

## Errata

**čestné prohlášení:** Zlá formulácia čestného prehlásenia.

Správna formulácia:

### *Čestné prohlášení*

Prohlašuji, že jsem svou bakalářskou práci „Multireferenční CC výpočty s použitím optimalizovaných virtualních orbitalů“ vypracoval samostatně pod odborným dohledem vedoucí bakalářské práce a k jejímu vypracování jsem použil odbornou literaturu uvedenou v seznamu na konci práce. Dále prohlašuji, že jsem v souvislosti s vytvořením bakalářské práce neporušil autorská práva třetích osob.

V Praze dne 15. 9. 2010

### **str.2**

Preklepy v slove výmene v textu uvedené ako výmenne a výmenne.

### **str.2**

Chýbajúce údaje k poznámke pod čiarou k Johnovi Slaterovi.

Správna verzia:

americký fyzik, taktiež známy zavedením exponenciálnych bázových funkcií.

### **str.3, 4 a 5**

Tlačová chyba v členu pre prevrátenú hodnotu vzdialenosti dvoch častíc v rovniciach 12, 13, 15 a 16.

Správne má byť :

$$\delta\mathbb{F} = \sum_a \int (dx_1 \delta\chi_a(1)^* h(1) \chi_a(1)) + \sum_{a,b} \int dx_1 \left( \int dx_2 \delta\chi_a^*(1) \chi_b(2)^* r_{12}^{-1} \chi_a(1) \chi_b(2) - \right.$$

$$\mathcal{J}_b \chi_a(1) = \left( \int \chi_b^*(2) r_{12}^{-1} \chi_b(2) dx_2 \right) \chi_a(1)$$

$$\mathcal{K}_b \chi_a(1) = \left( \int \chi_b^*(2) r_{12}^{-1} \chi_a(2) dx_2 \right) \chi_b(1)$$

$$+ \sum_b \int \int \alpha(\gamma_1)^* \chi_b(2)^* r_{12}^{-1} \chi_b(2) \alpha(\gamma_1) d\gamma_1 dx_2 \psi_a(1) -$$

$$- \sum_b \int \int \alpha(\gamma_1)^* \chi_b(2)^* r_{12}^{-1} \chi_b(1) \alpha(\gamma_2) d\gamma_1 dx_2 \psi_a(2)$$

$$\sum_b \int \int \alpha(\gamma_1)^* \chi_b(2)^* r_{12}^{-1} \chi_b(2) (\gamma_1) d\gamma_1 dx_2 \psi_a(1) -$$

$$- \sum_b \int \int \alpha(\gamma_1)^* \chi_b(2)^* r_{12}^{-1} \chi_b(1) \alpha(\gamma_2) d\gamma_1 dx_2 \psi_a(2)$$

**str.5**

Chýba znamienko plus v rovnici 17.

Správna verzia:

$$E_0 = \langle \Psi_0 | \hat{H} | \Psi_0 \rangle = 2 \sum_a \langle a | h | a \rangle + \sum_{ab} (2 \langle ab | v_{12} | ab \rangle - \langle ab | v_{12} | ba \rangle)$$

**str.8**

Chýbajúce číslo obrázku.

Správna verzia:

obr. 0.1 energetické minima pre jednotlivé metódy

**str.9**

Preklep v slove patričnú v textu uvedené ako partičnú.

**str.14**

Zámena písmena v slove size-extenzivita.

**str.15**

Na obr.3b sú prehodené metódy state-specific a state-universal. V textu na predchádzajúcej strane je to správne.

**str.17**

Preklep v anglickom názve metódy optimalizovaných virtuálnych orbitálov.

Správne by malo byť:

**Optimized virtual orbital space**

**str.17**

Chyba v slove neaktívnych, krátke i namiesto dlhého.

Správne:

energia neaktívnych orbitálov

**str.18**

Chýba znak pre hermitovské združenie operátora  $T_{CCSD}^\dagger$  v rovnici 44.

Správna verzia:

$$F = \langle \psi_0 | T_{CCSD}^\dagger T_{CCSD}^{OVOS} | \psi_0 \rangle$$

**str.19**

V rovnici pre  $T_1^{OVOS}$  sú navyše indexy  $b^*$  a  $j$ .

Správne:

$$T_1^{OVOS} = \sum_{a^*, i} t_i^{a^*} a^{*\dagger} i$$

**str.20**

Zlé znamienko v rovnice 46.

Správna verzia:

$$E_{celk} = E_{MBPT(2)}^{fullVOS} + (E_{CCSD, \dots}^{OVOS} - E_{MBPT(2)}^{OVOS})$$

**str.21**

Gramatická chyba v mene zdroja pre ESR spektrá.

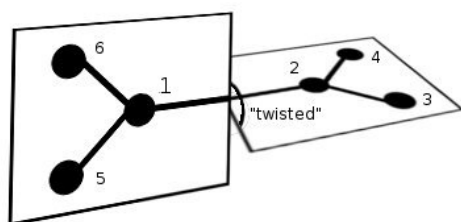
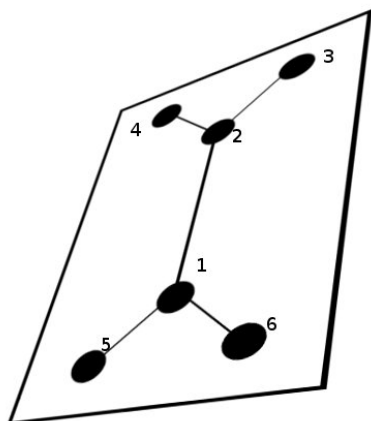
Správne:

obr.5 ESR spektrum P.Dowd et al. *J. Am. Chem. Soc.*, 108

**str.22**

Chaotický obrázok popisujúci geometriu Tetrametylénétánu.

Nová verzia:



**str.22**

Chyba v popisu obrázku 8.

Správne má byť:

obr.8 tetrametylénétán(TME)

**str.23**

Chýbajúce slovo zaistení v texte a preklep v slove výsledkov v rovnakej vete.

Správne:

Ako aproximácia exponenciálneho rozvoja slúžila metóda CCSD. Táto metóda bola použitá pre jej nevelkú výpočetnú náročnosť pri zaistení výborných výsledkov.

**str.25**

Chyba veľkosti písma indexu v názve grupy symetrie  $C_1$  v poznámke pod čiarou.

**str.25**

Chýbajúce písmeno v slove problémom, v textu uvedené ako prolémom.

**str.27**

Zámena spätného lomítka za normálne v jednotkách energie kcal/mol v texte a tabulke 6.

**str.31**

Chýba znak pre ket v rovnici 48

Správne:

$$I = \langle \psi | \hat{H} - E_0 | \psi \rangle = \langle \psi | \hat{H} | \psi \rangle - \langle \psi | E_0 | \psi \rangle = \langle \psi | \hat{H} | \psi \rangle - E_0$$

**str.31**

Preklep v slove najnižšia a reálneho v textu uvedené ako nejnižšia a realného.

## zoznam obrázkov a tabuliek

Chýbajúci zoznam obrázkových príloh

Správne:

<i>Obrázok 0.1</i>	
Energetické minima pre jednotlivé metódy.....	8
<i>Obrázok 1</i>	
$\pi$ orbitály TMM.....	12
<i>Obrázok 2</i>	
Rozdelenie orbitálov pre MCSCF metódy.....	13
<i>Obrázok 3a</i>	
CC metódy rozdelenie.....	14
<i>Obrázok 3b</i>	
Pokr. CC metódy rozdelenie.....	14
<i>Obrázok 4</i>	
Priestor obsadených a virtuálnych orbitálov.....	19
<i>Tabulka 1</i>	
Geometria TME.....	21
<i>Obrázok 5</i>	
ESR spektrum .....	21
<i>Obrázok 6</i>	
Azoprekurzor.....	22
<i>Obrázok 7</i>	
Derivát dihydrazínu.....	22
<i>Obrázok 8</i>	
Tetramethylénetán.....	22
<i>Obrázok 9</i>	
"Twisted" uhol.....	22
<i>Tabulka 2</i>	
Výpočetný čas.....	24
<i>Tabulka 3</i>	
Energia FNO/OVOS.....	24
<i>Graf 1</i>	
SR-CCSD S-T gap OVOS.....	25

<i>Tabulka 4</i>	
BW-CCSD energie.....	26
<i>Tabulka 5</i>	
Mk-CCSD energie.....	26
<i>Tabulka 6</i>	
Rozdiel medzi energiou full VOS a OVOS.....	27
<i>Graf 2</i>	
Závislosť energie BW-CCSD,SR-CCSD na redukcii VOS.....	27
<i>Graf 3</i>	
Závislosť energie Mk-CCSD,SR-CCSD na redukcii VOS.....	28
<i>Graf 4</i>	
Porovnanie závislostí Mk-CCSD a BW-CCSD.....	29