

Ústředním problémem teorie elektronové struktury je přesný výpočet korelačních energií, který může být poněkud komplikovaný, vzhledem k odlišnému původu statické a dynamické korelace. V této práci představuji soubor metod kombinujících efektivitu popisu dynamické korelace pomocí teorie spřažených klastrů (CC) s metodou renormalizační grupy matice hustoty, která je vhodná zejména pro popis silně korelovaných systémů. Spojení těchto přístupů je dosaženo pomocí externě korigované CC metody (tailored CC), která má tu výhodu, že nezvyšuje výpočetní náročnost nad rámec těchto dvou přístupů. Metoda byla úspěšně otestována na malých molekulách a následně implementována ve výpočetně efektivnější formě založené na lokálních párových přirozených orbitalech, umožňující výpočet molekul s tisíci básových funkcí. Pro vyhodnocení přesnosti jsme vykonali řadu testovacích výpočtů, počínaje malými, leč náročnými systémy jakými jsou molekula dusíku nebo diradikál tetramethylenethanu, až po větší molekuly jako oxo-Mn(salen) či model Fe(II)-porfyrinu.