



## STRESZCZENIE

Przedmiotem niniejszej rozprawy są szerokie badania zależności pomiędzy zderzeniami cząsteczek a spektroskopią. W ramach przedstawionej pracy wyznaczono kluczowe dane referencyjne: współczynniki szybkości przejść zderzeniowych, parametry kształtu linii widmowych oraz położenia i natężenia komponentów nadsubtelnych przejść rotacyjno-wibracyjnych w różnych cząsteczkach dwuatomowych. Podejście zastosowane w rozprawie jest mocno osadzone w teorii kwantowej: wszystkie dane zderzeniowe uzyskano poprzez ścisłe obliczenia kwantowego rozpraszania, przeprowadzone z wykorzystaniem najnowocześniejszych powierzchni energii potencjalnej. Przedstawione wyniki omówiono w kontekście ich zastosowań w astrofizyce, badaniach atmosfery ziemskiej oraz wysokorozdzielczej spektroskopii cząsteczkowego wodoru.

Oprócz dostarczenia praktycznych danych referencyjnych, celem rozprawy jest zmierzenie się z kluczowymi wyzwaniem leżącymi na styku teorii zderzeń kwantowych i teorii kształtu linii widmowych. W szczególności badane są subtelne efekty zderzeniowe ujawniające się w obserwacjach astrofizycznych, analizowana jest rola dokładności powierzchni energii potencjalnej w uzyskiwaniu wiarygodnych danych referencyjnych dla zastosowań teledetekcyjnych, a także wykazana zostaje możliwość przeprowadzania wielkoskalowych obliczeń wychodzących z zasad pierwszych w celu populowania spektroskopowych baz danych. Ponadto, w rozprawie badany jest wpływ oddziaływań nadsubtelnych oraz zewnętrznych pól magnetycznych na precyzyjne pomiary spektroskopowe cząsteczki wodoru. W pracy zaproponowano także nowe metody zwiększania dokładności eksperymentalnej, które umożliwią bardziej rygorystyczne testy teorii kwantowej oparte na spektroskopii najprostszej neutralnej cząsteczki dwuatomowej.