

Berichtigung

Die imaginäre Frequenz für ${}^2\text{TS}_{\text{SO}}$ in Abbildung 1 dieser Zuschrift muss korrigiert werden: Der dort abgebildete, alte ${}^2\text{TS}_{\text{SO}}$ (gefunden mit der Option opt=loose in Gaussian03) und der neue (reoptimiert mit dem Standard-Konvergenzkriterium, siehe auch die Hintergrundinformationen) sind hier zusammen mit den Frequenzen und relativen Energien (B3LYP/LACVP**-Niveau) gezeigt. Die große imaginäre Frequenz der alten Struktur folgte aus der Verwendung des „loose geometry“-Optimierungskriteriums. Die relativen Energien sind nahezu identisch, und die Rückschlüsse auf den Mechanismus ändern sich nicht.

Which Oxidant is Really Responsible for Sulfur Oxidation by Cytochrome P450?

C. Li, L. Zhang, C. Zhang, H. Hirao,
W. Wu,* S. Shaik* 8316–8318

Angew. Chem. **2007**, 119

DOI 10.1002/ange.200702867

