				6.34	0.05
				6.30	0.13
				3.37	0.06
				3.32	0.05
				3.31	0.05
				3.30	0.05
				3.29	0.10
				3.29	0.24
				3.28	0.17
				3.22	0.07

Table A.14: Theoretical spectral data for  $\text{DC}_{24}\text{H}_{12}^+$ ,  $\text{C}_{24}\text{H}_{11}\text{-CH}_2\text{D}^+$ ,  $\text{C}_{24}\text{H}_{11}\text{-CH}_2\text{-CH}_2\text{D}^+$  and  $\text{C}_{24}\text{H}_{11}\text{-CH=CHD}^+$ 

$\text{DC}_{24}\text{H}_{12}^+$		$\text{C}_{24}\text{H}_{11}\text{-CH}_2\text{D}^+$		$\text{C}_{24}\text{H}_{11}\text{-CH}_2\text{-CH}_2\text{D}^+$		$\text{C}_{24}\text{H}_{11}\text{-CH=CHD}^+$	
$\lambda$ ( $\mu\text{m}$ )	Int <sub>rel</sub>	$\lambda$ ( $\mu\text{m}$ )	Int <sub>rel</sub>	$\lambda$ ( $\mu\text{m}$ )	Int <sub>rel</sub>	$\lambda$ ( $\mu\text{m}$ )	Int <sub>rel</sub>
18.25	0.20	12.87	0.06	11.56	0.19	11.54	0.15
12.11	0.09	11.57	0.17	11.12	0.05	10.26	0.18
11.57	0.18	11.21	0.10	10.12	0.08	9.17	0.06
11.46	0.78	8.24	0.13	8.26	0.15	8.27	0.10
10.77	0.11	8.23	0.05	7.68	0.07	7.82	0.11
9.83	0.09	7.42	0.07	7.40	0.09	7.43	0.06
9.32	0.07	7.36	0.51	7.37	0.55	7.38	0.40
8.88	0.12	7.27	0.07	6.66	0.07	6.71	0.10
8.80	0.05	7.11	0.06	6.40	1.00	6.65	0.05
8.71	0.13	6.80	0.06			6.56	0.07
8.69	0.25	6.70	0.08			6.41	1.00
8.45	0.48	6.40	1.00				
8.36	0.12						
8.29	0.37						
8.27	0.24						
8.20	0.10						

Continued on next page

Table A.14 – Continued from previous page

7.72	0.11			
7.66	0.10			
7.50	1.00			
7.48	0.68			
7.38	0.51			
7.34	0.44			
7.23	0.08			
7.17	0.15			
7.14	0.07			
6.95	0.10			
6.66	0.11			
6.64	0.93			
6.57	0.23			
6.49	0.52			
6.36	0.79			
6.30	0.63			
6.26	0.72			
6.24	0.36			
6.20	0.84			
3.24	0.05			

Table A.15: Theoretical spectral data for  $C_{24}H_{10}D-CH_3$ ,  $C_{24}H_{10}D-CH_3^+$ ,  $C_{24}H_{11}D-CH_3$  and  $C_{24}H_{11}D-CH_3^+$ 

$C_{24}H_{10}D-CH_3$		$C_{24}H_{10}D-CH_3^+$		$C_{24}H_{11}D-CH_3$		$C_{24}H_{11}D-CH_3^+$	
$\lambda$ ( $\mu\text{m}$ )	Int <sub>rel</sub>	$\lambda$ ( $\mu\text{m}$ )	Int <sub>rel</sub>	$\lambda$ ( $\mu\text{m}$ )	Int <sub>rel</sub>	$\lambda$ ( $\mu\text{m}$ )	Int <sub>rel</sub>
18.42	0.08	12.96	0.07	18.63	0.09	17.87	0.07
17.52	0.11	11.85	0.06	18.06	0.20	11.50	0.37
13.04	0.07	11.53	0.29	12.43	0.15	10.61	0.06
12.23	0.06	8.28	0.07	11.88	1.00	9.38	0.05
11.79	1.00	7.76	0.11	11.74	0.31	8.86	0.07
8.87	0.06	7.43	0.09	8.92	0.07	8.72	0.06
7.74	0.14	7.36	0.67	8.87	0.08	8.56	0.10
7.65	0.19	7.22	0.06	8.81	0.06	8.44	0.10
6.92	0.06	7.12	0.11	7.87	0.11	8.30	0.27
6.86	0.05	6.79	0.05	7.77	0.20	8.27	0.08
6.24	0.05	6.70	0.09	7.64	0.22	7.52	0.40
6.22	0.07	6.41	1.00	7.47	0.08	7.46	0.15

Continued on next page

Table A.15 – Continued from previous page

6.22	0.05	6.37	0.07	7.39	0.01	7.42	0.38
4.45	0.07			7.14	0.06	7.35	0.13
3.43	0.22			6.91	0.08	7.32	0.06
3.38	0.10			6.86	0.11	7.27	0.14
3.33	0.10			6.68	0.05	6.99	0.06
3.26	0.07			6.21	0.08	6.86	0.05
3.26	0.45			4.81	0.18	6.70	1.00
3.26	0.22			3.53	0.34	6.57	0.18
3.24	0.11			3.45	0.46	6.53	0.19
				3.40	0.16	6.39	0.13
				3.34	0.16	6.31	0.34
				3.29	0.07	6.26	0.23
				3.28	0.09	6.24	0.28
				3.27	0.12	6.21	0.20
				3.26	0.06		
				3.26	0.58		
				3.26	0.38		
				3.24	0.16		

## A.4 Sample molecules studied in chapter 5

Table A.16: Theoretical spectral data for  $C_{20}H_{12}^{-1}$ ,  $C_{24}H_{12}^{-1}$  and  $C_{32}H_{14}^{-1}$ 

$C_{20}H_{12}^{-1}$		$C_{24}H_{12}^{-1}$		$C_{32}H_{14}^{-1}$	
$\lambda$ ( $\mu\text{m}$ )	Int <sub>rel</sub>	$\lambda$ ( $\mu\text{m}$ )	Int <sub>rel</sub>	$\lambda$ ( $\mu\text{m}$ )	Int <sub>rel</sub>
13.80	0.84	18.66	0.10	12.41	0.26
12.57	0.09	12.83	0.07	8.83	0.09
9.90	0.41	12.74	0.48	8.04	0.09
8.88	0.16	9.14	0.29	7.75	1.00
7.93	0.81	8.49	0.14	7.45	0.22
7.73	1.00	8.36	0.08	7.16	0.05
7.62	0.08	8.29	0.37	6.90	0.11
6.54	0.94	7.82	1.00	6.47	0.19
6.41	0.88	7.77	0.15	6.33	0.08
3.32	0.36	7.66	0.18	6.32	0.17
3.32	0.05	7.39	0.36	3.31	0.06

Continued on next page

Table A.16 – *Continued from previous page*

3.29	0.19	7.02	0.08	3.29	0.29
3.29	0.93	6.84	0.54	3.28	0.28
3.23	0.29	6.64	0.06		
		6.42	0.56		
		6.39	0.35		
		3.32	0.28		
		3.29	0.57		
		3.29	0.59		

Table A.17: Theoretical spectral data for  $C_{24}H_{11}^{-1}$ ,  $C_{24}H_{10}^{-1}$ ,  $C_{24}H_9^{-1}$  and  $C_{24}H_8^{-1}$ 

$C_{24}H_{11}^{-1}$		$C_{24}H_{10}^{-1}$		$C_{24}H_9^{-1}$		$C_{24}H_8^{-1}$	
$\lambda$ ( $\mu\text{m}$ )	Int <sub>rel</sub>	$\lambda$ ( $\mu\text{m}$ )	Int <sub>rel</sub>	$\lambda$ ( $\mu\text{m}$ )	Int <sub>rel</sub>	$\lambda$ ( $\mu\text{m}$ )	Int <sub>rel</sub>
18.15	0.12	19.66	0.50	19.67	0.08	19.91	0.18
13.17	0.06	18.62	0.07	19.18	0.12	14.27	0.11
13.07	0.05	18.12	0.08	17.59	0.06	12.63	0.08
12.18	0.46	17.52	0.23	17.42	0.08	12.09	0.46
12.05	0.55	13.75	0.08	15.88	0.21	11.43	0.08
11.45	0.22	12.17	1.00	15.15	0.09	9.37	0.10
9.08	0.10	9.16	0.14	13.28	0.07	9.17	0.21
8.96	0.16	9.01	0.17	12.15	0.88	8.07	0.10
8.50	0.08	8.53	0.14	11.51	0.17	7.77	0.05
7.94	0.24	8.01	0.09	10.58	0.18	7.72	0.10
7.76	0.13	7.62	0.74	9.30	0.45	7.64	0.09
7.72	0.31	6.87	0.11	9.03	0.14	7.43	0.08
7.61	1.00	6.82	0.18	8.86	0.05	7.36	0.07
7.39	0.08	6.37	0.17	8.85	0.06	7.07	0.06
7.29	0.10	6.17	0.36	8.67	0.09	6.90	0.11
7.27	0.05	3.31	0.08	8.48	0.20	6.84	0.56
7.18	0.05	3.31	0.15	8.29	0.08	6.57	0.11
7.12	0.08	3.28	0.36	8.23	0.05	6.40	0.30
6.89	0.16	3.28	0.84	8.01	0.26	5.24	1.00
6.85	0.10	3.28	0.92	7.90	0.06	3.31	0.07
6.49	0.19			7.79	0.41	3.28	0.13
6.35	0.25			7.70	0.19	3.28	0.37
3.45	0.95			7.47	0.09	3.27	0.22
3.32	0.06			7.38	0.22	3.27	0.18
3.31	0.07			7.31	0.16		

*Continued on next page*

Table A.17 – Continued from previous page

3.31	0.15		7.17	0.06
3.31	0.05		7.08	0.30
3.29	0.62		6.95	0.07
3.28	0.99		6.74	0.11
3.28	0.84		6.68	0.05
3.28	0.38		6.58	0.14
			6.46	0.21
			6.34	0.14
			5.20	1.00
			3.43	0.99
			3.31	0.06
			3.30	0.06
			3.30	0.12
			3.29	0.58
			3.28	0.38
			3.28	0.84
			3.26	0.37

Table A.18: Theoretical spectral data for  $C_{24}H_7^{-1}$ ,  $C_{24}H_6^{-1}$ ,  $C_{24}H_5^{-1}$  and  $C_{24}H_4^{-1}$ 

$C_{24}H_7^{-1}$		$C_{24}H_6^{-1}$		$C_{24}H_5^{-1}$		$C_{24}H_4^{-1}$	
$\lambda$ ( $\mu\text{m}$ )	Int <sub>rel</sub>	$\lambda$ ( $\mu\text{m}$ )	Int <sub>rel</sub>	$\lambda$ ( $\mu\text{m}$ )	Int <sub>rel</sub>	$\lambda$ ( $\mu\text{m}$ )	Int <sub>rel</sub>
19.40	0.12	19.50	0.06	18.54	0.24	19.42	0.21
17.50	0.05	16.30	0.09	16.38	0.10	14.52	0.09
16.65	0.17	12.64	0.06	15.81	0.09	12.84	0.51
15.83	0.12	12.19	0.22	14.31	0.09	12.65	0.07
15.33	0.15	10.71	0.07	12.74	0.12	12.20	0.28
15.00	0.05	10.13	0.05	12.65	0.06	10.80	0.20
13.60	0.09	9.43	0.13	12.28	0.30	10.63	0.14
12.61	0.07	9.10	0.11	11.43	0.11	9.68	0.57
12.23	0.69	8.02	0.05	10.74	0.32	9.59	0.42
11.49	0.16	7.96	0.09	10.59	0.14	9.42	0.05
10.70	0.24	7.51	0.08	9.59	0.34	8.86	0.09
10.46	0.18	7.33	0.21	9.55	0.42	8.08	0.10
10.10	0.06	7.11	0.07	9.31	0.26	7.61	0.07

Continued on next page

Table A.18 – Continued from previous page

9.47	0.43	6.86	0.28	8.92	0.06	7.22	0.38
9.36	0.56	5.20	1.00	8.83	0.07	7.17	0.07
8.65	0.05	5.15	0.21	8.55	0.17	7.08	0.52
8.55	0.23	3.28	0.16	7.95	0.15	6.84	0.15
8.26	0.08	3.26	0.16	7.42	0.28	6.82	0.52
7.97	0.16			7.27	0.14	6.72	1.00
7.73	0.10			7.16	0.13	6.59	0.59
7.63	0.11			7.04	0.24	6.41	0.64
7.51	0.09			6.93	0.12	5.30	0.78
7.39	0.41			6.82	1.00	5.17	0.50
7.34	0.29			6.71	0.15	4.98	0.77
7.16	0.11			6.58	0.10	3.29	0.10
7.11	0.38			6.27	0.08	3.27	0.21
7.02	0.25			5.27	0.54	3.26	0.16
6.92	0.23			5.09	0.21		
6.76	0.32			4.96	0.38		
6.75	0.40			3.43	0.72		
6.57	0.07			3.28	0.53		
6.45	0.12			3.26	0.23		
5.27	0.97						
5.02	0.56						
3.43	1.00						
3.31	0.06						
3.29	0.08						
3.29	0.58						
3.28	0.68						
3.26	0.34						

Table A.19: Theoretical spectral data for  $C_{24}H_3^{-1}$ ,  $C_{24}H_2^{-1}$ ,  $C_{24}H_1^{-1}$  and  $C_{24}^{-1}$ 

$C_{24}H_3^{-1}$		$C_{24}H_2^{-1}$		$C_{24}H_1^{-1}$		$C_{24}^{-1}$	
$\lambda$ ( $\mu\text{m}$ )	Int <sub>rel</sub>	$\lambda$ ( $\mu\text{m}$ )	Int <sub>rel</sub>	$\lambda$ ( $\mu\text{m}$ )	Int <sub>rel</sub>	$\lambda$ ( $\mu\text{m}$ )	Int <sub>rel</sub>
19.24	0.14	12.96	0.29	18.42	0.18	17.58	0.08
17.91	0.24	12.33	0.06	17.66	0.07	12.90	0.14
16.09	0.11	9.87	0.41	15.95	0.15	12.75	0.08
15.82	0.05	9.77	0.19	13.07	0.05	9.93	0.41
15.05	0.11	8.31	0.05	12.82	0.08	9.93	0.38
13.24	0.10	8.02	0.08	12.64	0.06	9.39	0.06

Continued on next page

Table A.19 – Continued from previous page

12.81	0.23	7.68	0.07	10.77	0.17	9.29	0.07
12.71	0.13	7.30	0.14	9.91	0.42	7.32	0.07
12.60	0.15	7.17	0.25	9.86	0.53	7.18	0.12
11.49	0.14	6.94	0.06	9.36	0.19	6.99	0.11
10.91	0.26	6.80	1.00	9.26	0.31	6.82	0.60
10.61	0.30	6.73	0.40	7.58	0.08	6.68	0.21
10.32	0.05	6.42	0.09	7.36	0.06	6.59	0.15
9.82	0.85	5.31	0.36	7.22	0.41	5.25	0.06
9.65	0.61	5.24	0.29	7.01	0.19	5.22	1.00
9.49	0.10	5.01	0.09	6.86	0.31	4.98	0.14
9.18	0.53	4.97	0.44	6.77	1.00	4.92	0.15
8.95	0.16	3.26	0.07	6.67	0.55		
8.59	0.15			5.26	0.15		
8.56	0.19			5.12	0.34		
7.97	0.06			4.95	0.08		
7.88	0.05			4.92	0.21		
7.69	0.09			3.39	0.45		
7.59	0.13						
7.15	0.58						
6.95	0.99						
6.82	0.50						
6.72	0.92						
6.59	0.19						
6.39	0.21						
5.28	0.44						
5.13	0.47						
4.99	0.07						
4.94	0.71						
3.42	1.00						
3.29	0.14						
3.26	0.41						

Table A.20: Theoretical spectral data for  $C_{20}H_{11}^{-1}$ ,  $C_{20}H_{10}^{-1}$ ,  $C_{20}H_9^{-1}$  and  $C_{20}H_8^{-1}$ 

$C_{20}H_{11}^{-1}$		$C_{20}H_{10}^{-1}$		$C_{20}H_9^{-1}$		$C_{20}H_8^{-1}$	
$\lambda$ ( $\mu\text{m}$ )	Int <sub>rel</sub>	$\lambda$ ( $\mu\text{m}$ )	Int <sub>rel</sub>	$\lambda$ ( $\mu\text{m}$ )	Int <sub>rel</sub>	$\lambda$ ( $\mu\text{m}$ )	Int <sub>rel</sub>
13.36	0.37	14.67	0.18	13.31	0.44	13.51	0.20
12.64	0.16	13.36	0.50	13.27	0.05	13.00	0.09

Continued on next page



Table A.20 – Continued from previous page

12.54	0.06	12.86	0.28	12.77	0.23	12.91	0.24
10.44	0.08	12.75	0.07	12.46	0.14	12.43	0.13
9.37	0.06	12.50	0.10	9.87	0.11	9.99	0.10
8.07	0.13	10.41	0.07	8.99	0.05	9.21	0.06
7.90	0.27	9.28	0.12	8.83	0.06	8.04	0.18
7.86	0.93	8.65	0.11	8.68	0.06	7.81	0.09
7.50	0.14	8.55	0.07	8.18	0.05	7.58	0.14
7.47	0.11	8.10	0.12	8.01	0.41	7.53	0.29
7.40	0.25	7.90	1.00	7.53	0.21	7.47	0.09
7.07	0.16	7.79	0.09	7.48	0.38	7.22	0.16
6.82	0.21	7.50	0.28	7.19	0.19	6.94	0.08
6.63	0.26	7.45	0.25	6.98	0.07	6.61	0.22
6.54	1.00	7.30	0.09	6.60	0.27	6.45	0.22
6.40	0.45	6.94	0.21	6.43	0.36	6.38	0.27
6.33	0.06	6.90	0.55	6.38	0.47	6.00	1.00
6.28	0.13	6.68	0.06	6.35	0.05	3.30	0.09
3.43	0.45	6.59	0.50	6.28	0.09	3.29	0.18
3.32	0.20	6.41	1.00	5.96	1.00	3.28	0.28
3.30	0.13	6.36	0.12	3.31	0.09	3.26	0.12
3.28	0.09	6.33	0.07	3.30	0.12	3.24	0.12
3.28	0.36	6.28	0.13	3.28	0.16		
3.27	0.09	6.22	0.14	3.28	0.45		
3.26	0.07	3.35	0.21	3.26	0.16		
3.24	0.08	3.30	0.10	3.24	0.16		
3.24	0.09	3.30	0.12	3.24	0.18		
		3.28	0.13	3.24	0.05		
		3.28	0.59				
		3.28	0.11				
		3.26	0.07				

Table A.21: Theoretical spectral data for  $C_{20}H_7^{-1}$ ,  $C_{20}H_6^{-1}$ ,  $C_{20}H_5^{-1}$  and  $C_{20}H_4^{-1}$ 

$C_{20}H_7^{-1}$		$C_{20}H_6^{-1}$		$C_{20}H_5^{-1}$		$C_{20}H_4^{-1}$	
$\lambda$ ( $\mu\text{m}$ )	Int <sub>rel</sub>	$\lambda$ ( $\mu\text{m}$ )	Int <sub>rel</sub>	$\lambda$ ( $\mu\text{m}$ )	Int <sub>rel</sub>	$\lambda$ ( $\mu\text{m}$ )	Int <sub>rel</sub>
16.55	0.07	16.61	0.09	18.28	0.06	16.37	0.15
15.87	0.06	13.19	0.35	15.54	0.13	12.64	0.16
13.51	0.19	12.52	0.25	15.14	0.38	12.42	0.18
13.14	0.07	12.40	0.08	13.67	0.06	11.82	0.10

Continued on next page

Table A.21 – Continued from previous page

12.83	0.28	9.95	0.06	13.49	0.06	10.25	0.11
12.38	0.08	9.91	0.28	12.71	0.06	9.87	0.16
11.27	0.08	8.92	0.21	12.49	0.10	8.94	0.25
10.07	0.10	8.74	0.14	11.64	0.06	8.70	0.21
8.99	0.05	8.53	0.17	11.03	0.06	8.51	0.23
8.70	0.06	7.99	0.10	10.22	0.09	8.03	0.16
8.48	0.05	7.52	0.14	9.65	0.27	7.95	0.08
8.21	0.20	7.47	0.30	8.72	0.06	7.73	0.31
8.07	0.29	7.43	0.22	8.43	0.08	7.48	0.10
7.91	0.06	7.23	0.11	7.88	0.13	7.34	0.16
7.79	0.41	7.17	0.18	7.77	0.06	7.15	0.21
7.66	0.07	6.67	0.06	7.58	0.05	7.14	0.09
7.30	0.29	6.42	0.60	7.13	0.11	6.77	0.19
6.74	0.33	6.35	0.19	6.97	0.07	6.57	0.17
6.62	0.37	6.28	0.07	6.93	0.06	6.42	0.12
6.55	0.06	5.92	1.00	6.38	0.09	6.36	0.11
6.40	0.08	3.30	0.07	5.99	1.00	5.96	1.00
6.35	0.15	3.28	0.07	5.92	0.26	5.24	0.15
6.01	1.00	3.28	0.38	3.36	0.17	3.28	0.27
5.23	0.23	3.27	0.15	3.26	0.10	3.27	0.12
3.30	0.11						
3.29	0.05						
3.28	0.34						
3.26	0.09						
3.25	0.06						
3.24	0.13						

Table A.22: Theoretical spectral data for  $C_{20}H_3^{-1}$ ,  $C_{20}H_2^{-1}$ ,  $C_{20}H_1^{-1}$  and  $C_{20}^{-1}$ 

$C_{20}H_3^{-1}$		$C_{20}H_2^{-1}$		$C_{20}H_1^{-1}$		$C_{20}^{-1}$	
$\lambda$ ( $\mu\text{m}$ )	Int <sub>rel</sub>	$\lambda$ ( $\mu\text{m}$ )	Int <sub>rel</sub>	$\lambda$ ( $\mu\text{m}$ )	Int <sub>rel</sub>	$\lambda$ ( $\mu\text{m}$ )	Int <sub>rel</sub>
18.63	0.06	18.15	0.07	19.43	0.15	19.52	0.06
18.03	0.10	17.31	0.09	18.16	0.08	17.65	0.14
16.98	0.13	13.41	0.06	17.07	0.17	16.45	0.24
15.93	0.46	13.19	0.05	15.90	0.50	15.95	0.37
15.35	0.08	12.35	0.24	15.18	0.05	15.12	0.07
13.29	0.06	10.31	0.09	13.67	0.20	13.53	0.16
12.64	0.18	9.96	0.23	12.14	0.08	12.27	0.22

Continued on next page

Table A.22 – Continued from previous page

10.22	0.11	9.11	0.09	10.55	0.13	10.54	0.16
9.93	0.14	8.76	0.13	9.91	0.17	10.02	0.27
9.09	0.05	8.49	0.05	8.85	0.05	8.92	0.08
8.74	0.07	8.38	0.06	8.38	0.09	8.63	0.24
8.35	0.06	8.26	0.19	8.26	0.06	8.49	0.11
8.12	0.07	7.96	0.14	8.18	0.20	8.22	0.09
7.90	0.17	7.67	0.07	7.83	0.10	7.98	0.26
7.66	0.07	7.35	0.23	7.70	0.11	7.59	0.06
7.20	0.13	7.31	0.18	7.31	0.11	7.37	0.07
7.11	0.19	7.10	0.12	7.23	0.06	7.19	0.18
6.50	0.10	6.68	0.18	7.14	0.17	7.14	0.25
6.02	0.12	6.57	0.10	6.47	0.12	6.46	0.11
5.90	0.32	6.49	0.08	6.02	0.12	6.01	0.18
5.83	1.00	6.07	1.00	5.89	0.52	5.86	0.81
3.26	0.06	5.82	0.24	5.84	1.00	5.83	1.00
		3.27	0.11				

Table A.23: Theoretical spectral data for  $C_{32}H_{13}^{-1}$ ,  $C_{32}H_{12}^{-1}$ ,  $C_{32}H_{11}^{-1}$  and  $C_{32}H_{10}^{-1}$ 

$C_{32}H_{13}^{-1}$		$C_{32}H_{12}^{-1}$		$C_{32}H_{11}^{-1}$		$C_{32}H_{10}^{-1}$	
$\lambda$ ( $\mu\text{m}$ )	Int <sub>rel</sub>	$\lambda$ ( $\mu\text{m}$ )	Int <sub>rel</sub>	$\lambda$ ( $\mu\text{m}$ )	Int <sub>rel</sub>	$\lambda$ ( $\mu\text{m}$ )	Int <sub>rel</sub>
18.62	0.08	19.82	0.21	19.85	0.09	18.82	0.14
16.13	0.13	18.61	0.10	19.29	0.08	12.59	0.05
14.55	0.05	17.62	0.16	18.95	0.06	12.26	0.13
13.31	0.06	17.07	0.32	18.73	0.08	12.20	0.06
12.88	0.13	16.04	0.11	17.59	0.18	11.73	0.25
12.45	0.09	13.28	0.06	17.49	0.14	11.63	0.18
12.30	0.18	12.72	0.30	15.13	0.09	9.99	0.06
11.83	0.45	12.29	0.15	13.67	0.09	9.61	0.06
11.75	0.29	11.77	0.81	12.85	0.13	9.22	0.05
11.50	0.26	11.76	0.07	12.66	0.09	8.79	0.09
8.91	0.15	11.16	0.07	12.32	0.27	8.55	0.06
8.81	0.15	8.99	0.14	11.99	0.13	8.41	0.09
8.68	0.30	8.80	0.14	11.81	0.66	7.90	0.06
8.47	0.07	8.69	0.15	11.33	0.28	7.77	0.09
8.19	0.09	7.82	0.75	10.38	0.08	7.76	0.10
8.11	0.18	7.73	0.11	10.03	0.28	7.69	0.07
7.99	0.17	7.52	0.28	9.58	0.07	7.59	0.32

Continued on next page

Table A.23 – Continued from previous page

7.91	0.06	7.44	0.50	9.09	0.32	7.44	0.08
7.78	0.65	7.43	0.05	8.96	0.12	7.18	0.06
7.75	0.05	7.00	0.14	8.80	0.07	6.83	0.13
7.72	0.13	6.84	0.06	8.78	0.08	6.77	0.14
7.60	0.16	6.76	0.08	8.75	0.44	6.38	0.20
7.51	0.57	6.29	0.10	8.57	0.15	6.37	0.07
7.45	0.43	6.21	0.91	8.36	0.08	6.28	0.07
7.36	0.09	3.30	0.37	8.29	0.23	5.13	1.00
7.28	0.09	3.30	0.14	8.25	0.09	3.30	0.05
7.23	0.15	3.28	0.64	8.08	0.10	3.29	0.09
7.11	0.05	3.28	1.00	8.02	0.59	3.28	0.06
7.08	0.07	3.28	0.68	7.97	0.13	3.28	0.27
7.04	0.06	3.27	0.10	7.78	0.15	3.27	0.37
7.00	0.14			7.67	0.08	3.27	0.33
6.82	0.10			7.61	0.08	3.27	0.09
6.81	0.11			7.58	0.22		
6.51	0.23			7.50	0.76		
6.48	0.22			7.47	0.18		
6.38	0.09			7.34	0.09		
6.37	0.19			7.14	0.12		
3.44	1.00			6.90	0.07		
3.30	0.29			6.85	0.20		
3.30	0.14			6.84	0.05		
3.29	0.75			6.70	0.16		
3.28	0.80			6.65	0.15		
3.28	0.88			6.51	0.43		
3.27	0.38			6.39	0.12		
				6.30	0.09		
				5.27	0.48		
				3.43	0.98		
				3.30	0.23		
				3.30	0.14		
				3.29	0.21		
				3.28	0.09		
				3.28	0.94		
				3.28	1.00		
				3.26	0.49		

Table A.24: Theoretical spectral data for  $C_{32}H_9^{-1}$ ,  $C_{32}H_8^{-1}$ ,  $C_{32}H_7^{-1}$  and  $C_{32}H_6^{-1}$ 

$C_{32}H_9^{-1}$		$C_{32}H_8^{-1}$		$C_{32}H_7^{-1}$		$C_{32}H_6^{-1}$	
$\lambda$ ( $\mu\text{m}$ )	Int <sub>rel</sub>	$\lambda$ ( $\mu\text{m}$ )	Int <sub>rel</sub>	$\lambda$ ( $\mu\text{m}$ )	Int <sub>rel</sub>	$\lambda$ ( $\mu\text{m}$ )	Int <sub>rel</sub>
18.62	0.06	18.76	0.06	19.94	0.09	17.21	0.11
16.76	0.10	16.85	0.13	18.20	0.20	17.07	0.06
16.61	0.07	16.73	0.12	17.07	0.07	13.27	0.16
15.07	0.08	15.11	0.11	16.94	0.10	11.93	0.43
13.40	0.12	13.47	0.14	16.72	0.30	11.54	0.07
12.85	0.07	13.17	0.06	15.14	0.31	10.05	0.27
12.14	0.15	12.89	0.07	14.64	0.06	9.95	0.39
11.95	0.71	12.22	0.19	14.56	0.10	9.21	0.08
11.58	0.07	11.94	0.64	14.46	0.16	8.65	0.29
11.40	0.06	11.58	0.08	13.34	0.08	8.63	0.38
10.08	0.17	11.43	0.06	12.77	0.15	8.24	0.35
9.99	0.05	10.09	0.09	12.35	0.06	7.96	0.07
9.66	0.09	10.07	0.17	12.32	0.16	7.89	0.17
9.42	0.17	9.48	0.18	11.88	0.60	7.86	0.09
9.21	0.14	9.21	0.15	11.64	0.08	7.74	0.20
8.95	0.11	9.04	0.08	11.56	0.05	7.71	0.14
8.87	0.23	8.88	0.30	10.08	0.23	7.34	0.06
8.75	0.10	8.77	0.09	9.73	0.09	7.11	0.12
8.48	0.14	8.49	0.20	9.53	0.11	7.07	0.06
8.39	0.24	8.45	0.11	9.29	0.17	6.83	1.00
8.33	0.20	8.33	0.73	9.11	0.12	6.60	0.05
8.26	0.48	8.22	0.11	8.91	0.07	6.35	0.49
8.16	0.12	8.17	0.16	8.89	0.21	5.23	0.05
7.78	0.07	7.83	0.08	8.68	0.05	5.13	0.71
7.73	0.21	7.75	0.22	8.51	0.07	4.98	0.29
7.64	0.22	7.71	0.11	8.42	0.24	3.29	0.11
7.46	0.10	7.46	0.18	8.24	0.82	3.29	0.10
7.43	0.14	7.42	0.26	8.20	0.07	3.27	0.32
7.32	0.11	7.25	0.18	7.93	0.07	3.25	0.17
7.25	0.14	7.14	0.20	7.80	0.05	3.25	0.11
7.12	0.39	7.08	0.15	7.76	0.10		
7.10	0.05	6.96	0.70	7.69	0.13		
6.99	0.27	6.78	0.24	7.29	0.13		
6.93	0.21	6.74	0.09	7.26	0.12		
6.91	0.06	6.69	0.19	7.15	0.16		
6.76	0.26	6.62	0.07	7.08	0.25		

*Continued on next page*

Table A.24 – Continued from previous page

6.72	0.09	6.53	0.49	6.95	0.73
6.64	0.05	6.35	0.35	6.93	0.24
6.50	0.52	6.34	0.06	6.81	0.75
6.35	0.07	6.27	0.07	6.76	0.09
6.32	0.35	5.19	1.00	6.65	0.05
5.19	1.00	5.02	0.62	6.56	0.46
5.02	0.58	3.30	0.14	6.48	0.19
3.30	0.14	3.30	0.10	6.33	0.10
3.30	0.11	3.29	0.11	6.30	0.22
3.29	0.10	3.28	0.30	5.17	1.00
3.28	0.28	3.28	0.75	5.06	0.96
3.28	0.72	3.26	0.33	5.01	0.56
3.26	0.29			3.29	0.10
3.26	0.30			3.29	0.14
				3.29	0.12
				3.28	0.60
				3.26	0.39
				3.26	0.28

Table A.25: Theoretical spectral data for  $C_{32}H_5^{-1}$ ,  $C_{32}H_4^{-1}$ ,  $C_{32}H_3^{-1}$  and  $C_{32}H_2^{-1}$ 

$C_{32}H_5^{-1}$		$C_{32}H_4^{-1}$		$C_{32}H_3^{-1}$		$C_{32}H_2^{-1}$	
$\lambda$ ( $\mu\text{m}$ )	Int <sub>rel</sub>	$\lambda$ ( $\mu\text{m}$ )	Int <sub>rel</sub>	$\lambda$ ( $\mu\text{m}$ )	Int <sub>rel</sub>	$\lambda$ ( $\mu\text{m}$ )	Int <sub>rel</sub>
19.23	0.11	16.98	0.46	18.99	0.06	16.60	0.72
18.33	0.44	16.46	0.08	17.07	0.29	14.19	0.05
17.55	0.36	15.11	0.08	16.57	0.09	12.40	0.18
15.92	0.09	14.50	0.14	15.89	0.42	10.13	0.30
14.91	0.65	13.72	0.05	14.36	0.24	9.98	0.55
14.02	0.09	11.98	0.39	13.83	0.16	9.11	0.15
13.04	0.35	11.53	0.05	13.21	0.29	8.90	0.12
12.08	0.18	10.07	0.38	12.41	0.18	8.71	0.10
11.88	0.34	9.97	0.63	12.21	0.11	8.59	0.35
10.60	0.75	9.29	0.06	11.78	0.08	8.21	0.42
10.51	0.10	9.17	0.18	10.76	1.00	7.79	0.17
10.21	0.15	8.89	0.15	10.23	0.18	7.67	0.08
10.03	0.36	8.66	0.33	10.04	0.27	7.57	0.32
9.95	0.13	8.57	0.35	10.01	0.19	7.36	0.06
9.60	0.53	8.38	0.07	9.55	0.23	7.05	0.10

Continued on next page

Table A.25 – Continued from previous page

9.35	0.14	8.25	0.07	9.48	0.67	6.83	0.62
9.26	0.17	8.22	0.47	8.29	0.15	6.59	0.24
9.06	0.06	8.15	0.07	7.69	0.06	5.22	0.09
8.91	0.06	7.98	0.08	7.37	0.07	5.12	0.14
8.18	0.07	7.81	0.23	7.09	0.12	5.09	0.06
8.07	0.13	7.73	0.34	7.05	0.21	5.08	1.00
7.72	0.11	7.37	0.14	6.82	0.38	4.96	0.22
7.47	0.08	7.30	0.10	6.75	0.18	3.24	0.14
7.08	0.07	7.08	0.16	6.53	0.13		
7.04	0.14	7.07	0.17	6.37	0.07		
6.81	0.23	6.85	0.70	6.14	0.12		
6.79	0.18	6.83	0.26	5.18	0.06		
6.74	0.14	6.76	0.09	5.01	0.11		
6.66	0.09	6.43	0.32	5.00	0.15		
6.56	0.06	6.33	0.34	3.31	0.07		
6.27	0.05	5.22	0.15	3.28	0.05		
6.18	0.14	5.13	0.31	3.25	0.08		
5.18	0.05	5.10	1.00				
5.01	0.23	4.97	0.34				
3.32	0.09	3.29	0.05				
3.27	0.17	3.28	0.18				
3.26	0.09	3.25	0.10				
		3.25	0.29				

Table A.26: Theoretical spectral data for  $C_{32}H_1^{-1}$  and  $C_{32}^{-1}$ 

$C_{32}H_1^{-1}$				$C_{32}^{-1}$	
$\lambda$ ( $\mu\text{m}$ )	Int <sub>rel</sub>	$\lambda$ ( $\mu\text{m}$ )	Int <sub>rel</sub>	$\lambda$ ( $\mu\text{m}$ )	Int <sub>rel</sub>
19.92	0.47	8.43	0.13	19.64	0.07
18.62	0.07	8.01	0.09	16.57	0.69
17.98	0.12	7.71	0.11	10.29	0.40
16.55	0.20	7.52	0.06	10.02	0.60
16.22	0.12	7.22	0.10	9.08	0.18
15.71	0.22	7.19	0.18	8.94	0.40
14.03	0.43	7.02	0.06	7.99	0.15
13.42	0.23	6.82	0.16	7.99	0.23
12.62	0.22	6.79	0.23	7.66	0.48
10.85	1.00	6.74	0.20	7.59	0.06

*Continued on next page*

Table A.26 – Continued from previous page

10.28	0.22	6.17	0.21	7.02	0.11
10.22	0.23	5.18	0.05	6.82	0.08
10.02	0.08	4.99	0.20	6.82	1.00
9.55	0.93	4.97	0.06	5.25	0.06
9.42	0.09	3.29	0.06	5.09	1.00
8.50	0.06			4.95	0.36