



## STRESZCZENIE

Niniejsza rozprawa przedstawia badania z dziedziny teoretycznej spektroskopii molekularnej, których celem jest symulowanie zderzeniowo indukowanych kształtów profili linii spektralnych wyprowadzonych z zasad pierwszych. Kluczowym elementem tej pracy jest opracowanie i udoskonalenie metodologii symulacji profili linii widmowych przy użyciu parametrów uzyskanych z obliczeń rozpraszania kwantowego *ab initio*, oraz przetestowane jej na kilku rzeczywistych układach, takich jak  $\text{H}_2\text{-He}$ ,  $\text{HD-He}$ ,  $\text{D}_2\text{-H}_2$ ,  $\text{H}_2\text{-Ar}$  i  $\text{CO-Ar}$ .

Nasza metodologia pozwala na symulowanie kształtów linii w pełni z zasad pierwszych, umożliwiając bezpośrednio porównanie wyników teoretycznych i doświadczalnych. Dzięki temu możliwa jest precyzyjna weryfikacja poprawności naszych obliczeń w oparciu o najdokładniejsze dane eksperymentalne. Niniejsza rozprawa doktorska obejmuje serię testów eksperymentalnych, potwierdzających dokładność symulowanych profili kształtu linii widmowych w kilku zderzeniowych układach molekularnych, w zakresie ciśnienia obejmującym sześć rzędów wielkości. Dzięki naszym obliczeniom rozpraszania kwantowego i dokładnemu modelowaniu kształtu linii spektralnej, odtwarzamy widma eksperymentalne z dokładnością na poziomie poniżej procenta.

Wykorzystując naszą metodologię, stworzyliśmy pierwsze bazy danych parametrów kształtów linii widmowych oparte w pełni na obliczeniach *ab initio*. Nasze zestawy danych pozwalają na symulowanie kształtów linii poza modelem Voigta, uwzględniających zależność rozszerzenia i przesunięcia od prędkości molekuly, oraz efekt Dickego. Niniejsza rozprawa prezentuje kompletne zestawy danych przejść rowibracyjnych molekuł  $\text{H}_2$  i  $\text{HD}$ , zaburzonych helem, oraz najważniejszych linii molekuly  $\text{HD}$  zaburzonej  $\text{H}_2$ .

W niniejszej rozprawie zawarto również nowe metody opisu kształtu linii widmowych w reżimie zdominowanym przez zderzenia zmieniające prędkość. Symulacje linii w tych warunkach, przy użyciu dotychczasowych metod, wymagały wydajnej infrastruktury obliczeniowej. W tej pracy pokazujemy, że kształt linii w tych warunkach można opisać za pomocą profilu Lorentza oraz podajemy analityczne wyrażenia umożliwiające obliczenie efektywnych szerokości i przesunięcia linii.