

V předložené práci je studován energetický rozštěp mezi nejnižším singletovým a tripletovým elektronovým stavem oxyallylového diradikálu použitím Brillouinovi-Wignerovi a Mukherjeeho multireferenční metody vázaných klastrů. Výsledné energetické rozštěpy a vibrační stavy jsou porovnány s experimentálními hodnotami získanými měřeními fotoelektronových spekter publikovanými nedávno v [1].