

電子顕微鏡法による酸素 2p 電子軌道の可視化

Visualization of Oxygen 2p Orbital by Electron Microscopy

京都大学化学研究所¹ ○(D)岩清水 千咲¹, 治田 充貴¹, 倉田 博基¹Institute for Chemical Research, Kyoto University¹, °Chisaki Iwashimizu¹, Mitsutaka Haruta¹,Hiroki Kurata¹

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

【緒言】

電子軌道は化学結合や化学反応、物質・材料の特性に密接に関係する。走査型透過電子顕微鏡 (STEM)と電子損失エネルギー分光法(EELS)を組み合わせた STEM-EELS 法は、原子位置にリンクした局所的なエネルギースペクトルを原子像と同時に取得でき、電子状態を可視化する様々なマッピングが報告されている。近年では次のステップとして、電子軌道の可視化が期待されているが[1]、実際には電子線ダメージや試料ドリフト等の実験的課題が残されており、依然として実験的な電子軌道可視化には至っていない。そこで本研究は、当研究室で開発されたデータ積算法[2]と正確なノイズ除去法[3]を応用して実験的課題を克服し、酸素 O 2p 軌道を可視化する事を試みた。

【方法】

ルチル型酸化チタン TiO₂を [001] 軸投影し、原子像と EELS スペクトルを同時取得した後、検出カメラの素子のダークノイズを正確に除去したのち、ゲイン変動を補正した。また、像歪みを非線形補正しデータを積算する事で S/N が大幅に向上した。

【結果と考察】

Fig. 1(b)の O K-edge スペクトル全体から得られた酸素マップ、ピーク[A]、[B]から得られたマップを比較すると、その強度の空間分布が僅かに異なる結果が得られた。スペクトルには 1s 軌道から非占有 2p 軌道への励起が反映され、ピーク[A]、[B]はそれぞれ Ti 3d(t_{2g})、3d(e_g)軌道と O 2p 軌道との混成による σ*、π*軌道に帰属できる。得られたマップは異なる空間分布を有する O 2p 軌道(p_x, p_y, p_z)の異方性を反映しているものと考えられる。

[1] S. Löffler et al., *Ultramicroscopy*, **131**, 39 (2013) [2] M. Haruta et al., *Phys. Rev. B*, **97**, 205139 (2018) [3] M. Haruta et al., *Ultramicroscopy*, **207**, 112827 (2019)

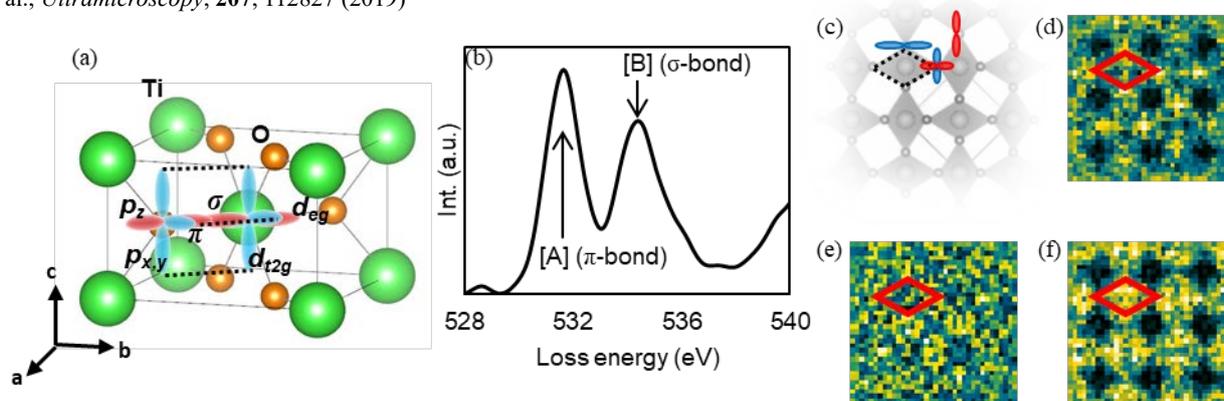


Fig. 1 (a) Structure model of TiO₂ (b) O K-edge EELS spectrum (c) Structure model projected along [001] (d) Oxygen element map (e) [A] map (f) [B] map