

Abstrakt: Práce se tématicky zabývá metodami numerického popisu anharmonických molekulárních vibrací zahrnujících také vibronické kaplování. Hlavním zájmem je prověřit možnost zda lze souborem interagujících harmonických oscilátorů nahradit pohyb v adiabatickém anharmonickém potenciálu. Práce prvně implementuje a prověřuje numerickou metodu pro hledání vlastních stavů v anharmonických potenciálech. Především pak zahrnuje diskusi, jak přesný popis z hlediska získaných spekter a vlastních stavů poskytuje model vibronického kaplování v porovnání s adiabatickou aproximací stejného modelu.