

Empirisch ist die Bindungsenergie ungefähr 12 eV pro Kettenglied. Die Übereinstimmung ist recht befriedigend in Anbetracht der oben gemachten Näherung. Die kleine Diskrepanz beruht sicher auf der Annahme, dass ϵ_{CH_2} gross gegenüber der Energie der C-C-Bindung ist. Es zeigt sich auf jeden Fall, dass f_N wesentlich kleiner als 1 sein muss, wie es die Theorie vorhersagt. Mit $f_N = 1$ wäre die Diskrepanz wesentlich grösser.

Diese Arbeit ist unter der direkten Leitung von Herrn Prof. Dr. W. HEITLER entstanden, und ich möchte meinem Lehrer für seine diesbezügliche Mühe meinen aufrichtigen Dank aussprechen. – Herrn Dr. H. PREUSS, MAX PLANCK-Institut für Physik und Astrophysik in München, danke ich bestens für die Mitteilung der von mir benötigten numerischen Werte der Hilfsintegrale $H_2^0(m, \alpha, n, \beta)$.

ZUSAMMENFASSUNG

Eine allgemeine Theorie für Dreier-Austausche in der Theorie der chemischen Bindung wird entwickelt. Numerische Anwendungen für 3 *H*-Atome in verschiedenen Anordnungen und für eine lange lineare Kette von *H*-Atomen werden gebracht. Es wird gezeigt, dass kein stabiles H_3 existiert und dass die Bindungsenergie für lange Ketten proportional zur Kettenlänge ist. Für genügend grosse Abstände (etwa 3 BOHR-Radius-Längen oder mehr) ist der Effekt des Dreier-Austausches, wie zu erwarten, klein gegenüber dem des Zweier-Austausches.

Zur weiteren Prüfung des Additivitätsproblems wird die lineare Kette zweitwertiger Atome betrachtet. Auch hier ergibt sich Additivität für lange Ketten. Diese lineare Kette kann als Modell der CH_2 -Kette angesehen werden. Mit den Zahlenwerten für die schon früher aus CH_4 , C_2H_6 usw. bestimmten Integrale ergibt sich eine vernünftige Übereinstimmung mit der Erfahrung.

Institut für theoretische Physik der Universität Zürich

Erratum

Helv. 43, 143 (1960) Abh. Nr. 19 von W. VON PHILIPSBORN, W. ARNOLD, J. NAGYVARI, KARL BERNAUER, H. SCHMID und P. KARRER. – In der Formel Ia sind zwei Doppelbindungen ausgefallen. Die richtige Formel ist folgende:

