

## 金属酸化物における酸素の電子状態マッピング

### Electronic state mapping of oxygen in metal oxide

物材研<sup>1</sup>, 京大化研<sup>2</sup> ◯治田 充貴<sup>1,2</sup>, 長井 拓郎<sup>1</sup>, 倉嶋 敬次<sup>1</sup>, 島川 祐一<sup>2</sup>, 倉田 博基<sup>2</sup>, 木本 浩司<sup>1</sup>

NIMS<sup>1</sup>, ICR Kyoto Univ.<sup>2</sup>, ◯Mitsutaka Haruta<sup>1</sup>, Takuro Nagai<sup>1</sup>, Keiji Kurashima<sup>1</sup>, Yuichi Shimakawa<sup>2</sup>, Hiroki Kurata<sup>2</sup>, Koji Kimoto<sup>1</sup>

E-mail: haruta@eels.kuicr.kyoto-u.ac.jp

近年、走査型透過電子顕微鏡(STEM: Scanning Transmission Electron Microscopy)と電子エネルギー損失分光法(EELS: Electron Energy Loss Spectroscopy)を組み合わせることによって、原子分解能での元素マッピングや電子状態マッピングが可能となっている。このように電子顕微鏡技術は単に原子を見るだけでなく、組成の違いや状態の違いをも可視化するところまで至っている。電子状態のマッピングで重要なことは、こういった『状態』を可視化するかということであるが、本研究は金属酸化物材料の中でも特に酸素原子に着目し、どの酸素がどの金属の電子軌道と化学結合しているのかという情報にコントラストを付けて可視化したものである。<sup>2</sup>

試料は、Cu 酸化物材料である層状ダブルペロブスカイト型構造の  $\text{La}_2\text{CuSnO}_6$  (Fig. 1)や  $\text{K}_2\text{NiF}_4$  型構造の  $\text{La}_2\text{CuO}_4$  を使用した。構造的特徴としては、 $\text{Cu}^{2+}$ が Jahn-Teller 効果を引き起こすことにより  $\text{CuO}_6$ 八面体が引き延ばされた構造をとる。

Fig.2 に  $\text{La}_2\text{CuSnO}_6$  の STEM 像(a)と原子分解能酸素マッピング(b)を示す。STEM 像では見ることが出来ない酸素サイトが原子分解能で可視化されている。また、(c, d)に EELS の酸素 K-edge に見られる微細構造を用いて結像した、カチオンとの混成軌道の違いを反映した酸素マッピングを示す。電子状態の違いを反映して酸素サイトがそれぞれ異なるコントラストで観察されていることが分かる。このように、酸素の電子状態をマッピングすることでカチオンとの化学結合の異方性を可視化することができることがわかる。

[1] M. Haruta et al., *Appl. Phys. Lett.*, **100**, 163107 (2012)

[2] M. Haruta et al., *J. Appl. Phys.*, **114**, 083712 (2013)

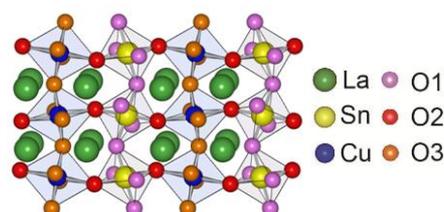


Fig. 1 Crystal structure of layered  $\text{La}_2\text{CuSnO}_6$

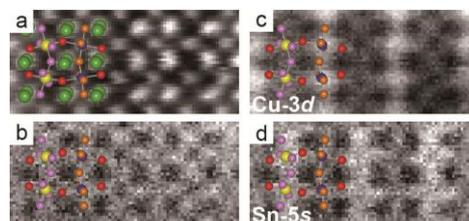


Fig. 2 (a) STEM image. (b) Atomic resolution oxygen mapping. Oxygen hybridization state mapping with (c) Cu 3d and (d) Sn 5s states.