

Table 3. Harmonic Vibrational Frequencies and their Intensities in Their Lowest Energy States of FeO_n for $n=9-12$ (the frequencies are in cm^{-1} , the intensities in arbitrary units)

	FeO_9		FeO_{10}		FeO_{11}		FeO_{12}	
	ω_i	I_i	ω_i	I_i	ω_i	I_i	ω_i	I_i
1	41	0.10	29	0.50	53	0.55	35	0.55
2	69	0.04	38	0.11	60	0.43	50	0.17
3	82	0.07	77	0.11	83	0.02	60	0.21
4	93	0.01	95	0.05	96	0.04	73	0.15
5	131	2.19	110	0.93	114	0.64	77	0.10
6	148	1.23	115	0.98	127	0.72	95	0.20
7	158	3.08	142	0.31	142	0.54	108	0.73
8	174	0.02	154	0.15	169	0.15	116	0.18
9	192	1.05	174	0.88	180	1.40	130	0.34
10	199	1.20	192	1.40	198	4.76	148	0.88
11	206	3.00	203	1.28	216	2.12	159	2.22
12	238	1.38	206	2.23	202	4.76	173	0.43
13	241	3.50	218	0.54	223	0.99	185	0.48
14	263	0.00	240	2.42	282	0.90	197	0.77
15	349	0.15	280	0.20	301	4.57	198	0.15
16	368	0.59	326	1.00	342	2.22	229	0.08
17	380	2.48	375	0.79	346	1.47	244	1.85
18	418	3.54	397	1.93	349	0.38	249	0.70
19	637	1.85	421	3.73	363	0.74	282	0.56
20	905	108.64	452	1.16	444	1.87	319	1.88
21	1086	140.52	591	7.90	457	0.63	349	0.19
22	1338	188.32	654	14.41	464	1.25	369	1.58
23	1374	510.78	1048	142.85	596	0.63	375	1.42
24	1397	49.36	1095	217.21	649	0.11	388	1.53
25			1300	207.71	883	51.89	404	0.96
26			1377	294.97	1234	79.18	435	2.92
27			1433	202.50	1248	358.38	524	4.26
28					1329	254.63	1262	78.22
29					1340	394.04	1282	101.10
30					1395	93.23	1296	489.21
31							1335	371.17
32							1343	464.82
33							1396	63.59
2S+1	3		3		1		5	
$\langle S^2 \rangle$	4.0465		4.1924		4.1924		7.8352	
$\langle S^2 \rangle_A$	5.5638		5.7780		5.7780		7.8923	