
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 $0 \leqq q(r, i) \leqq 2$ 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 $0 \leqq q(r, i) \leqq 2$ wieder².

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

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

Nachdruck — auch auszugsweise — nur mit schriftlicher Genehmigung des Verlages gestattet

Verantwortlich für den Inhalt: A. KLEMM

Satz und Druck: Konrad Trittsch, Würzburg



Dieses Werk wurde im Jahr 2013 vom Verlag Zeitschrift für Naturforschung in Zusammenarbeit mit der Max-Planck-Gesellschaft zur Förderung der Wissenschaften e.V. digitalisiert und unter folgender Lizenz veröffentlicht: Creative Commons Namensnennung-Keine Bearbeitung 3.0 Deutschland Lizenz.

This work has been digitized and published in 2013 by Verlag Zeitschrift für Naturforschung in cooperation with the Max Planck Society for the Advancement of Science under a Creative Commons Attribution-NoDerivs 3.0 Germany License.

Zum 01.01.2015 ist eine Anpassung der Lizenzbedingungen (Entfall der Creative Commons Lizenzbedingung „Keine Bearbeitung“) beabsichtigt, um eine Nachnutzung auch im Rahmen zukünftiger wissenschaftlicher Nutzungsformen zu ermöglichen.

On 01.01.2015 it is planned to change the License Conditions (the removal of the Creative Commons License condition "no derivative works"). This is to allow reuse in the area of future scientific usage.