

Erratum**Modellrechnungen zur symmetrischen Vierzentrenbindung. II**

P. KADURA

Theoret. chim. Acta (Berl.) 8, 292 (1967)

Eingegangen am 10. November 1967

Die Konfiguration $\Phi_2(1,2)$ besitzt nicht die Symmetrie A_1 . Die richtige Konfiguration muß heißen:

$$\Phi_2(1,2) = \frac{1}{\sqrt{3}} [\psi_2(1) \psi_2(2) + \psi_3(1) \psi_3(2) + \psi_4(1) \psi_4(2)].$$

Dadurch ergeben sich geringfügige Änderungen in den numerischen Ergebnissen. Für H_{22} und H_{12} erhält man jetzt:

$$H_{22} = \frac{2}{1-S} [J_1 - J_2 + J_3 - 2J_4 + 3J_5 - 2J_6]$$

$$+ \frac{1}{(1-S)^2} \left[\frac{3}{4}J_7 + \frac{1}{4}J_8 - 3J_9 + \frac{5}{2}J_{10} + J_{11} - 2J_{12} + \frac{1}{2}J_{13} \right],$$

$$H_{12} = \frac{\sqrt{3}}{(1+3S)(1-S)} \left[\frac{1}{4}J_7 - \frac{1}{4}J_8 + J_9 + \frac{1}{2}J_{10} - J_{11} - \frac{1}{2}J_{13} \right].$$

Die Grenzwerte für $R \rightarrow \infty$ lauten hierfür:

$$\lim_{R \rightarrow \infty} H_{22} = -1 + \frac{15}{32} \qquad \lim_{R \rightarrow \infty} H_{12} = \sqrt{3} \cdot \frac{5}{32}$$

$$\lim_{R \rightarrow \infty} E_{1A_1,1} = -1 \qquad \lim_{R \rightarrow \infty} E_{1A_1,2} = -1 + \frac{5}{8}.$$

Die Fig. 2 und 3 bleiben richtig, da die Änderungen nahezu unter der Zeichengenauigkeit liegen. Eine Übersicht über die Änderungen der entscheidenden Größen gibt folgende Tabelle:

	R_{\min}	α	$f(R_{\min})$	R_{\max}	α	$f(R_{\max})$
alt	2,47 AE	1,28	0,0348 AE	6,09 AE	1	0,1291 AE
neu	2,47 AE	1,28	0,0331 AE	6,11 AE	1	0,1284 AE
	D_e			E_{akt}		
alt	0,0943 AE = 2,56 eV			0,1291 AE = 3,51 eV		
neu	0,0953 AE = 2,59 eV			0,1284 AE = 3,49 eV		