SCES 2025 Poster Award を受賞して

物質設計評価施設　　岡本研究室　特任研究員　小島 慶太

この度、カナダ・モントリオールで開催された International Conference on Strongly Correlated Electron Systems 2025 (SCES2025)において、Poster Award を受賞いたしました。SCES はその名の通り、強相関電子系を中心とした固体物理学に関する国際会議です。1992 年に仙台で開催されたのを機に、様々な国で開催されており、欧米・アジアの研究者が一堂に会して最新成果を議論する場として定着しています。私は 2019 年(岡山)、2022 年(オランダ)の会議にも参加しており、研究成果のクオリティや参加者層のレベルが極めて高いことを実感しておりました。そのような場において今回受賞できたことを、大変光栄に思います。なお、ポスター賞は 4 日間の会期中、各日わずか 1 名のみが選出されるものであり、研究の独自性と完成度をご評価いただけたことを大きな励みと感じております。

今回の発表「Structural phase transition and flat band in cubic NbSeI」では、立方晶 NbSeI における理論予測と実験観測の矛盾に焦点を当てました。NbSeI は Nb 四面体を基盤とする 3 次元的な結晶構造をもち、四面体由来の分子軌道形成によって Nb の 4d 軌道が特徴的な電子状態を示します。第一原理計算によると、フェルミ準位近傍には「フラットバンド(電子がほとんど運動しない特殊な状態)」が出現し、完全強磁性や高温超伝導といったエキゾチックな物性が理論的に期待されました。しかし、実際に試料を合成し物性を測定すると、全温度域で非磁性絶縁体という予想外の結果が得られ、理論と実験の間に明確な矛盾が生じました。

この矛盾を解き明かすため、大型放射光施設 SPring-8 の BL02B1 ビームラインにおいて高精度の構造解析を行いました。実験では低温側(106 K 以下)で Nb 四面体が長距離秩序を伴って変形すること、さらに高温側でも局所的な変形が持続していることが確認されました。こうした構造歪みは Nb の分子軌道を変化させ、金属的なフラットバンド状態を回避し、絶縁体へと移行させる役割を担っていると考えられます。言い換えれば、NbSeI は「理想的なフラットバンド金属が不安定性をいかに克服するか」を具体的に示した例であり、今後の物質設計に重要な手がかりを与えるものです。今後は NbSeI で得られた知見を糸口として、フラットバンド金属の安定化や新奇物性の探索をさらに進め、強相関電子系の研究を次の段階へと発展させたいと考えております。

本研究は特任研究員として着任後に開始したものであり、所属研究室の岡本 佳比古 教授・大熊 隆太郎 助教をはじめとする皆様、ならびに東京大学物性研究所の山浦 淳一 准教授、新領域創成科学研究科の有馬 孝尚 教授・徳永 祐介 准教授・鬼頭 俊介 助教、名古屋大学の山川 洋一 講師らとの共同研究によって支えられました。この場を借りて深く感謝申し上げます。