

Pro provedení v R-maticových výpočtech je třeba najít dobrý popis excitovaných stavů neutrální molekuly v okolí rovnovážné geometrie, provedené ab initio metodou v relativně malé bázi. Dále pro nastavení některých parametrů těchto výpočtů je třeba mít referenční potenciálové křivky neutrální molekuly i aniontu, které jsou konzistentní s experimentálně získanými hodnotami. V této práci se zabýváme nalezením popisu excitovaných stavů i získáním referenčních křivek za účelem provedení R-maticových výpočtů pro molekuly BeH a OH. Pro BeH navrhneme popis metodou SA-CASSCF v aktivním prostoru 6,2,2,0 a aug-cc-pVDZ bázi, pro OH pak SA-CASSCF v aktivním prostoru 6,2,2,0 nebo 7,3,3,0 a aug-cc-pVDZ bázi, kdy jsme navíc našli nastavení vah jednotlivých stavů výrazně zlepšující tvar křivek. R-maticové výpočty na těchto datech se nám z časových důvodů zatím nepovedlo provést.