

Přesné výpočty vibračních energií a vibračních spekter molekul vyžadují započítání anharmonických sil. Ve standardním výpočetním protokolu, jsou velké vibrační matice Hamiltoniánu diagonalizovány a spektrální intenzity počítány pro jednotlivé přechody odděleně. V této práci navrhujeme alternativní přímé generování spektrálních křivek na základě časové propagace náhodné vibrační vlnové funkce následované Fourierovou transformací. Nedostatek zdlouhavé a výpočetně náročné diagonalizace činí metodu vhodnou pro větší molekuly. Je zvláště vhodná pro velké Hamiltoniány, které jsou běžně získány v rámci báze harmonických oscilátorů, a algoritmus umožňuje paralelizaci. Na modelu dimeru vody jsou diskutovány základní vlastnosti konvergence. Metoda je pak použita na vibrační Ramanovy intenzity fenchonu, kde byly získány spektrální profily srovnatelné s výsledky získanými klasickými přístupy.