

cherché quelles valeurs il faut donner au paramètre $v(R)$, qui représente l'interaction électronique intermoléculaire supposée indépendante de Q_A et Q_B dans le modèle soluble, pour simuler le comportement du dimère en méthode de HOFFMANN. Les résultats sont résumés dans le Tab. 1. On constate que pour les distances intermoléculaires $R > 2,83 \text{ \AA}$, lesquelles correspondent à $v(R) < 1,63 \text{ eV}$ (Tab. 1), la configuration nucléaire du dimère est dissymétrique, alors que «l'énergie de liaison de l'exciton» $\frac{1}{2} k\lambda^2$ (calculée avec la constante de force de l'état fondamental) vaut $1,66 \text{ eV}$. C'est précisément lorsque $v(R)$ devient plus petit que $\frac{1}{2} k\lambda^2$ que l'on doit passer d'une configuration symétrique à deux configurations dissymétriques, circonstance que l'on retrouve donc, et dans le modèle soluble, et dans le modèle de HOFFMANN.

Nous remercions Monsieur R. LEFEBVRE pour ses suggestions et remarques.

Bibliographie

1. POLAK, R., u. J. PALDUS: Theoret. chim. Acta (Berl.) **4**, 37 (1966).
2. FORSTER, T., u. K. KASPER: Z. physik. Chem. (Frankfurt) **1**, 19 (1954).
3. — — Z. Elektrochem. **59**, 976 (1965).
4. STEVENS, B.: Nature **192**, 725 (1961).
5. WITKOWSKI, A., and W. MOFFIT: J. chem. Physics **33**, 872 (1960).
6. FULTON, R. L., and GOUTERMAN: J. chem. Physics **35**, 1059 (1961).
7. MERRIFIELD, R. E.: Radiat. Res. **20**, 154 (1963).
8. FULTON, R. L., and M. GOUTERMAN: J. chem. Physics **41**, 2280 (1964).
9. LEFEBVRE, R., and M. GARCIA SUCRE: Intern. J. Quant. Chem. (Sous presse).
10. BIERMAN, A.: J. chem. Physics **45**, 647 (1966).
11. GARCIA SUCRE, M.: Thèse de 3ème cycle, Faculté des Sciences, Paris, Mars (1966).
12. SIMPSON, W. T., and D. L. PETERSON: J. chem. Physics **26**, 588 (1957).

Dr. A. TALLET
Centre de Mécanique Ondulatoire Appliquée
23, rue du Maroc
Paris 19e, France

Erratum

Unidimensional Model for Optical Rotatory Power

M. MAESTRO, R. MOCCIA, and G. TADDEI

Theoret. chim. Acta **8**, 80 (1967)

Received August 9, 1967

As the captions of Figs. 2, 3, 4, and 5 of our article are incomplete, we give here the missing indications:

Fig. 2 — Exp.; - - CHHARNEY result; ---- present results

Fig. 3. . . . $\gamma_3 = 0.0060 \cdot 10^{16} \text{ sec}^4$; — $\gamma_3 = 0.0133 \cdot 10^{16} \text{ sec}^4$; ---- $\gamma_3 = \infty$

Fig. 4 — Exp.; . . . F. E. M.; ---- F. E. M. shifted

Fig. 5. — $b = 0.0533 \text{ \AA}$; ---- $b = 0.0330 \text{ \AA}$