
 BERICHTIGUNG

Zu R. JANOSCHEK, Kritische Betrachtungen zu Ladungsverteilungen in Molekülen, erhalten durch SCF-MO-LCAO-Rechnungen, Z. Naturforsch. **25 a**, 311 [1970].

Es wurde bewiesen, daß für die aus den orthonormierten Eigenvektoren der Überlappungsmatrix S eines Basissatzes berechneten „gross charges“

$$q(r, i) = 2 \sum_{s=1}^M c_{si} c_{ri} S_{rs}$$

die Eigenschaft $0 \leq q(r, i) \leq 2$ gilt. Die geäußerte Vermutung, daß diese Eigenschaft auch für die Eigenvektoren der Hartree-Fock-Matrix gilt, konnte jetzt widerlegt werden¹. Die aus dem SCF-Verfahren resultierenden $q(r, i)$ unterliegen keiner Beschränkung, obwohl sie in den meisten Fällen zwischen 0 und 2 liegen.

Modifiziert man die „gross charges“ $q(r, i)$ derart, daß die Überlappungsanteile $2 c_{ri} c_{si} S_{rs}$ nicht zu gleichen Anteilen den Atomen r und s zugeschlagen werden, sondern im Verhältnis der Koeffizienten c_{ri} geteilt werden, so gilt die Beschränkung $0 \leq q(r, i) \leq 2$ wieder².

¹ H. PREUSS, Inst. f. Theoret. Phys. Chemie, Universität Stuttgart, persönliche Mitteilung.

² R. E. CHRISTOFFERSEN u. K. A. BAKER, in Vorbereitung.