

変分モンテカルロ法による 鉄系超伝導体の対称性の解析

理研 渡部洋¹, 白川知功, 柚木清司

鉄系超伝導体は 2008 年の発見以来多くの注目を集め、盛んに研究が行われている。この系では電荷・スピンの自由度に加えて軌道の自由度が重要な役割を果たすことが初期の段階から示唆されている。ただし、超伝導の対称性を始め、その発現機構の詳細については不明な点も多い。これらを明らかにすることはより高い転移温度を持つ物質の探索に対してはもちろん、多軌道強相関電子系の物理の発展に対しても非常に重要である。

詳細な解析には伝導に寄与する鉄の 3d 軌道全てを考慮する必要があるが、計算コストも膨大なものになってしまう。そこで重要と考えられる軌道のみを考慮した 2~4 軌道ハバード模型に対する計算も精力的に行われている。本研究では、2 軌道あるいは 3 軌道ハバード模型の範囲で超伝導の対称性を議論し、その妥当性を検証する。計算には変分モンテカルロ法を用い、多軌道系に拡張した Gutzwiller 因子と長距離電荷 Jastrow 因子をかけた一体波動関数を試行関数として用いる。

¹E-mail: h-watanabe@riken.jp