

Abstrakt

Metóda viazaných klastrov(z ang. **C**oupled **C**luster *CC*) bola pôvodne vyvinutá Hermannom Kümmelom pre potreby jadrovej fyziky. Následne po Čížkovej a Paldusového úprave sa stala použiteľnou i pre oblasť teoretickej chémie. V priebehu doby sa osvedčila ako jedna z najlepších kvantovo-chemických metód. Úlohou tejto práce je otestovať výsledky multireferenčných *CC* metód pri použití optimalizovaných orbitálov(*OVOS*), získaných z jedno-determinatných singletných stavov kvázi-degenerovaných systémov a použitých na dvoj-determinatný tripletový stav.