

Oral presentation | R2: Crystal structure, crystal chemistry, physical properties of minerals, crystal growth and applied mineralogy

📅 Thu. Sep 24, 2026 4:15 PM - 6:00 PM JST | Thu. Sep 24, 2026 7:15 AM - 9:00 AM UTC | 🏠 Room B (285)

R2: Crystal structure, crystal chemistry, physical properties of minerals, crystal growth and applied mineralogy

Chairperson: Kazuki Komatsu, Sayako Inoue

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。

◆ Invited Lecture

4:15 PM - 4:45 PM JST | 7:15 AM - 7:45 AM UTC

[R2-01] Crystal Structure Analysis of Inorganic Materials Using 3DED/MicroED

*Yoshitaka Aoyama¹ (1. JEOL Ltd.)

4:45 PM - 5:00 PM JST | 7:45 AM - 8:00 AM UTC

[R2-02] EBSD simulation integrating backscattered-electron transport and Bloch-wave dynamical diffraction

*Yusuke SETO¹, Yukitaka Ohyama¹ (1. Osaka Metropolitan University)

5:00 PM - 5:15 PM JST | 8:00 AM - 8:15 AM UTC

[R2-03] Unique Crystal Structures Discovered for Novel High-Pressure Mineral Phases

*Taku TSUCHIYA¹, Jiajun Jiang¹, Moe Kajiwar¹ (1. Ehime Univ. GRC)

5:15 PM - 5:30 PM JST | 8:15 AM - 8:30 AM UTC

[R2-04] Solid solubility of Al³⁺ and Sc³⁺ into SrTiO₃ with the cubic perovskite structure

*Takaya NAGAI¹, Jun KAWANO¹, Ayako SHINOZAKI¹, Daigo KAWAMOTO², Aoi TSUNODA², Saya ISHIKAWA³ (1. Hokkaido Univ. Faculty Sci., 2. Hokkaido Univ. Grad. Sci., 3. Hokkaido Univ. School Sci.)

5:30 PM - 5:45 PM JST | 8:30 AM - 8:45 AM UTC

[R2-05] Crystal structure of hydroxide spinel in a mélange chromitite with microdiamonds at Saikai, Nagasaki, Japan.

*Akira YOSHIASA¹, Satoko Ishimaru¹, Makoto Tokuda¹, Tadao Nishiyama¹, Shoji Arai², Kazumasa Sugiyama³ (1. Kumamoto University. Sci, 2. Kanazawa University. Sci, 3. Tohoku University. Material)

5:45 PM - 6:00 PM JST | 8:45 AM - 9:00 AM UTC

[R2-06] Bulk modulus and electron density distribution of high-pressure polymorphs of Fe_xTi_yO_z minerals

*Takamitsu YAMANAKA¹ (1. Osaka Univ.Sci.)

Oral presentation R2: Crystal structure, crystal chemistry, physical properties of minerals, crystal growth and applied mineralogy
--

Thu. Sep 24, 2026 4:15 PM - 6:00 PM JST Thu. Sep 24, 2026 7:15 AM - 9:00 AM UTC Room B (285)
--

R2: Crystal structure, crystal chemistry, physical properties of minerals, crystal growth and applied mineralogy

Chairperson: Kazuki Komatsu, Sayako Inoue

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。

◆ Invited Lecture

4:15 PM - 4:45 PM JST 7:15 AM - 7:45 AM UTC

[R2-01] Crystal Structure Analysis of Inorganic Materials Using 3DED/MicroED

*Yoshitaka Aoyama¹ (1. JEOL Ltd.)

Keywords : MicroED、3DED

透過電子顕微鏡（Transmission Electron Microscope: TEM）を用いた電子回折法（Electron Diffraction: ED）は、長年にわたり材料の結晶学的情報を取得する手法として広く利用されてきた。しかし、その主な用途は、指数付けによる結晶方位の決定や、結晶構造データベースに登録されたCrystallographic Information File（CIF）と測定した電子回折図形とのパターンマッチングに基づく構造同定に限定されることが多く、未知結晶の構造決定能力においては単結晶X線回折法（Single-crystal X-ray Diffraction: SXRD）に及ばなかった。近年、三次元電子線回折法（Three-Dimensional Electron Diffraction: 3DED）あるいはマイクロ電子回折法（Micro-Electron Diffraction: MicroED）と総称される新たな結晶構造解析手法が開発され[1]、材料科学、化学および構造生物学をはじめとする幅広い分野において応用が進展している。MicroEDは、SXRDと同様の原理に基づき、結晶性試料に電子線を平行照射しながら試料ステージを連続的に傾斜させ、取得した電子回折パターンの傾斜シリーズを解析することにより、三次元結晶構造を決定する手法である。電子線はX線と比較して物質との相互作用が約 10^5 倍強いことから、SXRDで通常用いられる結晶よりもはるかに小さいサブミクロンサイズの微結晶から、構造解析に十分な電子回折データを取得することができる。このため、結晶成長が困難な試料に対しても適用可能であることがMicroEDの大きな特長である。さらに、高感度検出器の開発・普及により、総電子線照射量 $1\text{ e}^-/\text{\AA}^2$ 未満という極めて低線量の条件下においても、高品質な電子回折データの取得が可能となった。その結果、従来は電子線損傷の影響により測定および解析が困難であったタンパク質や低分子化合物についても、MicroEDを用いた結晶構造解析が広く実施されるようになってきている[2]。加えて、データ処理ソフトウェアの著しい進展により、絶対構造（キラリティー）の決定、結晶の自動検出および検出された多数の結晶を対象とした自動連続測定も実現されている。本発表では、MicroED法の現状について概説するとともに、無機材料を対象としたMicroEDによる結晶構造解析の最新の応用事例について紹介する。[1] D. Shi et al., *eLife*, **2**, (2013). [2] C. G. Afonso et al., *Nature Communications*, **10** (2019)

Oral presentation R2: Crystal structure, crystal chemistry, physical properties of minerals, crystal growth and applied mineralogy
--

Thu. Sep 24, 2026 4:15 PM - 6:00 PM JST Thu. Sep 24, 2026 7:15 AM - 9:00 AM UTC Room B (285)
--

R2: Crystal structure, crystal chemistry, physical properties of minerals, crystal growth and applied mineralogy

Chairperson: Kazuki Komatsu, Sayako Inoue

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。

4:45 PM - 5:00 PM JST 7:45 AM - 8:00 AM UTC

[R2-02] EBSD simulation integrating backscattered-electron transport and Bloch-wave dynamical diffraction
--

*Yusuke SETO¹, Yukitaka Ohyama¹ (1. Osaka Metropolitan University)

Keywords : Electron backscatter diffraction、Dynamical theory、Backscatter electron

The phases, crystallographic orientations, and microstructures of rock-forming minerals provide fundamental information in mineralogy and petrology, including discrimination of polymorphs, reconstruction of deformation histories, and interpretation of seismic anisotropy through lattice-preferred orientation. SEM-EBSD is the most powerful technique for obtaining such information at the grain scale; however, its reliability essentially depends on the accuracy of reference pattern simulations. Indexing of geological samples is often difficult: the success rate is at most ~70% for serpentine [1] and only 10–20% for talc [2]. Most conventional software relies on the kinematical approximation and cannot reproduce the intensity contrast, position shift, or curvature of Kikuchi bands caused by dynamical (multiple) scattering. Moreover, the actual intensity of EBSD patterns is also governed by the energy, depth, and angular distributions of backscattered electrons (BSEs). A physically correct prediction of the patterns therefore requires a unified framework that combines electron transport and dynamical diffraction.

In this study, we decompose the problem into three processes: (i) BSE transport, (ii) dynamical diffraction within the crystal, and (iii) projection onto the detector plane. Monte Carlo simulations tracking millions of electron trajectories, employing Mott elastic cross-sections (NIST database) and a dielectric-response inelastic model, yield the joint distribution of the exit direction, energy, and depth of BSEs, from which the energy and depth ranges required for the dynamical calculation are determined automatically. Using the reciprocity theorem, the exit problem is converted into an equivalent incidence problem, and energy- and depth-resolved master patterns are computed by the Bloch wave method with our fast algorithm [3] and stored on a Rosca–Lambert equal-area grid; nonlocal absorption and thermal diffuse scattering background can be optionally included. Kikuchi patterns are finally synthesized by interpolating the master patterns along the direction subtended by each detector pixel and weighting them with the BSE distributions.

The whole procedure is implemented in the open-source crystallographic software ReciPro [3], directly linked to crystal-structure databases such as AMCSD and COD. It enables quantitative evaluation of how chemical composition, absorption, accelerating voltage, and sample tilt affect the visibility and contrast of Kikuchi bands, supporting reliable phase identification of complex minerals and optimization of measurement conditions prior to experiments. In particular, even for minerals whose Kikuchi bands are intrinsically low in sharpness (band slope) owing to their chemical composition, the present framework correctly reproduces such diffuse patterns as they are, since the energy and depth distributions of BSEs are explicitly taken into account. As validation, we performed pixel-by-pixel image comparisons with experimental EBSD patterns of major rock-forming minerals and confirmed good agreement. Kikuchi lines, band indices, and zone-axis indices can be

overlaid on the dynamical patterns, and the crystal orientation is synchronized with the structure viewer and stereonet, making the simulator a useful educational tool for understanding the correspondence among real space, reciprocal space, and orientation space. We will present the computational procedure and validation results, and discuss prospects for applications to minerals that are difficult to index.

[1] Nagaya, Wallis, Seto, et al. *Journal of Structural Geology* 95, 127–141, 2017. [2] Nagaya, Okamoto, Oyanagi, Seto, et al. *American Mineralogist* 105, 873–893, 2020. [3] Seto & Ohtsuka. *Journal of Applied Crystallography* 55, 397–410, 2022.

Oral presentation | R2: Crystal structure, crystal chemistry, physical properties of minerals, crystal growth and applied mineralogy

Thu. Sep 24, 2026 4:15 PM - 6:00 PM JST | Thu. Sep 24, 2026 7:15 AM - 9:00 AM UTC | Room B (285)

R2: Crystal structure, crystal chemistry, physical properties of minerals, crystal growth and applied mineralogy

Chairperson: Kazuki Komatsu, Sayako Inoue

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。

5:00 PM - 5:15 PM JST | 8:00 AM - 8:15 AM UTC

[R2-03] Unique Crystal Structures Discovered for Novel High-Pressure Mineral Phases

*Taku TSUCHIYA¹, Jiajun Jiang¹, Moe Kajiwara¹ (1. Ehime Univ. GRC)

Keywords : High-pressure phase、Crystal structure、Ab initio calculation

近年、従来知られていなかった興味深い結晶構造をもつ新たな鉱物高压相が、相次いで発見されている。高压相構造は通常、常圧下で安定な異なる化学組成物質の結晶構造と同一である場合が多いが、これらの幾つかは常圧安定物質には例を見ない全く新しい結晶構造である。このことは、高压下では従来想定されていた以上に多様な結晶構造が実現し得ることを示している。本研究では、こうした新規高压鉱物構造のうち、最近、著者らのグループで研究を進めてきた例を紹介する。

① SiO_2 の Li_2ZrF_6 型相 (Tsuchiya and Nakagawa, 2022) : α -石英を非静水圧条件下で圧縮することにより出現する相であり、常圧下の Li_2ZrF_6 と同一の結晶構造をとる。この構造は α -石英と同じく三方晶系に属し、高压含水ケイ酸塩の一つ phase D と共通する結晶構造である。隕石衝突痕に見られるラメラ構造の衝撃下での状態との報告がなされており (Otzaen et al., 2023)、石英の圧力誘起非晶質化と関連する可能性もある。さらなる加圧により、二酸化ケイ素の極超高压相として知られる Fe_2P 型構造へ転移するが、エネルギー的にはコーサイトやスティショバイトに対して準安定である。

② CaSiC_2O_7 (Aprilis et al., under rev; Tsuchiya and Isobe, 2026) : 約 120 GPa で実験的に合成された高压ケイ酸塩炭酸塩という新たなカテゴリーに属する高压鉱物。第一原理計算により、ケイ酸塩と炭酸塩または二酸化ケイ素との反応によって、より低圧でも安定化し得ることが示された。本相は、2つの4配位 CO_4 多面体が頂点共有した構造ユニットから成る、これまで知られていなかった新奇な結晶構造をもつ。地球深部における炭素の主要なホスト相となる可能性が高い。

③ $\alpha\text{-MgSiO}_4\text{H}_2$ (Shao et al., 2024; Jiang and Tsuchiya, under rev) : Phase H として実験的に合成されていた高压含水マグネシウムケイ酸塩の安定結晶構造である。この構造も従来知られていなかったものであり、従来想定されていた Phase H の構造モデルとは異なり、水素結合の対称化を生じない。このため、弾性異方性が大きく低下することが明らかとなった。

④ CaSiO_4H_2 (Takaichi et al., submitted) : 常圧下で安定なスオルナイトの高压相転移が約 10 GPa の圧力で実験的に発見され、第一原理計算によってもポスト・スオルナイト相の安定圧力領域が確認された。このポスト・スオルナイトは、高压型の6配位 SiO_6 多面体と低压型の4配位 SiO_4 多面体の両方を含む、新奇な結晶構造を有する。高密度含水マグネシウムケイ酸塩 (DHMS) についてはこれまで多数の研究例があるが、高密度含水カルシウムケイ酸塩 (DHCS) としては本相が初めての例となる。

Oral presentation | R2: Crystal structure, crystal chemistry, physical properties of minerals, crystal growth and applied mineralogy

Thu. Sep 24, 2026 4:15 PM - 6:00 PM JST | Thu. Sep 24, 2026 7:15 AM - 9:00 AM UTC | Room B (285)

R2: Crystal structure, crystal chemistry, physical properties of minerals, crystal growth and applied mineralogy

Chairperson: Kazuki Komatsu, Sayako Inoue

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。

5:15 PM - 5:30 PM JST | 8:15 AM - 8:30 AM UTC

[R2-04] Solid solubility of Al^{3+} and Sc^{3+} into SrTiO_3 with the cubic perovskite structure

*Takaya NAGAI¹, Jun KAWANO¹, Ayako SHINOZAKI¹, Daigo KAWAMOTO², Aoi TSUNODA², Saya ISHIKAWA³ (1. Hokkaido Univ. Faculty Sci., 2. Hokkaido Univ. Grad. Sci., 3. Hokkaido Univ. School Sci.)
 Keywords : SrTiO_3 , trivalent cation, solid solubility

はじめに：ペロブスカイト型酸化物 $\text{A}^{2+}\text{B}^{4+}\text{O}_3$ は、多様な陽イオンの固溶に寛容であることが知られている。私たちはこれまで、ペロブスカイト型チタン酸塩 $\text{A}^{2+}\text{Ti}^{4+}\text{O}_3$ において Ti^{4+} を3価の陽イオンで置換し、電荷補償として酸素欠陥を導入する $\text{A}^{2+}\text{Ti}^{4+}\text{O}_3 - \text{A}^{2+}\text{M}^{3+}\text{O}_{2.5}$ 系の固溶挙動を研究してきた。例えば、 CaTiO_3 ペロブスカイトでは $\text{Ti}^{4+} \rightarrow \text{Al}^{3+}$ の置換により大気圧下では約26 mol%まで固溶し、固溶量の増加に伴い格子体積が減少する。またペロブスカイト構造の対称性が固溶量に応じて、約22 mol%までは直方晶系、約25 mol%以上では立方晶系、その間の固溶量（23 mol%）では正方晶系といったモルフォロジカルな変化をしていくことがわかってきた。

本研究では、立方晶系のペロブスカイト構造を持つ SrTiO_3 への Al^{3+} と Sc^{3+} の固溶について、その固溶限界と構造変化を対象とした研究を行ったので報告する。 SrTiO_3 はトレランス因子がほぼ1であり、 Al^{3+} (0.535 Å) < Ti^{4+} (0.605 Å) < Sc^{3+} (0.745 Å) のイオン半径を考慮すると、 Ti^{4+} より小さい(Al^{3+}) / 大きい(Sc^{3+}) イオンの置換が、格子定数や構造に対して対照的な効果を与えることが期待される。また、 SrTiO_3 は下部マントルの主要構成鉱物の一つであるデイブマオアイト CaSiO_3 のアナログとして地球科学的にも興味深い。デイブマオアイト CaSiO_3 への $\text{Si}^{4+} \rightarrow \text{Al}^{3+}$ 置換については過去にいくつかの報告例があり、例えば、Kurashina et al. (2004) では置換メカニズムは不明であるが、 Al^{3+} のわずかな固溶により GdFeO_3 型の直方晶系相の安定領域が広がることが報告されている。また、Kanzaki et al. (2017) では、 $\text{Ca}(\text{Al}_{0.5}\text{Si}_{0.5})\text{O}_{2.75}$ と $\text{Ca}(\text{Al}_{0.4}\text{Si}_{0.6})\text{O}_{2.8}$ という酸素欠損型の秩序相が報告されている。イオン半径の観点からは、 Si^{4+} (0.4 Å) < Al^{3+} (0.535 Å) であることから、 SrTiO_3 における $\text{Ti}^{4+} \rightarrow \text{Sc}^{3+}$ の置換に対する固溶挙動がアナログとして興味がある。

実験手法： $\text{SrTiO}_3 - \text{SrAlO}_{2.5}$ 系（バルクの $\text{SrAlO}_{2.5}$ 成分が10、20 mol%）および $\text{SrTiO}_3 - \text{SrScO}_{2.5}$ 系（バルクの $\text{SrScO}_{2.5}$ 成分が20、30、40、50、60 mol%）について、炭酸塩・酸化物試薬から固相反応により合成を試みた。手順としては、試薬試料を秤量・混合後、ペレットに成形し、空气中1300 °Cで48時間焼成した。焼成後急冷し回収した試料をXRD分析したところ、焼成回数が少ない時には2相のペロブスカイト構造相が確認され、そのうち1相は純粋な SrTiO_3 であったことから、焼成→混合→ペレット成形→焼成のプロセスを純粋な SrTiO_3 の回折ピークが消失するまで4~6回繰り返した。

結果： $\text{SrTiO}_3 - \text{SrAlO}_{2.5}$ 系：出発のバルクの $\text{SrAlO}_{2.5}$ 成分が10 mol%では立方晶系のペロブスカイト構造相1相となったが、20 mol%では立方晶系ペロブスカイト構造相の他に少なくとも $\text{Sr}_3\text{Al}_2\text{O}_6$ と同定可能な回折ピークが存在した。また、格子体積は $\text{SrAlO}_{2.5}$ 成分の増加に伴ってわずかに減少したが、 $\text{SrAlO}_{2.5}$ 成分0→10 mol%間の減少量に比べ、10→20 mol%間の減少量が小さいことから、 $\text{SrAlO}_{2.5}$ 成分の固溶限界が10~20 mol%の間にあることが示唆される。な

お、これらの結果はShah et al.(2022)による先行研究と部分的に整合的ではなく、検討が必要である。

SrTiO₃–SrScO_{2.5}系：出発のバルクのSrScO_{2.5}成分が20～50 mol%では立方晶系のペロブスカイト構造相1相となったが、60 mol%では立方晶系ペロブスカイト構造相の他に弱い未同定の回折ピークが存在した。また、格子体積はSrScO_{2.5}成分0→50 mol%間にはほぼ直線的に増加したのに対し、SrAlO_{2.5}成分60 mol%の格子体積はその外挿よりもわずかに小さいことから、SrScO_{2.5}成分の固溶限界は50～60 mol%の間にあることが示唆される。

本研究で対象としたいずれの系についても固溶限界まで立方晶系ペロブスカイト構造が維持されており、デイブマオアイトCaSiO₃–CaAlO_{2.5}系で報告されているような低対称化や中間組成での秩序相は観察されなかった。また、格子定数の変化は、Al³⁺<Ti⁴⁺<Sc³⁺のイオン半径の大小関係と整合的であり、立方晶系ペロブスカイト型SrTiO₃の高い構造安定性が示唆される。

Oral presentation | R2: Crystal structure, crystal chemistry, physical properties of minerals, crystal growth and applied mineralogy

Thu. Sep 24, 2026 4:15 PM - 6:00 PM JST | Thu. Sep 24, 2026 7:15 AM - 9:00 AM UTC | Room B (285)

R2: Crystal structure, crystal chemistry, physical properties of minerals, crystal growth and applied mineralogy

Chairperson: Kazuki Komatsu, Sayako Inoue

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。

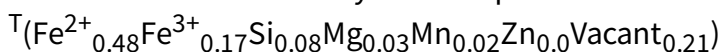
5:30 PM - 5:45 PM JST | 8:30 AM - 8:45 AM UTC

[R2-05] Crystal structure of hydroxide spinel in a mélange chromitite with microdiamonds at Saikai, Nagasaki, Japan.

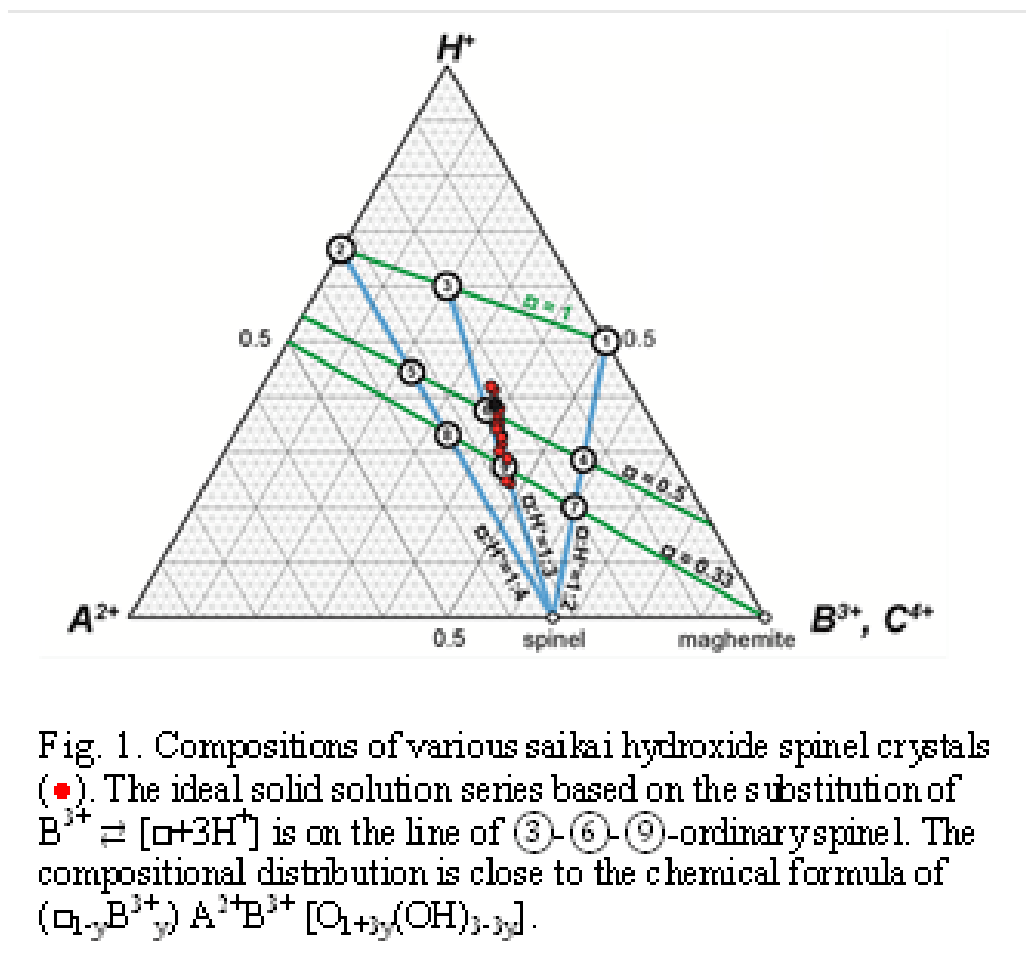
*Akira YOSHIIASA¹, Satoko Ishimaru¹, Makoto Tokuda¹, Tadao Nishiyama¹, Shoji Arai², Kazumasa Sugiyama³ (1. Kumamoto University. Sci, 2. Kanazawa University. Sci, 3. Tohoku University. Material)

Keywords : hydroxide spinel with microdiamonds、multi-defects structure、single crystal diffraction、water in the mantle

We have found euhedral single crystals of hydroxide spinel (3-8 wt% H₂O) in a diamond-bearing serpentinite mélange exhumed from depths greater than 90 km. The cation distribution of a certain hydroxide spinel is



$M(Cr_{0.92}Fe^{2+}_{0.34}Fe^{3+}_{0.31}Ni_{0.03}Ti_{0.02}Ca_{0.01}Al_{0.01}Vacant_{0.36})[O_{2.47}(OH)_{1.53}]$. A significant H is incorporated into the spinel structure along with the formation of cation vacancies. The substitution by tetravalent Si or Ti stabilizes the hydroxide spinel structure. The formation of this high configuration-entropy multi-defects hydroxide spinel indicates an abundant supply of hydrogen, therefore must have occurred under water-saturated conditions. The occurrence of the hydroxide spinel provides compelling evidence that the cold subduction plates transport water deep into the mantle, hydrating the transition zone reservoir.



Oral presentation R2: Crystal structure, crystal chemistry, physical properties of minerals, crystal growth and applied mineralogy
--

Thu. Sep 24, 2026 4:15 PM - 6:00 PM JST Thu. Sep 24, 2026 7:15 AM - 9:00 AM UTC Room B (285)
--

R2: Crystal structure, crystal chemistry, physical properties of minerals, crystal growth and applied mineralogy

Chairperson: Kazuki Komatsu, Sayako Inoue

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。

5:45 PM - 6:00 PM JST 8:45 AM - 9:00 AM UTC

[R2-06] Bulk modulus and electron density distribution of high-pressure polymorphs of $\text{Fe}_x\text{Ti}_y\text{O}_z$ minerals

*Takamitsu YAMANAKA¹ (1. Osaka Univ.Sci.)

Keywords : brookite、 ilmenite、 bulk modulus、 molecular orbital calculation、 electron density distribution

The iron-bearing $\text{Fe}_x\text{Ti}_y\text{O}_z$ minerals are important terrestrial materials for plate tectonics studies and paleo-magnetism in geophysics. The bulk modulus of the $\text{Fe}_x\text{Ti}_y\text{O}_z$ minerals, such as Fe_3O_4 (magnetite), Fe_2TiO_4 (ulvöspinel), FeTiO_3 (ilmenite), Fe_2TiO_5 (pseudobrookite) are related to the compressions of cation sites and vacant site. Cation site partly occupied by Ti atom shows a smaller K_0 than that of only Fe atom. The compressibility increases with increasing Ti content in $\text{Fe}_x\text{Ti}_y\text{O}_z$. The vacant sites in the unit cell are much larger volumes than cation sites in these four structures. The bulk moduli of these samples are very similar to those of their vacant sites. The compressibility of the cation site is much larger than those of the vacant sites. The cation distribution in the solid solutions have been carried out by neutron diffraction and X-ray diffraction studies. The Fe/Ti distribution has been examined as a function of pressure. The cation sites and vacant sites show different compressibility with increasing pressure. The cation sites of these minerals at high-pressure conditions were investigated to understand their strong electronic correlations. The crystal internal potential change under high pressure is in an equilibrium state of the external pressure by virial theorem. The structure changes such as high-low electron spin transition, Jahn-Teller effect and d - p - p hybridization in the Fe-O bonds are elucidated by present high-pressure experiments. The d - p - p hybridization in the octahedral cation site was discussed by molecular orbital calculation and it brings the deformation of the octahedral cation site. The deformation triggers the structure changes in the high-pressure polymorphs.

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

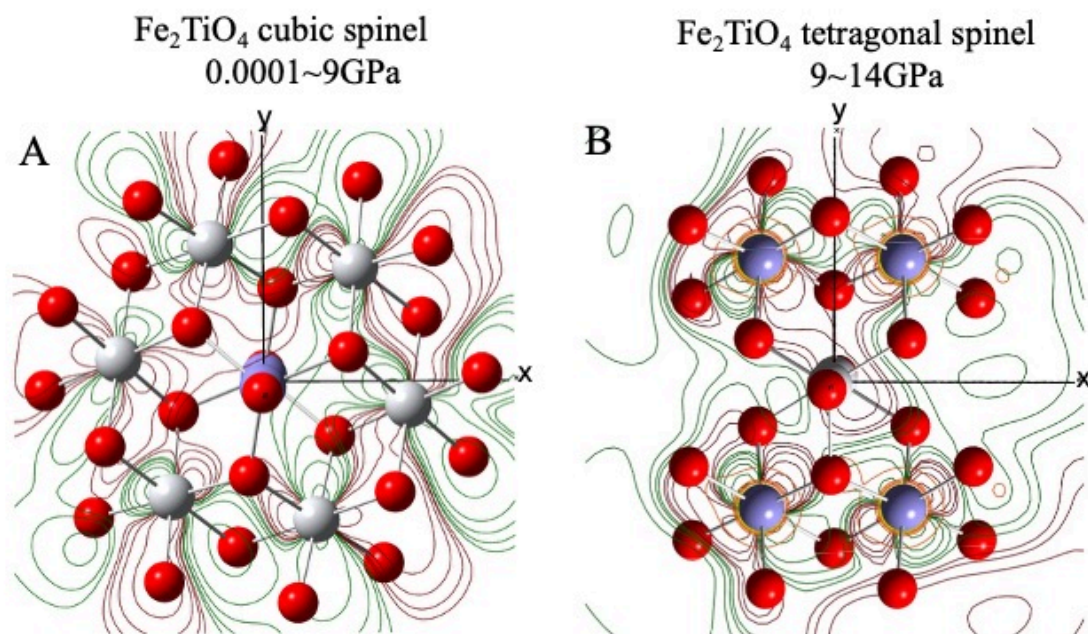


Fig. 6