

口頭講演 | R2：結晶構造・結晶化学・物性・結晶成長・応用鉱物

2026年9月24日(木) 16:15 ~ 18:00 | B会場 (285号室)

R2：結晶構造・結晶化学・物性・結晶成長・応用鉱物

座長:小松 一生、井上 紗綾子

ハイブリッド形式で開催します。オンラインで参加される場合は「オンライン会議に参加」をクリックしてください。

17:45 ~ 18:00

[R2-06] $\text{Fe}_x\text{Ti}_y\text{O}_z$ 結晶の電子密度分布の圧力変化と弾性特性*山中 高光¹ (1. 阪大・院理)

キーワード：ブロッカイト、イルメナイト、体積弾性率、分子軌道計算、電子密度分布

Fe_2TiO_5 , FeTiO_3 , Fe_2TiO_4 , Fe_3O_4 結晶の電子密度分布の圧力変化と、これらの酸化物の単位胞、陽イオンサイト、空孔サイトの体積の圧力変化とbulk modulus.

FeO_6 六配位位置の d-p- π 混成軌道の圧力効果の解明

分子軌道計算(MO)によるd-p- π 混成軌道の電子密度分布の状態の解明。

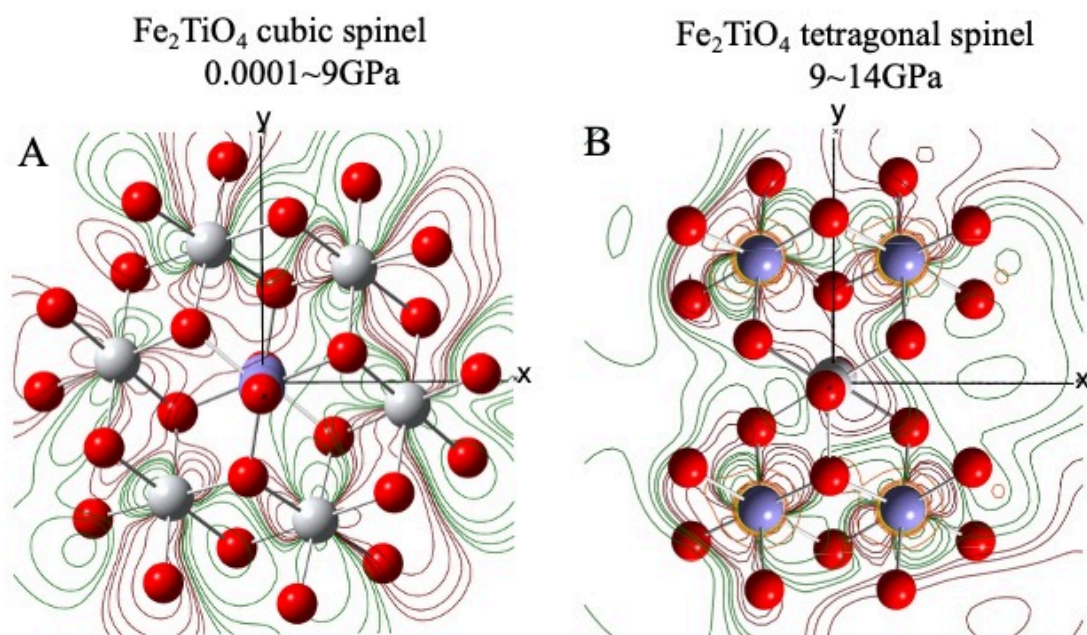
Electron density contour indicating $d-p-\pi$ bond

Fig. 6