Acta Physica Sinica

类氢O、N离子入射Al表面俘获电子布居几率的理论与实验研究*

张秉章[1)2)] 宋张勇[2)3)†] 张明武[2)3)] 刘璇[2)4)] 钱程[2)3)] 方兴[2)3)] 邵曹杰[2)3)] 王伟[2)3)] 刘俊亮[2)3)] 朱志超[1)‡] 孙良亭[2)3)] 于得洋[2)3)]

1) (南华大学核科学技术学院，衡阳 421001)

2) (中国科学院近代物理研究所，兰州 730000)

3) (中国科学院大学核科学与技术学院，北京 100049)

4) (兰州大学核科学与技术学院，兰州 730000)

本文利用“二态矢量模型”详细研究了高电荷态O^{7+}、N^{6+}离子入射Al表面时中间里德堡态的形成过程，给出了电子被俘获至不同量子数($n_A = 2-7$)的几率，以及电子俘获至里德堡态最可能的离子-表面距离。计算结果表明，较大的主量子数n_A对应较小的里德堡态几率，因此O^{7+}、N^{6+}离子入射Al表面时辐射的X射线主要来源于较小的n_A至基态的退激。为了验证计算结果，我们测量了O^{7+}、N^{6+} 离子入射Al 表面的X射线发射谱，并运用FAC程序计算了不同高里德堡态退激到基态的跃迁能(np-1s)。实验测量到O、N 的K-X射线峰，其特征峰的中心值接近主量子数n=2至n=1的跃迁能，说明发射的X 射线主要来源于2p-1s的跃迁，与“二态矢量模型”理论计算的几率一致。

关键词: 高电荷态离子，里德堡态，二态矢量模型，X射线

PACS: 32.30.Rj, 32.70.-n, 79.20.Rf

* 国家自然科学基金(批准号:11675279，12075291)资助的课题.

† 通信作者. E-mail: songzhy@impcas.ac.cn

‡ 通信作者. E-mail: 22770662@qq.com

录用稿件，非最终出版稿

1 引　言

离子与表面相互作用的研究大约开始于上世纪50年代，得益于加速器、离子源、探测器等多方面技术的发展，离子-表面相互作用的过程变得更加清晰[1,2]。高电荷态离子在接近固体表面的过程中，固体导带中的大量电子会被俘获到离子的高n 轨道，形成所谓的空心原子[3]。当离子进入表面时，会以“侧馈”的方式[4]俘获电子，形成另一种更加紧密的空心原子。空心原子处于不稳定的高激发态，可以通过自电离、Auger电子、以及辐射X射线进行退激[5,6]。随着物理图像的完善，研究人员发现，高电荷态离子中性化的详细动力学过程，对于描述各种复杂的离子-表面相互作用至关重要。对此，近年来许多研究组在理论和实验上都展开了广泛的研究[7−12]。Burgdörfer等人[13]建立的经典过垒模型（the classical over-barrier model，COBM），可描述高电荷态离子接近表面俘获电子的中性化过程。Iwai、Kanai等人[14,15]通过测量高电荷态离子穿过微孔膜后的X 射线，研究了离子俘获电子至其主量子数轨道布居与初始电荷态之间的关系，进一步验证和补充了COBM 模型。尽管现有COBM广泛应用在离子与固体表面相互作用的领域，能解释现有大多数实验[16−19]，但随着研究的深入，研究人员发现，俘获电子的级联退激还需更精确的诠释[20−22]。Song等人[20]测量了$Xe^{q+}(q=27-30)$ 与Al靶相互作用产生的X射线，对比Cowan程序计算的跃迁能，表明：这种X射线主要来自较高量子态($n_A=6-30$)到M壳层的跃迁。理论上，基于Demkov－Ostrovskii碰撞，Nedeljković等人[21,22]提出了二态矢量模型(the two-state vector model，TVM)，对离子入射表面中和过程产生的中间里德堡离子几率进行了计算。

离子-表面相互作用的机理研究不仅推动了基础科学的发展，且具有重要的实际意义[23]。高电荷态离子与靶材料相互作用发生在表面附近，在极短时间（fs）内释放出离子携带的大部分势能，从而诱导固体表面结构发生变化，制备出具有独特性质的纳米材料，其在信息储存、通讯、航天等多个领域具有广泛的应用前景[24−26]。

本工作利用TVM模型计算了O^{7+}、N^{6+}离子俘获导带电子至不同里德堡态的几率，并给出了上述离子俘获电子中和过程中最可能的离子-表面距离。同时，依托中国科学院近代物理研究所的电子回旋共振离子源(electron cyclotron resonance ion resource，ECRIS)，测量了O^{7+}、N^{6+}离子入射Al 表面的K-X射线发射谱，结合FAC程序计算的不同高里德堡态退激到基态的跃迁能，发现实验测量到的O、N离子K-X射线主要来源于$2p$-$1s$的跃迁。

录用稿件，非最终出版稿

2 类氢O、N离子入射Al表面俘获电子分布的理论计算

高电荷态离子与固体表面相互作用是复杂的多体过程，离子俘获电子至某一能级的布居是研究这一过程的重要信息[27,28]。利用COBM模型，我们可得到离子开始俘获电子至高里德堡态的信息，但实际上，被俘获的电子会布居在多个能级，而COBM不能很好地描述这一物理现象。因此，Nedeljković 等人提出了TVM模型，通过两个状态矢量$|\Psi_1(t)\rangle$和$|\Psi_2(t)\rangle$来描述离子-表面相互作用体系的前后电子状态。$|\Psi_1(t)\rangle = \exp\left(-\mathrm{i}\int_{t_{\mathrm{in}}}^{t} \hat{H}_1(R)\mathrm{d}t\right)|\mu_{\mathrm{M}}\rangle$ 由哈密顿量$\hat{H}_1(R)$的本征态$|\mu_{\mathrm{M}}(R)\rangle = |\gamma_{\mathrm{M}}, n_{1\mathrm{M}}, m_{\mathrm{M}}\rangle$表示，用来描述位于固体中的初始电子。其中，$|\mu_{\mathrm{M}}(R)\rangle$对应连续本征能量$E_{\mathrm{M}} = -\gamma_{\mathrm{M}}^2/2$。而$|\Psi_2(t)\rangle = \exp\left(-\mathrm{i}\int_{t_{\mathrm{fin}}}^{t} \hat{H}_2(R)\mathrm{d}t\right)|v_{\mathrm{A}}\rangle$描述了最终被俘获到离子中的电子，由哈密顿量$\hat{H}_2(R)$的本征态$|v_{\mathrm{A}}(R)\rangle = |n_{\mathrm{A}}, l_{\mathrm{A}}, m_{\mathrm{A}}\rangle$表示，$|v_{\mathrm{A}}(R)\rangle$则对应离散本征能量$E_{\mathrm{A}}(R) = -\gamma_{\mathrm{A}}^2(R)/2 = -\tilde{\gamma}_{\mathrm{A}}^2/2 + (2Z-1)/4R$。这里，哈密顿量$\hat{H}_i(R)(i = 1, 2)$，分别是自由电子与极化表面和极化离子的有效相互作用。此外，离子中和过程中，满足$E_{\mathrm{A}}(R) = -\gamma_{\mathrm{A}}^2(R)/2 = -\tilde{\gamma}_{\mathrm{A}}^2/2 + (2Z-1)/4R$的条件时，存在最小离子-表面距离$R_{in}^*$，即

$$R_{in}^* = \frac{(2Z-1)}{2\left(\tilde{\gamma}_A^2 - 2\phi\right)}, \tag{1}$$

其中ϕ是金属的功函数。

考虑到中和过程的多电子特性，俘获电子形成里德堡离子的几率[21,27,28]为：

$$P_{\nu_A}(t) = \int \sum_{n_{1M}, m_M} T_{\mu_M, \nu_A}(t) d\gamma_M, \tag{2}$$

其中，$T_{\mu_M,\nu_A}(t)$为相应的电子转移概率密度，表示为：

$$T_{\mu_M,\nu_A}(t) = \left|\int_{t_{in}}^{t} I_{\mu_M,\nu_A}(t)dt\right|^2, \tag{3}$$

此处，

$$I_{\mu_M,\nu_A}(t) = \frac{i}{2}\int\left[\frac{\vec{\nabla}\Psi_1}{\Psi_1} - \frac{\vec{\nabla}\Psi_2^*}{\Psi_2^*} - 2iv\left(1 - \frac{da}{dR}\right)\vec{e}_z\right] \times \Psi_2^*(t)\Psi_1(t)\cdot d\vec{S}. \tag{4}$$

最终，通过归一化$\tilde{P}_{v_A}(t) = P_{V_A}/P_{V_A}^{\mathrm{fin}}$，离子俘获电子中和过程的中间阶段概率由(5)式给出：

$$\tilde{P}_{v_A}(t) = 2v\left(\frac{R}{R_{in}^*}\right)^{\tilde{\alpha}}\left(\frac{\tilde{\alpha}}{R} - \tilde{\beta}\right)e^{-\tilde{\beta}(R-R_{in}^*)} \times \left[\left(\frac{R}{R_{in}^*}\right)^{\tilde{\alpha}} e^{-\tilde{\beta}(R-R_{in}^*)} - 1\right], \tag{5}$$

其中，$\tilde{\alpha} = Z/\tilde{\gamma}_A - 1/2 + 1/(4\gamma_M)$，$\tilde{\beta} = (\gamma_M + \tilde{\gamma}_A)/2$。$\tilde{\gamma}_A$代表金属中的导带电子被离子俘获后占据的离子态所对应的能级参数,其相关值可利用NIST ASD[29]提供的能级数据，由$\tilde{\gamma}_A = \sqrt{-2\tilde{E}_A}$计算得到，如表1所示。表中，里德堡态离子的轨道角动量为l_A，自旋均为0，最小总角动量$J = |l_A|$。从NIST ASD 中可以知道，电子组态为$1s2s$的O^{6+}离子能量为568.89 eV，对应表1中$n_A = 2$，$l_A = 0$的情况，O^{7+}离子的能量为739.33 eV；根据上述$\tilde{\gamma}_A$ 计算公式可得$\tilde{\gamma}_A = \sqrt{-2 * (568.89 - 739.33)/27.2} = 3.540$。

录用稿件，非最终出版稿

表1　O^{7+}、N^{6+}离子在考虑离子极化下的能级参数$\tilde{\gamma}_A$ (a.u.)，及不考虑离子极化下的参数$\gamma_{A0} = Z/n_A$ (a.u.)。

Table 1. Energy parameter $\tilde{\gamma}_A$ (a.u.) and $\gamma_{A0} = Z/n_A$ (a.u.) for the ions O^{7+} and N^{6+}, separately correspond to the cases with and without polarization of the ionic core.

n_A	$l_A = 0$	$l_A = 1$	$l_A = 2$	$l_A = 3$	γ_{A0}
O^{7+}(Z = 7)					
2	3.540	3.487			3.500
3	2.352	2.328	2.334	2.334	2.333
4	1.760	1.748	1.751	1.751	1.750
5		1.399	1.400	1.401	1.400
6		1.166	1.167	1.168	1.167
7		1.003			1.000
N^{6+}(Z = 6)					
2	3.040	2.987			3.000
3	2.018	1.994	2.000		2.000
4	1.510	1.497	1.500		1.500
5	1.207	1.195	1.200		1.200
6		0.999			1.000
7		0.855			0.857

基于表1计算的能级参数，通过公式(5)我们给出了离子俘获电子至里德堡态v_A $(n_A = 3; l_A = 0, 1, 2, 3)$的几率，如图1所示。其中，实线对应于有离子极化的情况，虚线则是不考虑离子极化，即考虑点状核模型时的值。从图1中可知，是否考虑离子极化对于离子俘获电子至里德堡态的几率几乎无影响，因此，使用不完整的NIST数据，仍可使用点状核模型进行估算。

录用稿件，非最终出版稿

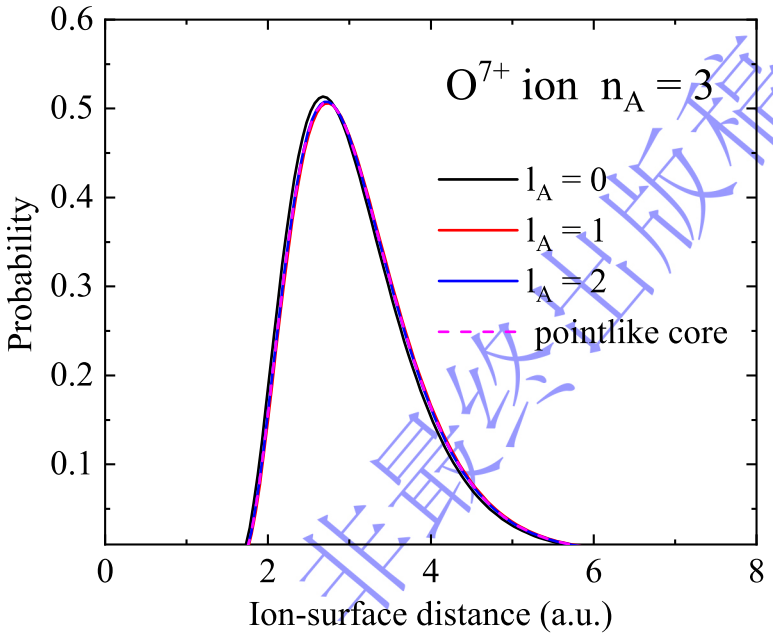

图1　O^{7+}离子俘获电子至里德堡态v_A ($n_A = 3; l_A = 0, 1, 2, 3$)的几率，其中$l_A = 2$和$l_A = 3$的几率相等；虚线对应点状核模型。

Fig. 1. Probability for the O^{7+} ion capturing an electron into the Rydberg states ($n_A = 3; l_A = 0, 1, 2, 3$), where the values of $l_A = 2$ and $l_A = 3$ are equal. Dashed curves correspond to the case of the pointlike core.

在图2(a)和(b)中，分别给出了O^{7+}、N^{6+}离子入射Al 表面、俘获电子至不同主量子数轨道的几率。从图2可以明显发现，较大的主量子数n_A对应较小的里德堡态几率。随着n_A的增加，电子俘获至对应里德堡态的几率趋向于更大的离子-表面距离。此外，几率函数的半高宽也随着n_A的增加而增加，意味着在较大n_A时中和过程更困难。本研究中，我们还估计了高电荷态离子与固体表面相互作用期间首先填充的里德堡态所对应主量子数n_A 约为9。离子逼近表面过程中，级联退激发以及电子俘获至较低能态的双向过程形成了如图2所示的中间状态的布局。

录用稿件，非最终出版稿

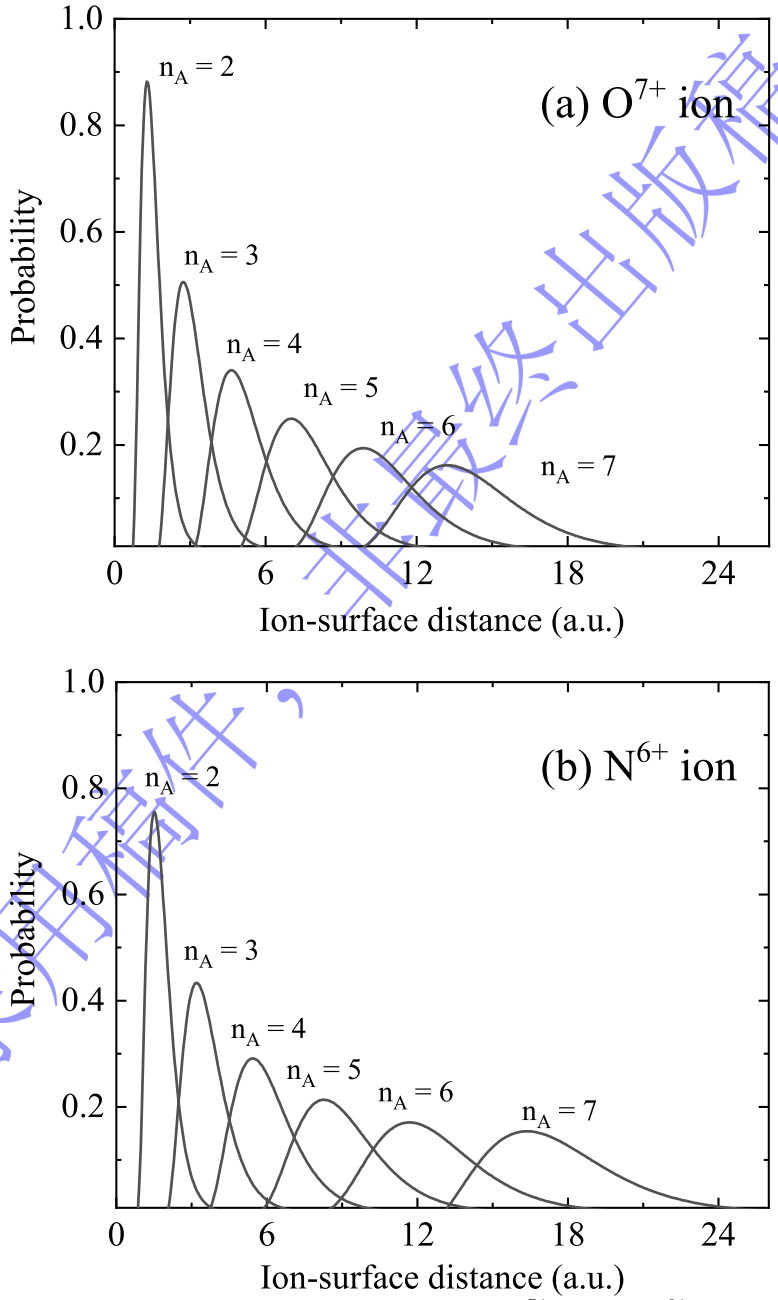

图2　电子被俘获至不同里德堡态($n_A = 2-7$)的几率。(a) O^{7+}离子，(b) N^{6+}离子。

Fig. 2. Probability for the electron captured into the Rydberg states ($n_A = 2-7$). (a) the O^{7+} ion, (b) the N^{6+} ion.

TVM模型除了能给出不同特征里德堡态离子的几率，还能给出中和距离R_c^N，其由里德堡离子的几率最大值$P_{\nu_A}^{\max}$决定。表2 给出了O^{7+} 和N^{6+}离子的中和距离值，即离子中和过程中发生电荷交换最可能的离子-表面距离。基于现有的研究理论，可以知道离子在到达临界距离时，开始俘获电子至较大的里德堡态，此后，随着离子不断接近表面，其会通过不断共振俘获以及级联退激使得电子填充到较小的主量子数n_A，导致空心原子的尺寸不断收缩，最终发射X射线。从表2中可以发现，中和距离R_c^N越小，离子俘获电子所

录用稿件，非最终出版稿

布局的主量子数n_A越小，这与离子与表面相互作用的物理图像一致，能够动态描述离子中和过程的中间阶段。

表2　TVM模型计算的O^{7+}、N^{6+}离子的中和距离。括号中的值代表点状核模型的中和距离。
Table 2. The neutralization distances for the O^{7+} and N^{6+} ions calculated by TVM. Numbers in parentheses are the neutralization distances for the pointlike ionic core case.

n_A	$l_A=0$	$l_A=1$	$l_A=2$	$l_A=3$
O^{7+}				
2	1.27(1.28)	1.28(1.28)	(1.28)	(1.28)
3	2.68(2.74)	2.75(2.74)	2.69(2.74)	2.69(2.74)
4	4.60(4.62)	4.63(4.62)	4.62(4.62)	4.62(4.62)
5	(7.01)	7.02(7.01)	7.01(7.01)	7.01(7.01)
6	(9.87)	9.88(9.87)	9.87(9.87)	9.81(9.87)
7	(13.30)	13.21(13.30)	(13.30)	(13.30)
N^{6+}				
2	1.45(1.51)	1.52(1.51)	(1.51)	(1.51)
3	3.15(3.18)	3.18(3.18)	3.18(3.18)	(3.18)
4	5.36(5.39)	5.45(5.39)	5.39(5.39)	(5.39)
5	8.13(8.22)	8.25(8.22)	8.22(8.22)	(8.22)
6	(11.65)	11.66(11.65)	(11.65)	(11.65)
7	(16.29)	16.37(16.29)	(16.29)	(16.29)

根据COBM模型可以知道，当高电荷态O^{7+}离子入射Al表面达到临界距离$R_c=\sqrt{8Z+2}/(2\phi)=24.66$ a.u. 时，会通过共振转移的方式俘获金属的导带电子到其高里德堡态$n_c\approx\frac{Z}{\sqrt{2\phi}}\left(1+\frac{Z-1/2}{\sqrt{8Z}}\right)^{-1/2}\approx 9$。其中，$Z$为入射离子的电荷态，$\phi$是金属功函数，取4.2 eV。此前的实验研究表明，离子直接从高里德堡态退激到基态的几率很小，基于COBM模型只能计算离子俘获导带电子至较高里德堡态，无法获得由于级联退激以及继续俘获形成的电子布居分布信息；而TVM模型可以详细地描述离子的中和过程，给出级联中间态的概率。

3　类氢O、N离子入射Al表面X射线谱的实验结果

本实验依托近物所ECRIS，测量了3-20 keV/q的O^{7+}、N^{6+}离子轰击经过表面净化、纯度为99.99%的Al靶产生的X射线[30]。实验中，靶的面积为17×17 mm^2，厚度0.5 mm，靶上束斑直径在2 mm 内，束

录用稿件，非最终出版稿

流强度nA量级。高分辨率的无窗SDD探测器能够检测到C-K线以上的X射线，用于本实验X射线测量。探测器探头对准靶的中心位置，距靶140 mm。图3和图4分别给出了能量为3和20 keV/q的O^{7+}与N^{6+}离子发射的X射线相对强度，归一到10^{11}个入射离子。

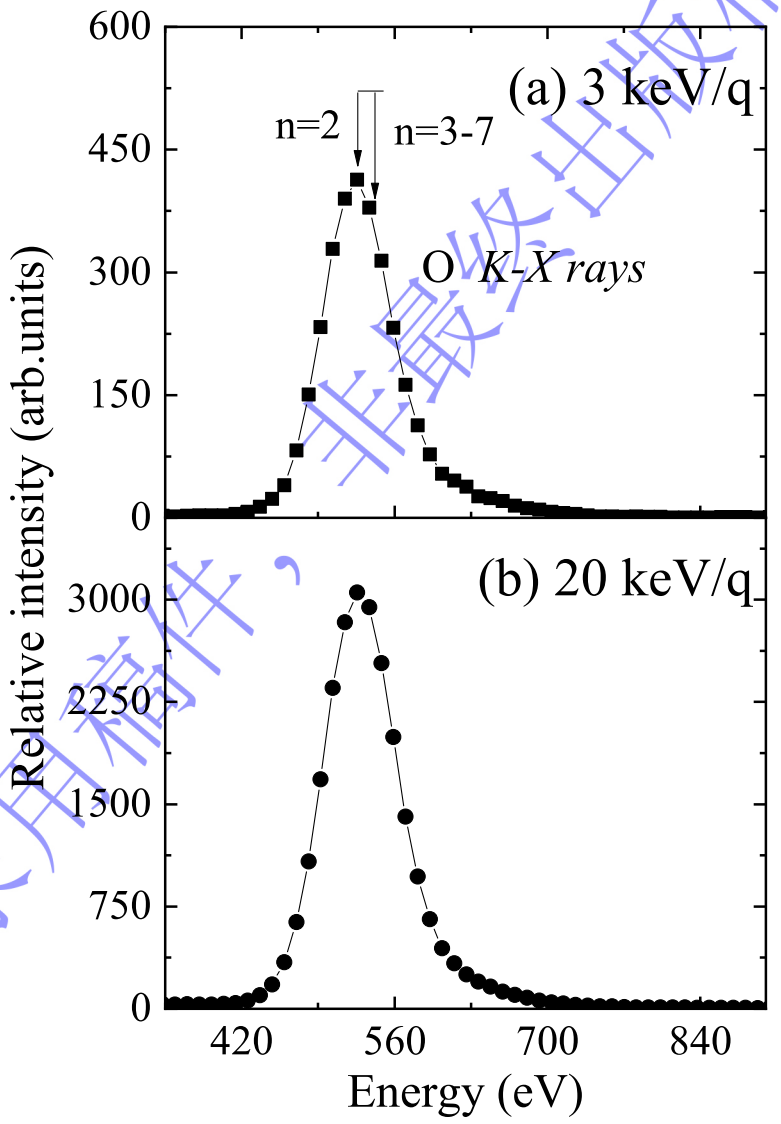

图3　O^{7+}离子入射Al表面发射的X射线谱，其中(a)为3 keV/q，(b) 为20 keV/q。图中箭头标示了FAC程序计算的不同里德堡态退激到基态的跃迁能。

Fig. 3. X-ray spectra induced by O^{7+} ions impact on aluminum surfaces at (a) 3 keV/q and (b) 20 keV/q collisional energy. The arrows indicate the calculated x-ray energies for different Rydberg states to the ground state by FAC code.

录用稿件，非最终出版稿

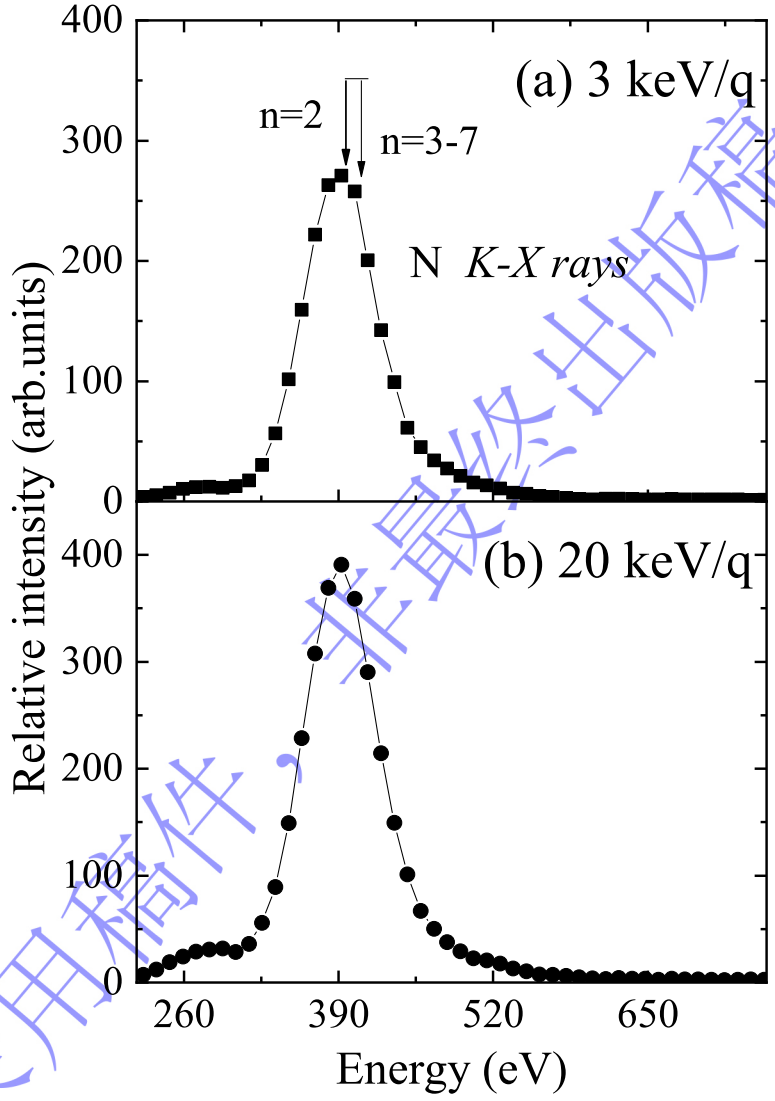

图4 N^{6+}离子入射Al表面发射的X射线谱，其中(a)为3 keV/q，(b) 为20 keV/q。图中箭头标示了FAC程序计算的不同里德堡态退激到基态的跃迁能。

Fig. 4. X-ray spectra generated by N^{6+} ions incident on aluminum surfaces at (a) 3 keV/q and (b) 20 keV/q collisional energy. The arrows indicate the calculated x-ray energies for different Rydberg states to the ground state by FAC code.

利用FAC程序计算了高里德堡态退激到基态的跃迁能(np-1s)，见表3。可以看到，在主量子数($n_A = 3-7$)的情况下，跃迁能变化不明显。囿于探测器的实际分辨本领，实验中只观测到一个K-X射线峰，其能量峰的中心值接近主量子数n=2至n=1的跃迁能，这也与前文TVM计算的不同里德堡态离子的布居状态相吻合。

录用稿件，非最终出版稿

表3　基于FAC程序计算的不同高里德堡态退激到基态的跃迁能（np-1s）

Table 3. Calculated transition energy for different Rydberg states to the ground state using FAC code (np-1s).

O ion	$2p-1s$	$3p-1s$	$4p-1s$	$5p-1s$	$6p-1s$	$7p-1s$
Energy(eV)	526.4	541.5	543.5	543.9	544.1	544.2
N ion	$2p-1s$	$3p-1s$	$4p-1s$	$5p-1s$	$6p-1s$	$7p-1s$
Energy(eV)	395.8	407.8	409.7	410.1	410.3	410.4

如果要在实验上更好地验证TVM模型给出的不同特征里德堡态离子的几率，需要使用分辨本领更高的探测器（如晶体谱仪），将主量子($n_A = 2-7$)跃迁至基态的能量峰分辨出来，以此来确定不同里德堡态退激到基态对K-X射线峰产生的贡献。

图5给出了不同能量的O^{7+}、N^{6+}离子与Al靶表面相互作用时发射的K-X射线产额。从图中可以看出，O的K-X射线产额高于N的K-X射线产额，尤其当离子的引出电压（对应离子能量）较高时更为明显，而在离子能量较低时两者的K-X产额几乎相同。当类氢离子入射金属表面时，在表面上和表面下分别形成“上表面空心原子”和“下表面空心原子”，其退激辐射K-X射线。离子的引出电压较高时，其在靶中的射程较长，必须同时考虑两种空心原子的贡献。由于O离子的电荷态高于N离子，相同的引出电压对应更高的离子动能，因此O离子的产额高于N离子的X射线产额。当离子的引出电压较低时，如实验中的3 kV，测量的X射线主要由“上表面空心原子”衰变所致，类氢N和类氢O离子形成“上表面空心原子”的临界距离差别很小，因此辐射的X 射线产额基本一样。此外，图5还显示出，类氢O离子的产额随引出电压有增加的趋势，这进一步表明实验测量的K-X射线产额同时包含了“上表面空心原子”和“下表面空心原子”的衰变的贡献。然而，实验测得的类氢N离子的K-X射线产额与引出电压无明显依赖关系，这可能是由于实验误差导致。本实验设计了束流密度计来测量入射离子数目，而非测量靶电流，以避免二次电子发射对于测量结果的影响。即便如此，入射离子数目的相对误差仍然有15%。此外，实验误差还包括X射线计数（约为5%），探测器探测效率（约为3%），探测立体角（约为2%），因此总的实验误差在25%左右。另外，对于高电荷态离子，其进入进入靶中由于较大的电荷交换几率会造成较大的能损歧离，这也将引起X射线产额较大的测量误差。因此，空心原子衰变的X射线测量，应尽量在较低的离子引出电压下进行，这样测量的X射线只包含“上表面空心原子”的贡献，避免了离子在靶中的能损歧离引起的产额误差。

录用稿件，非最终出版稿

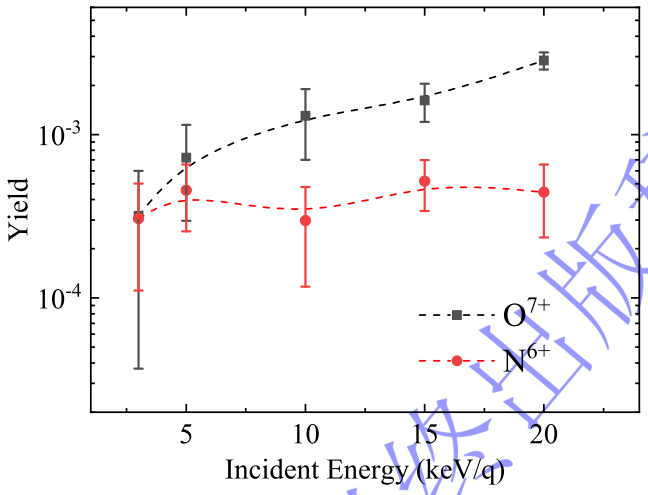

图5　3-20 keV/q的O^{7+}、N^{6+}离子入射Al表面的X射线产额。

Fig. 5. X-ray yield by the bombardment of O^{7+} and N^{6+} ions on aluminium surface with 3-20 keV/q incident energies.

录用稿件，非最终出版稿

4 结　论

本文基于TVM模型给出了O^{7+}、N^{6+}离子入射Al表面、俘获电子至不同主量子数轨道的中间态几率。研究发现：较大的主量子数n_A对应较小的里德堡态几率，且随着n_A 的增加，几率函数的半高宽不断增加，发生中和过程趋向于更大的离子-表面距离，意味着在n_A较大时更困难。同时，结合实验上测量的O^{7+}、N^{6+}离子入射Al表面的X射线发射谱，以及FAC程序计算的不同高里德堡态退激到基态的跃迁能，证实上述离子的K-X射线主要来源于$2p$-$1s$的跃迁，这与TVM获得的不同里德堡态离子的布居几率相吻合。

5 参考文献

[1] Arnau A, Aumayr F, Echenique P M, Grether M, Heiland W, Limburg J, Morgenstern R, Roncin P, Schippers S, Schuch R, Stolterfoht N, Varga P, Zouros T J M, Winter H 1997 *Surf. Sci. Rep.* **27** 113

[2] Schenkel T, Hamza A V, Barnes A V, Schneider D H 1999 *Prog. Surf. Sci.* **61** 23

[3] Winter H, Aumayr F 1999 *J. Phys. B: At. Mol. Opt. Phys.* **32** R39

[4] Song Z Y, Yang Z H, Xiao G Q, Xu Q M, Chen J, Yang B, Yang Z R 2011 *Eur. Phys. J. D* **64** 197

[5] Zhao Y T, Xiao G Q, Zhang X A, Yang Z H, Zhan W L, Chen X M, Li F L 2006 *Nucl. Instrum. Methods Phys. Res., Sect. B* **245** 72

[6] Zhao Y T, Xiao G Q, Zhang X A, Yang Z H, Zhang Y P, Zhan W L, Chen X M, Li F L 2007 *Nucl. Instrum. Methods Phys. Res., Sect. B* **258** 121

[7] Zhang X A, Mei C X, Zhang Y, Liang C H, Zhou X M, Zeng L X, Li Y Z, Liu Y, Xiang Q L, Meng H, Wang Y J 2020 *Acta Phys. Sin.* **69** 213301 (in Chinese) [张小安, 梅策香, 张颖, 梁昌慧, 周贤明, 曾利霞, 李耀宗, 柳钰, 向前兰, 孟惠, 王益军 2020 物理学报 **69** 213301]

[8] Lei Y, Cheng R, Zhou X M, Wang X, Wang Y Y, Ren J R, Zhao Y T, Ma X W, Xiao G Q 2018 *Eur. Phys. J. D* **72** 132

[9] Zhang X A, Li Y Z, Zhao Y T, Liang C H, Cheng R, Zhou X M, Wang X, Lei Y, Sun Y B, Xu G, Li J Y, Xiao G Q 2012 *Acta Phys. Sin.* **61** 113401 (in Chinese) [张小安, 李耀宗, 赵永涛, 梁昌慧, 程锐, 周贤明, 王兴, 雷瑜, 孙渊博, 徐戈, 李锦玉, 肖国青 2012 物理学报 **61** 113401]

[10] Zhang H, Chen X, Yang Z, Xu J, Cui Y, Shao J, Zhang X, Zhao Y, Zhang Y, Xiao G 2010 *Nucl. Instrum. Methods Phys. Res., Sect. B* **268** 1564

[11] Nedeljković L D, Nedeljković N N, Božanić D K 2006 *Phys. Rev. A* **74** 032901

[12] Borisov A G, Zimny R, Teillet-Billy D, Gauyacq J P 1996 *Phys. Rev. A* **53** 2457

[13] Burgdörfer J, Lerner P, Meyer F W 1991 *Phys. Rev. A* **44** 5674

[14] Iwai Y, Murakoshi D, Kanai Y, Oyama H, Ando K, Masuda H, Nishio K, Nakao M, Tamamura T, Komaki K, Yamazaki Y 2002 *Nucl. Instrum. Methods Phys. Res., Sect. B* **193** 504

[15] Kanai Y, Nakai Y, Iwai Y, Ikeda T, Hoshino M, Nishio K, Masuda H, Yamazaki Y 2005 *Nucl. Instrum. Methods Phys. Res. Sect. B* **233** 103

[16] Tökési K, Wirtz L, Lemell C, Burgdörfer J 2000 *Phys. Rev. A* **61** 020901

录用稿件，非最终出版稿

[17] Ninomiya S, Yamazaki Y, Koike F, Masuda H, Azuma T, Komaki K, Kuroki K, Sekiguchi M 1997 *Phys. Rev. Lett.* **78** 4557

[18] Ninomiya S, Yamazaki Y, Azuma T, Komaki K, Koike F, Masuda H, Kuroki K, Sekiguchi M 1997 *Phys. Scr.* **T73** 316

[19] Aumayr F, Kurz H, Schneider D, Briere M A, McDonald J W, Cunningham C E, Winter H 1993 *Phys. Rev. Lett.* **71** 1943

[20] Song Z Y, Yang Z H, Zhang H Q, Shao J X, Cui Y, Zhang Y P, Zhang X A, Zhao Y T, Chen X M, Xiao G Q 2015 *Phys. Rev. A* **91** 042707

[21] Nedeljković N N, Majkić M D 2007 *Phys. Rev. A* **76** 042902

[22] Nedeljković N N, Nedeljković L D, Mirković M A 2003 *Phys. Rev. A* **68** 012721

[23] Gillaspy J D, Pomeroy J M, Perrella A C, Grube H 2007 *J. Phys. Conf. Ser.* **58** 451

[24] Tona M, Watanabe H, Takahashi S, Nakamura N, Yoshiyasu N, Sakurai M, Terui T, Mashiko S, Yamada C, Ohtani S 2007 *Nucl. Instrum. Methods Phys. Res., Sect. B* **256** 543

[25] Heller R, Facsko S, Wilhelm R A, Moller W 2008 *Phys. Rev. Lett.* **101** 096102

[26] El-Said A S, Wilhelm R A, Heller R, Facsko S, Lemell C, Wachter G, Burgdorfer J, Ritter R, Aumayr F 2012 *Phys. Rev. Lett.* **109** 117602

[27] Nedeljković N N, Majkić M D, Božanić D K, Dojčilović R J 2016 *J. Phys. B: At. Mol. Opt. Phys.* **49** 125201

[28] Nedeljković N N, Majkić M D, Galijaš S M D 2012 *J. Phys. B: At. Mol. Opt. Phys.* **45** 215202

[29] Kramida A, Ralchenko Y, Reader J, NIST ASD Team 2021 NIST Atomic Spectra Database [EB/OL] https://physics.nist.gov/asd [2021-12-27]

[30] Zhang B Z, Song Z Y, Liu X, Qian C, Fang X, Shao C J, Wang W, Liu J L, Xu J K, Feng Y, Zhu Z C, Guo Y L, Chen L, Sun L T, Yang Z H, Yu D Y 2021 *Acta Phys. Sin.* **70** 193201 (in Chinese)

录用稿件，非最终出版稿

[张秉章, 宋张勇, 刘璇, 钱程, 方兴, 邵曹杰, 王伟, 刘俊亮, 徐俊奎, 冯勇, 朱志超, 郭艳玲, 陈林, 孙良亭, 杨治虎, 于得洋 2021 物理学报 **70** 193201]

录用稿件，非最终出版稿

Theoretical and experimental studies on the captured electron population probability of hydrogen-like O and N ions in collision with Al surface *

Zhang Bing-Zhang[1)2)] Song Zhang-Yong[2)3)†] Zhang Ming-Wu[2)3)] Liu Xuan[2)4)] Qian Cheng[2)3)] Fang Xin[2)3)] Shao Chao-Jie[2)3)] Wang Wei[2)3)] Liu Jun-Liang[2)3)] Zhu Zhi-Chao[1)‡] Sun Liang-Ting[2)3)] Yu De-Yang[2)3)]

1) (*School of nuclear science and technology, University of South China, Hengyang 421001, China*)

2) (*Institute of Modern Physics, Chinese Academy of Science, Lanzhou 730000, China*)

3) (*School of nuclear science and technology, University of Chinese Academy of Sciences, Beijing 100049, China*)

4) (*School of nuclear science and technology, Lanzhou University, Lanzhou 730000, China*)

录用稿件，非最终出版稿

Abstract

The study of the interaction between highly charged ions and solid surfaces not only has great significance for basic scientific research such as atomic physics, astrophysics, and high energy density physics but also has promising application prospects in biomedicine, nanotechnology, surface analysis, and microelectronics. In this paper, the intermediate Rydberg states formed during highly charged O^{7+} and N^{6+} ions incident on Al surface are studied theoretically by using the two-state vector model. Both the probability of electron capture into different Rydberg states ($n_A = 2-7$) and the most probable neutralization distances are given. The calculation shows that the larger principal quantum number n_A is relevant to smaller probability. Therefore, the X-rays emitted by O^{7+} and N^{6+} ions incident on the Al surface come

* the National Natural Science Foundation of China (Grant Nos. 11675279，12075291).

† Corresponding author. E-mail: songzhy@impcas.ac.cn

‡ Corresponding author. E-mail: 22770662@qq.com

mainly from the de-excitation of the smaller n_A to the ground state. In order to confirm the calculations, we measured the X-ray emission spectra of O^{7+} and N^{6+} ions in collisions with the Al surface in the energy range of 3-20 keV/q. The experiments were performed at an ECR ion source located in Institute of modern physics. We also calculated the transition energies (np-1s) from different high Rydberg states to the ground state by using the FAC code. The center of the measured K X-ray peak is close to the calculated transition energy from the principal quantum number n=2 to n=1, it is consistent with our results obtained by the two-state vector model as well. In addition, we found the experimental K X-ray yield for O^{7+} ions incidence at lower energy collisions is almost the same with N^{6+} ions, but larger at higher energy collisions. When the ion incident kinetic energy is low, the X-ray emission is mainly owing to the decay of "above the surface" hollow atoms. Because of the small difference in the critical distances for the capture of electrons by O^{7+} and N^{6+} to form hollow atoms, the X-ray yields produced in both cases are almost the same at low energy collisions. In contrast, as increasing the incident energy, the ions have a long-range in the target, so the contribution from the decay of "above the surface" and "below the surface" hollow atoms need to be considered at the same time.

Keywords: highly charged ions; Rydberg states; the two-state vector model; X-rays

PACS: 32.30.Rj, 32.70.-n, 79.20.Rf

录用稿件，非最终出版稿