# **ملخص:**

# صعوبة إعادة إنتاج البيانات المقاسة من خلال الحسابات النظرية الكلاسيكية لحركة أيونات النتروجين N+ في غاز ذرة الهيليوم المخفف في دراجات حرارة منخفضةk T=4.3 و 77k المذكورة في عمل TANUMA ، دفعتنا إلى تجربة الحسابات الكمية لتقليل هذا الفشل.

# للقيام بذلك قمنا بإجراء عملية حساب منحنيات الطاقة الكامنة في الحالات المنخفضة المتناظرة مع نظام N+ He ion-atom بما في ذلك تصحيحات Davidson و N+ D في ذرة الهيليوم مع التركيز بشكل خاص على سلوك قابلية الحركة المنخفضة مع نسبة E/N للحقل الكهربائي و كثافة الغاز و محاولة شرح انخفاضه الملحوظ بالقرب من القيمة E/N --10 Td.

**Résumé**

La difficulté à reproduire les données mesurées par des calculs théoriques classiques de la mobilité des ions d'azote N+ dans un gaz dilué de l'hélium He, aux basses températures *T* = 4.3 et 77 K utilisées dans les experiences du groupe de Tanuma, nous a incité à essayer des calculs quantiques pour diminuer cet échec. Pour ce faire, nous avons effectué les calculs des

courbes d'énergie potentielle des états fondamental et excité relatifs au système N+ + He en

utilisant les méthodes SA-CASSCF avec MRCI *abinitio,* y compris les corrections de Davidson et de BSSE. Les coefficients de transport des ions N+ (3*P)* et N+ (1D) dans un gaz d'hélium He sont ensuite soigneusement déterminés, en mettant l'accent sur les comportements de la mobilité réduite *K0* avec le rapport *E* /*N* du champ électrique sur la densité du gaz et en essayant. d'expliquer sa diminution observée vers la valeur *E*/*N* ,...., 10Td.

**Abstract**

The difliculty to reproduce the measured data by a classic-theoretical calculations of mobility of nitrogen ions N+ in dilute atom-gas of helium He at low temperatures *T* = 4.3 and 77 K mentioned in the work of Tanuma group, prompted us to try quantum calculations to minimize this failure. To do this, we have carried out the calculations of the potential­

energy curves of the low lying states corresponding to the N+ +He ion-atom system using the

SA-CASSCF with MRCI *ab initio* methods including the Davidson and BSSE corrections. The transport coefficients of the N+ (3*P)* and N+ (1*D)* ions in He atom are then carefully determined with special emphasis on the behavior of the reduced mobility with the ratio *E* /*N* of the electric field and the gas density and try to explain its observed decrease near the value *E*/*N* ,...., 10Td.