|  |
| --- |
| **Диффузионный подход к определению константы скорости реакции с участием ридберговских состояний атомов и молекул**  ***Озеров Георгий Константинович*** *Аспирант Институт химической физики имени Н .Н.Семенова РАН,   Москва, Россия E–mail:ozerow.georgiy.c@yandex.ru*  Процессы с участием ридберговских состояний атомов и молекул играют важную роль в химической физике низкотемпературной плазмы. Исследование динамики таких реакций требует рассмотрения всей совокупности ридберговских состояний. Стандартным подходом для решения подобных задач в рамках теории рассеяния является метод многоканального квантового дефекта (МКД).  Кроме того, существует ряд полуэмпирических методов, называемых диффузионными подходами, которые хорошо проявили себя в исследовании эндотермических процессов с участием ридберговских состояний. В рамках этой теории на языке заселённостей описывается диффузия по различным состояниям ридберговского электрона в ходе элементарного акта столкновения, которая обусловлена сильной неадиабатической связью ридберговских конфигураций. Несмотря на популярность диффузионного подхода, на сегодняшний день не существует теории, позволяющей из первых принципов определить основные величины, входящие уравнения диффузионного метода.  Целью настоящей работы было разработка теоретического подхода, который позволил бы получить основные соотношения диффузионного подхода и сравнить модельный расчет, произведенный на основе этого метода, с результатами точного решения динамической задачи.  В данной работе техника редукции уравнения эволюции матрицы плотности системы позволила получить систему точных управляющих уравнений относительно заселённостей состояний ридберговского электрона. Эта система имеет стохастический характер и в случае быстро спадающих вероятностей переходов сводится к уравнению диффузии относительно заселенностей ридберговских состояний. Разложение с точностью до второго порядка по неадиабатической связи теории возмущений для коэффициента диффузии хорошо согласуется с выражениями пертурбативной техники теории рассеяния. Модельный расчет показал, что полученные уравнения диффузии применимы в области автоионизационных состояний системы. |