

Errata

Gramatické chyby a překlepy

- str. 8 2.1.3 první odstavec první věta ... viz přílohu A ...
- str. 9 2.2.1 první odstavec druhá věta ... coulombické repulzi ...
- str. 10 2.4.1 první odstavec třetí věta ... viz přílohu A ...
- str. 10 2.4.1 druhý odstavec první věta ... tzv. úplná CI ...
- str. 11 2.5 třetí odstavec první věta ... viz přílohu A ...
- str. 15 3.1 třetí odstavec druhá věta ... na obr. 3.2 ...
- str. 16 3.2 druhý odstavec druhá věta ... na obr. 3.3 ...
- str. 17 3.3.1 druhý odstavec první věta ... na obr. 3.4 ...
- str. 17 3.3.1 druhý odstavec první věta ... viz přílohu B ...
- str. 18 3.3.1 první odstavec první věta ... Na obr. 3.5 ...
- str. 18 3.3.2 druhý odstavec druhá věta ... viz [2] ...
- str. 19 3.3.4 třetí odstavec první věta ... v příloze B ...
- str. 20 4.1 první odstavec první věta ... viz podsekcí 3.3.1 ...
- str. 20 4.1 třetí odstavec druhá věta ... na obr. 3.3 ...
- str. 20 4.2 první odstavec druhá věta ... v tab. 4.1 ...
- str. 21 4.2 první odstavec první věta ... z tab. 4.1 ...
- str. 23 5 třetí odstavec první věta ... v tab. 4.1 ...

Doplnění citací

- Více o BWCC viz knihu I. Hubač, S. Wilson *Brillouin-Wigner Methods for Many-Body Systems*, Springer, Heidelberg, 2010.
- Více o MkCC viz články U. S. Mahapatra, B. Datta, and D. Mukherjee *J. Chem. Phys.* 110:6171, 1999 a U. S. Mahapatra, B. Datta, and D. Mukherjee *Chem. Phys. Lett.* 299:42, 1999.

Porovnání výsledků pro methylen a oxyallylový diradikál

Vypočtené energetické rozštěpení mezi singletovým a tripletovým stavem methylenu metodou BWCC a MkCC lze nalézt v článku K. Bhaskaran-Nair, O. Demel, and J. Pittner *J. Chem. Phys.* 132:154105, 2010. Na rozdíl od oxyallylu je základním stavem methylenu triplet. Ostatní výsledky kopírují ty pro oxyallyl. Bez zahrnutí triexcitací je rozštěpení nadhodnoceno pro obě metody. Zahrnutí a posteriori korekce u BWCC metody dává menší rozštěpení než je experimentální. Pokud se u MkCC použijí pro výpočet velké báze a provede se CBS extrapolace, dostaneme po zahrnutí triexcitací výsledky srovnatelné s experimentem.

Chování BWCC i MkCC metody je tedy pro methylen kvalitativně stejné jako pro oxyallyl.