

---

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 werden<sup>1</sup>. 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  $0 \leq q(r, i) \leq 2$  wieder<sup>2</sup>.

<sup>1</sup> H. PREUSS, Inst. f. Theoret. Phys. Chemie, Universität Stuttgart, persönliche Mitteilung.

<sup>2</sup> R. E. CHRISTOFFERSEN u. K. A. BAKER, in Vorbereitung.