
講義ノート

私の電子相関事始 —二つの論文

関西大学・工学部 長岡 洋介

(1998年1月14日受理)

昨年(1997年)3月、私は京都大学を停年退官した。その際開いていただいた退官記念講演会で私の講演をまとめたものが本稿である。「講演をまとめた」といっても、テープをおこしたわけではない。10カ月余りたってから、記憶(記録ではない)によって書いたものだから、若干の違いはあると思う。編集部のご好意で本誌に載せていただくことになった。個人的な思い出や若干の自己宣伝も入ったものを公にするのにはためらいもあったが、私の自分史の一部というつもりもあって、あえてご好意にあまえることにした。読者のお許しをお願いしたいと思う。

1. なにを話すか

はじめに、このような機会をつくって下さった発起人のみなさん、ご多用の中今日ここにお集まり下さったみなさんに心からお礼申し上げます。

健康でさえあればそのうちに停年を迎えることになるのは、もちろん前から分かっていることでした。そのとき、このような機会を与えていただいたとしたら、何を話したらいいだろうか、ということは数年前から考えていました。私もこれまで先輩の方々の退官記念講演をたくさん聞いております。その中で、私にとってとくに印象深く、また記憶に残っておりますのは、1967年に名古屋大学を退官された有山兼孝先生のお話です。先生は1930年代、ナチ体制下のドイツでハイゼンベルクの下で研究され、帰国後理研の仁科研究室に入り、それから名古屋大学理学部の創設に加わられたのでした。先生はその頃の思い出を話されたのですが、お人柄のにじみでたいいお話でした。私のまったく知らない戦前、戦中のことがたいへん興味深くもあったのです。

考えてみますと、30年代というのは私が有山先生のお話をお聞きした時から見てほんの30年ほど前のことにすぎません。その頃のことは私ははるか昔の歴史上の出来事のようにして聞いていたのです。私が研究を始めた1960年代といいますのも、今から30年余り前のことです。私にとりましては、決して昔ではないのですが、若い人たちにとってははるかな昔なのだと思います。そうであれば、その1960年代の話も少なくとも若い人たちには興味をもっていただけるのではないだろうか—そう考えまして、退官記念講演としては定番ではありますが、思い出話を聞いていただくことにしたのです。有山先生のような感銘深いお話にはならないと思いますが、しばらくおつきあい下さい。

そういうわけで、講演の表題は「私の電子相関事始」となりました。副題の「二つの論文」が何を指すかは、物性理論の分野の方であればご想像いただけるかと思いますが、それは私が60年代に書いた次の論文のことです。

A. "Self-Consistent Theory of Kondo's Effect" Phys. Rev. **138** (1965), A1112.

B. "Ferromagnetism in a Narrow, Almost Half-Filled s Band" Phys. Rev. **147** (1966), 392.

この二つの論文は、発表後たいへん対蹠的な「運命」を辿りました。最近大学で自己評価といったことが喧しくいわれまして、論文の被引用数を調べるのが流行っています。私も自分の論文がどうなっているか知りたくなくて、数年前にこの二つの論文の被引用数の年変化を調べたことがあります。(その頃基研にいらした池上充宏さんに調べていただいたのですが。)それをグラフにしたのが図1です。一目で「対蹠的」といったことの意味がおわかりと思います。

Aは近藤さんの論文¹⁾が出たあとの比較的早い時期に発表したこともあって、発表当時には一応有名になり、かなり引用もされました。しかし、間もなくこの論文で出した私の理論が誤りであることがわかり、被引用数も指数関数的に減少しました。Aのような曲線がふつうの論文が辿る運命だと思います。

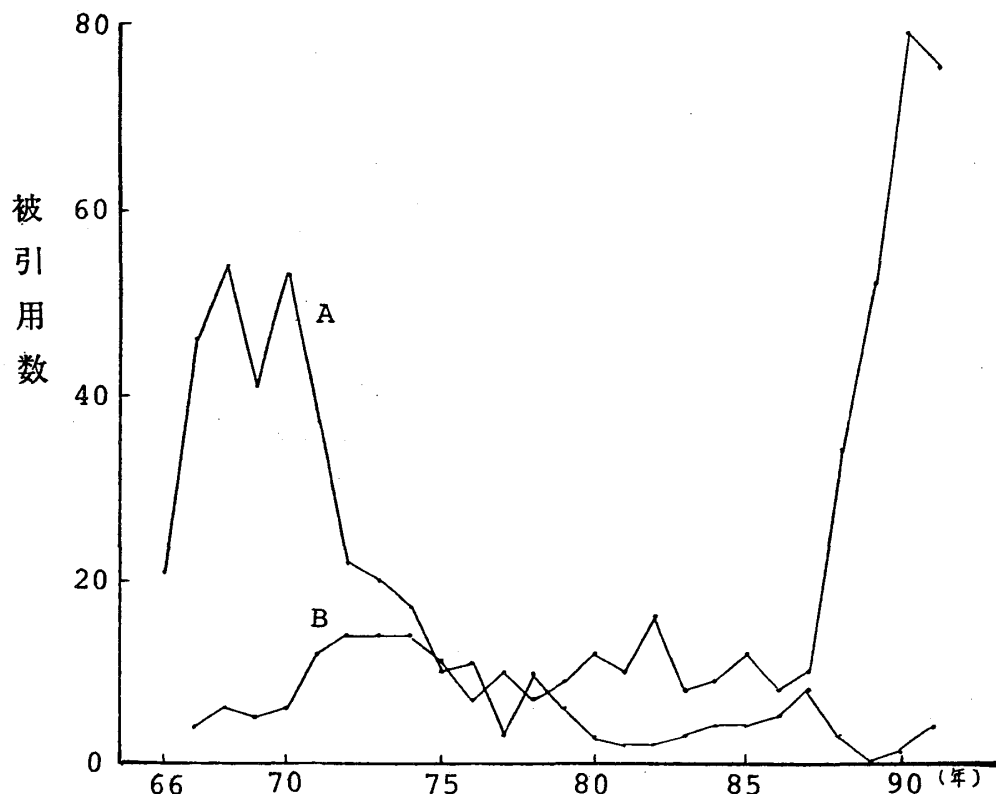


図1 論文 A, B の被引用数の年変化

B はバンド電子の強相関の極限で、きわめて特殊な場合についてですが、強磁性が生じることが厳密に証明したものです。特殊で地味な問題でしたから、注目してくれた人が少しはいましたが、被引用数もマアマアといったところですよ。それが1988年から急増したのです。これは高温超伝導が発見され(1986年)、強い電子相関の問題が注目されたからです。私の証明がきわめて特殊な場合に限られていたため、それがもう少し一般的な場合にも成り立つか、という恰好な問題を計算物理に提供することになったためでもあったと思います。

この二つの論文は私の論文を被引用数でランキングしたとしますと、たぶんベスト3には入ると思います。私が研究を始めてから、この二つの論文を書くに至るまでの60年代のことを、これからお話ししたいと思います。

2. ICM'61 と磁性不純物

私が大学(東京大学理学部物理)を卒業したのは1956年です。同じ年大学院に入学し、久保研究室に加えていただきました。超伝導のBCS理論が出たのは1957年、私が修士課程2年のときでした。これに大きな衝撃を受けていた先輩たちの様子が記憶に残っております。1960年の安保闘争の国会デモは学位論文のことを気にしながらの参加でした。学位論文のテーマは金属の超音波吸収、超音波を外力として線形応答の久保理論を適用し、吸収を求めたものです。

私は1961年に大学院を修了し、幸いにもすぐ基礎物理学研究所の助手になることができました。1957年10月にソ連による人工衛星(スプートニク1号)の打上げ成功があり、その後これに刺激されて日本でも大学理工系の拡充が始まりました。私と同世代の人たちはその恩恵をかなり受けております。基研助手のポストはこれと直接は関係ありませんが、私の就職も間接的には理工系ブームの恩恵を受けたのだと思います。大学院に入ったときは、修了後の就職にはまったく見通しのない時代だったのですが。

ここで、ついでにその後の私の職歴をご紹介します。

基研助手 1961 — 66年(5年、うち2年は在外)

名古屋大学理学部助教授 1966 — 77年(11年)

基研教授 1977 — 84年(7年)

名大理教授 1984 — 90年(6年)

基研教授(所長) 1990 — 97年(7年)

このように基研と名大の間を2往復するという、まことに不思議な職歴です。とにかく任期を守りながら基研に3回就任し、通算17年(在外を除く)在職したわけで、これは今後も破られることのない記録です。自慢できる記録かどうかはわかりませんが。じつは名大在職も通算17年で、私の動きは2重井戸ポテンシャル中を運動する粒子のようなものでした。

私が基研の助手になった1961年の9月に京都で国際磁気学会(ICM)がありました。日本で開かれた国際会議としては有名な1953年の国際理論物理学会議がありますが、大型の会議はこれが

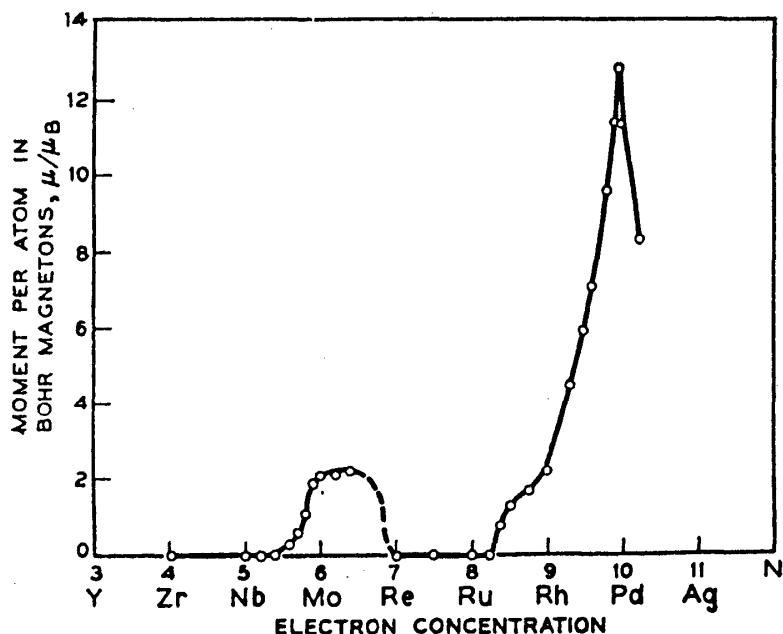


図2 Clogston らの実験結果

はじめてです。会期は9月25日から30日まで、会場は京都会館でした。結晶学会議が同時に開かれています、両方を合わせて参加者外国人225、日本人597、論文数299と記録されています。

この会議に出席して聞いた話の中で、私がとくに興味をもったのは、Clogston らの実験でした。²⁾ これは Zr から Pd までの 4d 族の金属と合金に Fe を不純物として少量加えた希薄合金について、Fe のもつ局在磁気モーメントを帯磁率の測定によって求めたものです。図2がその実験結果で、同じ Fe 不純物でも母体の金属・合金によって局在モーメントが出たり出なかったりするわけです。

じつは、この実験については、局在モーメントが生じる条件を論じた Anderson の理論³⁾ が発表されていました。有名な論文なので大部分の方はご存じと思いますが、簡単に説明しますと次のようなものです。不純物には局在した準位があり、局在準位に縮退はないとします。この準位に電子が2個入ると、電子間には斥力 U が働きます。一方、不純物の局在準位は金属のバンドの中にあるので、広がったバンドの準位との間で電子の移りかわりが可能で、その結果局在準位は有限な幅 Δ をもつことになります。局在準位、バンド準位間の混成の行列要素を V 、バンドの状態密度を ρ としますと、幅 Δ はおよそ

$$\Delta \simeq V^2 \rho \quad (1)$$

と表わされます。ごく大まかにいえば、不純物が局在モーメントをもつ条件は

$$U > \Delta \quad (2)$$

となります。斥力が大きければ、例えば上向きスピンの電子が局在準位を占めたとすると、下向きスピンの電子はそれに反発されて入ることができず、不純物は局在したスピンをもつことになる、というわけです。金属強磁性の出現と同じことが1個の不純物のところで起きているようなものです。金属強磁性では Δ をバンド幅 D 、もしくは状態密度の逆数 ρ^{-1} に置きかえることになります。

Andersonの理論は明解で、わかり易いものでした。しかし、同時に不満もありました。Andersonの理論では局在モーメントが出現するパラメーターの領域がはっきりした境界線で仕切られていました。これでは相転移が起きているようなものです。しかし、相転移はマクロな系で起きるもので、たった1個の不純物のところで起きるはずはありません。相転移のようになってしまったのは分子場近似をしたためのもので、ゆらぎを考慮すれば結論は違うはずですが、こういう初等的なことにAndersonが気づいていないとは思えないのですが、論文を読む限りそのことにはひと言も触れていませんでした。この問題はあとになって、Kondo効果として明確になるのですが、もちろん私がそこまでの見通しをもっていたわけではありません。

もう1つは不純物間の相互作用の問題です。Andersonは1個の不純物の問題を扱ったのですが、実際の試料は有限の濃度の不純物を含んでいます。当然不純物間には相互作用があるはずで、それはいろいろな効果をもつだろうと思われま

す。その頃久保研の大学院生だった金徳洲さんも会議に出ていました。彼とこのような議論をしていたのだったかも知れません。磁性不純物の問題を二人でやってみようということになり、翌年金さんはアトム型研究員として基研に滞在することになります。私たちがしたことは、Andersonの理論を不純物が多数ある場合に一般化することです。混成項の2次摂動により、局在スピンと伝導電子のスピンの間には反強磁性的な交換相互作用

$$J \sim -\frac{V^2}{U} \quad (3)$$

が生じますから、当然異なる不純物の局在スピン間には伝導電子のスピンの媒介するRKKY相互作用が出てくることになります。私たちの共同研究（といっても主体は金さんでしたが）は金さんの学位論文としてまとめられました。⁴⁾

3. 電子相関と金属強磁性

金さんとの共同研究にはじまって、私は不純物に局在した電子間の相関の問題に関心を強めていきました。しかし、その問題を考えはじめると、伝導電子の存在はむしろ邪魔です。不純物準位における斥力 U と不純物準位間の直接のつぎ移り t だけに単純化したモデルでまず考えるのが順序というものでしょう。さらに不純物の配列の不規則さもやめてしまうと、結局はいまでいう「ハバード模型」にいきつくことになります。磁性不純物の問題を経過して、金属強磁性の問題に戻ったわけです。

そのようなことを考えながら何もできないでいる間に、金森さんの仕事⁵⁾が出ました。この理論では、電子の密度が十分に小さい場合を想定します。そうすれば、3個の電子が近づく確率は小さいので、電子間の相関は2体について考えれば十分です。つまり、原子核における Brueckner の理論を使うわけで、斥力 U のもとでの2体問題を完全に解き、そうして得られる T 行列で U を置きかえるのです。ここではその T 行列を $\tilde{U}$ と書きますと、およそ

$$\tilde{U} = \frac{U}{1 + U\Gamma} \quad (4)$$

となります。 Γ は2体の相関を表すグリーン関数で、その大きさはおよそバンド幅 D の逆数です。 $\tilde{U}$ の特徴は、 U がいくら大きくても、 $\tilde{U} \sim \Gamma^{-1} \sim D$ という有限の大きさにとどまることです。そのため、 $\tilde{U}$ を使って得られる強磁性出現の条件

$$\tilde{U}\rho > 1 \quad (5)$$

はふつうのバンドでは成り立ちません。金森理論では、フェルミ面での状態密度が大きい、特別な形のバンドでは (5) の条件が成り立ち、強磁性が生じることが示されました。

金森理論は、低密度の場合に限られているのは残念ですが、金属強磁性の問題の核心に触れた重要なものだと思います。私は、この理論を私なりにもっとよく理解するために、グリーン関数による再定式化を試みました。グリーン関数は私の大学院時代からたいへん流行っていて、とくに Zubarev の書いた「2時間グリーン関数」のレビュー⁶⁾ はバイブルのようになっていました。この論文で Zubarev が示したことは、グリーン関数に対する運動方程式を求め、そこに現れる多体のグリーン関数を適当なところで切断するという近似法でした。この方法で金森理論を再現するには、2体の相関までをとり入れればよいのですから、次のようにすることになります。まず1体グリーン関数に対する運動方程式をたてると、そこには2体グリーン関数が現れる。つぎに2体グリーン関数に対する運動方程式をたてると、3体グリーン関数が現れる。そこで3体グリーン関数を2体と1体の積に切断する。

こうして金森理論がグリーン関数の形で再現されるのですが、結果には1点だけもとの金森理論との違いがありました。求めるグリーン関数 G はエネルギーの変数 E の関数なのですが、それに関係する T 行列も (4) 式の Γ を通して E の関数になるのです。このため、 $G(E)$ の極、すなわち $G(E)^{-1} = 0$ から得られる1電子状態のエネルギーとして、2つの解が現れることになります。1つの解はバンド状態の電子のエネルギー E_k が他電子との相互作用によって少しシフトしたものです。もう1つの解の意味はバンド幅が0の場合を考えることで理解できました。すなわち、バンド幅が0のとき、私の得た1体グリーン関数 $G(E)$ は次のようになります。

$$G(E) = \frac{1-n}{E-E_0} + \frac{n}{E-(E_0+U)} \quad (6)$$

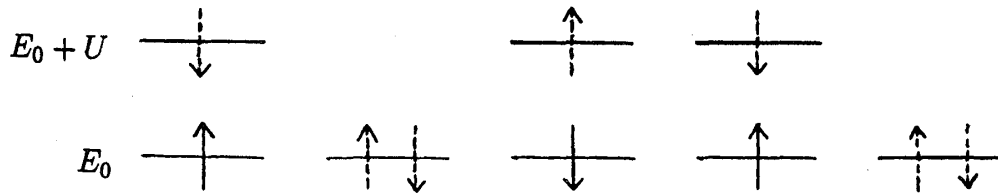


図3 バンド幅0のときの電子準位

ここで、 E_0 はもとの1電子準位のエネルギー、 n は電子密度です。 $G(E)$ の極はもう1個電子をつけ加えるときの電子のエネルギーを与えます。バンド幅が0のとき電子は動きませんから、図3のように各原子軌道に局在しています。ここにもう1個電子をつけ加えるとき、空いた原子軌道に入るのであればそのエネルギーは E_0 、すでに電子が1個入っている原子軌道に入るときは、エネルギーは $E_0 + U$ です。(6) 式の2つの極はそのことを表わしています。電子のとび移りがあれば、この2つの準位がそれぞれ広がります。しかし、電子が原子当たり1個の、バンドが半分詰まった状態 ($n = 1$) では、準位が広がっても、2つの準位が重ならない限り電子系は絶縁体となるはずで、私の得たグリーン関数はそのような意味をもつものでした。

私は金森理論を再現しようとして、少しだけそこからはみ出すことになりました。しかし、私にはこのはみ出した部分がどれだけ意味をもつのか自信がありませんでした。2体相関までの近似は低密度ではいいはずですが、それ以上のものではないでしょう。また、得られたグリーン関数じたい、調べてみるといろいろ矛盾が出てきて、しっくりしないのです。そうしていたとき、基研で何かの研究会があって、私が大学院生だった頃久保研の助手をしておられた小幡行雄さんが基研に来られたのです。小幡さんはしばらくイギリスに行っておられて、帰国されたばかりだったと思います。私がこの話を小幡さんにしますと、小幡さんは「そういう話はイギリスで Hubbard がしていたよ」とおっしゃるのです。

間もなく、小幡さんを通してであったか、Hubbard の論文のプレプリントを手に入れることができました。⁷⁾ たしかに、それは私のしたこととほとんど同じでした。切断のしかたが少し異なっていたのですが、それはどちらがよいともいえるものではありませんでした。レターでも書いておけばよかった、という悔しさが半分、自分に Hubbard のような大家と同じことができていた、という誇らしさが半分、という気持ちでした。(あるいは、7分3分といったところだったでしょうか。)

悔しさから、Hubbard の論文に対してアラ探しがしたくなります。すでにいいましたように、2体相関までの近似は低密度でこそ正当化されても、密度が高いときも成りたつとは考えられません。このように単純化されたモデルで議論するのであれば、根拠のある近似でなければ無意味ではないか。こんな風に思ったわけです。何かきちんとしたことをいうには、はじめから一般的な場合を考えても無理で、どこかの極限から始めるべきだろう、その極限としては、斥力 U が非常に大きく、高密度 ($n \simeq 1$) の場合が1つの候補になりうる、と思いました。

4. La Jolla へ、そして Kondo 効果

その頃、私の基研助手在職も任期の3年に近づいていました。そろそろ転出先を考えなければ、と思っていたところへ、久保先生から、「La Jolla (カリフォルニア大学サンディエゴ校) の Suhl のところで人を求めている、いく気はないか？」というお話をいただいたのです。基研は外国へ出かけることについては寛大で、その上在外期間は任期にカウントしないという決まりもあります。しばらく外国に行って、転出先をゆっくり考えることもいいだろうと考えて、このお話をお受けすることにしました。その頃 La Jolla には物性では H. Suhl のほか W. Kohn がおり、原子核には Brueckner がいて、Brueckner のところに沢田克郎さんがおられました。物理教室はできてまだ数年で活気があり、研究環境としては申し分のない所だと思われました。私は、1964年4月に渡米し、La Jolla に2年滞在することになります。

La Jolla はカリフォルニア州の南端、メキシコとの国境に接した San Diego の街から少し北に行った海岸沿いの保養地です。大学の物理教室は少し前まで海岸に接してあったらしいのですが、私が行ったときは丘の上にできた新しい建物に引越したばかりでした。私がここで過ごした2年の間に入れかわり立ちかわりやってきた若い人たちとしては、Griffith (米)、T. M. Rice (アイルランド)、A. Griffin (カナダ)、L. Sham (香港)、C. J. Thompson (オーストラリア)、真木和美、M. Beal-Monod (フランス) 等がいました。ほとんどが外国人だったわけです。

それは、私が最初に出席した教室セミナーだったと記憶しています。そこで、ベル研究所からサバティカルで来ていた P. Wolff が近藤淳さんの論文¹⁾を紹介したのです。それまで私が日本で出席していたセミナーではしばしば論文紹介がされましたから、特別なこととは思いませんでしたが、これがじつは異例中の異例でした。その後のセミナーはいつも発表者自身の仕事の紹介で、論文紹介は二度とありませんでしたから。それだけ、この近藤論文が注目されたのです。

近藤理論は局在モーメントをもつ不純物(磁性不純物)による伝導電子の散乱確率を、局在スピンの伝導電子のスピン間の交換相互作用 J の3次まで求め、そこに $\log T$ に比例する項が現れることを示したものです。その結果、交換相互作用が反強磁性的 ($J < 0$) なとき、散乱が温度の下降とともに増大します。これによって、電気抵抗極小の現象を見事に解明したのでした。電気抵抗極小は超伝導が BCS 理論によって解決したあと、金属電子論に残された最大の問題の1つと考えられていましたから、近藤論文がセミナーで紹介されるという異例の扱いをうけたのも当然でした。

セミナーで論文紹介のあと活発な議論がなされました。主な議論は、 $\log T$ の項は $T \rightarrow 0$ で発散するから、もともとこういう摂動による取り扱いはいくつか、といったものだったと思います。

議論はセミナーの翌日以後も続きました。その中で沢田克郎さんが次のような主張をなされたのです。局在スピンの1個電子をつけ加え、その間に束縛状態の波動関数を仮定して変分を行うと、実際にエネルギーの低い束縛状態でできることがわかる。だから、この相互作用を摂動で扱うのは正しくない。これは、超伝導の場合でいうとフェルミ面の効果で電子対ができることを示し

た Cooper の理論に当たっています。のちの芳田理論でいうと 0 近似に当たります。

じつは、まったく同じ変分をしますと、 $J < 0$ の場合だけでなく $J > 0$ であっても、さらにただのポテンシャルの場合であっても、束縛状態ができてしまいます。 $J > 0$ のとき、あるいはただのポテンシャルの場合に摂動が悪いとは考えられません。沢田さんの主張に対して、この点を指摘して反論したのは Suhl でした。変分は変分関数のとり方によってどんな結論でも出てきうるから信用できない、というのが Suhl のいい分でした。

この問題に Chew-Low の散乱理論が応用できるのではないかと Suhl に示唆したのは、このときサバティカルで La Jolla にいた Dyson でした。この示唆で Suhl は散乱理論の勉強を始めたのです。

私は“Cooper 理論”がだめならもう一步進んでみよう、と考えました。超伝導でいえば BCS 理論、もしくはそのグリーン関数版である Gorkov 理論まで行ってみよう、ということです。低温で局在スピンによる電子の散乱が強くなり、束縛状態ができそうに見えるのは、局在スピンと電子の間に強い相関が生じることを示しています。金森理論の再現に使ってみたグリーン関数の方法がここでも役に立ちそうです。

Zubarev の処方箋に従って、まず電子の 1 体グリーン関数 $G(E)$ について運動方程式をたてますと、そこには電子と局在スピンが絡んだ 2 体グリーン関数 $\Gamma(E)$ が現れます。つぎに、 $\Gamma(E)$ に対する運動方程式をたてますと、こんどは 2 個の電子と局在スピンが絡んだ 3 体グリーン関数が現れます。ここで、電子 1 個と局在スピンの間の 2 体相関までが大事だと考えることにしますと、この 3 体グリーン関数を 2 体と 1 体の積に切断するという近似が使えることになります。こうして、 $G(E)$ と $\Gamma(E)$ だけで閉じた連立積分方程式が得られました。

得られた方程式は複雑で、私には到底きちんと解けるとは思えませんでした。そこでまず高温の領域で摂動的に解いてみますと、 J の各次数で発散の最も強い項はすべて含まれていることがわかりました。しかし、ここで得られる級数は

$$T_C = \frac{D}{k_B} e^{-1/|J|\rho} \quad (7)$$

という温度で発散してしまい、この解法は低温では使えません。そこで、 $T = 0$ 、フェルミ面上ではいいと思われる近似で解きなおしてみました。そうして得られる局在スピンと電子の相関はちょうど T_C で 0 になり、2 つの解は T_C で相転移が起きていることを示していました。前に磁性不純物の Anderson 理論に関連してお話しましたように、1 個の不純物で相転移が起きるはずはありません。相転移のように見えるのは解き方のせいで、2 つの解は滑らかにつながるべきだと、考えました。(7) 式は低温で局在スピンと電子の相関が大きくなる領域の目安の温度と見なすべきです。

一方、Suhl も散乱理論に基づき、散乱のチャンネルを 1 体散乱のみに制限するという近似によって、 T 行列のスピンに依存しない部分 t とスピンに依存する部分 τ との閉じた方程式を得ていま

した。Suhl はグリーン関数の切断はきらいで、私の話をなかなか認めてくれなかったのですが、それでも一応答えを出したことは評価してくれて、Physical Review への投稿を認めてくれました。こうして、私の論文 A も Suhl の論文⁸⁾ から少し遅れて Physical Review に載ったのです。

ここで少しばかり自己宣伝をしておきますと、“特性温度” T_C の存在を初めて指摘したのは私の論文だったと思っています。Suhl の最初の論文は $T = 0$ に限られていて、しかも t と τ の方程式をきちんと解いたわけでもありませんでした。 T_C に相当するものとして、その解に不安定性を示す極が現れるとしていますが、温度とは関係ありませんでした。1965 年の秋サンフランシスコで開かれた 3M の会議で Anderson が Kondo 効果のレビュー講演をしたのですが、このとき彼はこの特性温度を T_{KS} と書き、Kondo-Suhl 温度とよびました。これが特性温度に名前のついた最初だと思います。このあと Suhl が消えて Kondo 温度が定着したからそれでよいのですが、Kondo-Suhl とよぶのであれば、それはむしろ Kondo-Nagaoka であるべきだ、と密かに思っていました。

時間的な順序は前後しますが、Kondo 効果のその後のこととお話しておきたいと思います。まず、3M の会議のことですが、私が当時書いた報告がこの「物性研究」に私の三輪浩君あての手紙の形で載っています。⁹⁾ 私自身忘れていたのですが、数年前に「近藤効果 25 年」のエッセー¹⁰⁾ を書くときに「発見」しました。少し長いのですが、当時のことがわかって面白いのでさわりの部分を紹介いたします。

ところで、その Conference ですが、この local magnetic moment に関しては、二、三面白い話がありました。Dilute Alloy についての Symposium があり、その最初は近藤さんの話、これには飛行機がおくれて間に合いませんでした。

Anderson は、Theory of Localized Magnetic States in Metal と題して話しましたが、話のおしまいに言うには「今しゃべったことを証明しろといわれても出来ない」ということで彼の想像をのべたわけです。その想像は、 $T \leq T_{KS} (\simeq \epsilon_F \exp(-1/|J|\rho))$ で localized spin のまわりに conduction electron の spin があつまり出して、 $T = 0$ で localized spin に完全に打消されてしまうだろうということです。もう一つ強調したことは、上の様に言ってももともと localized spin とか conduction electron の spin とかいう区別は近似的なものなのだから、彼自身の model から出発して考えるべきだろうと言うことでした。この第二の点については、僕の感じでは、Anderson の model から出発したとしても core になる localized moment というのは、energy から言って Fermi 面からはなれた電子がつくって、 $T < T_{KS}$ でそのまわりに集まってこれを打消すのは Fermi 面の近くのものなのだから Anderson model $\rightarrow$ negative exchange $\rightarrow$ Kondo anomaly という行き方と本質的にちがったものは期待できない様に思われます。

実験ではこの問題と関連して Geballe の Fe in Ir の話が面白く思われました。いろいろな alloy に少量の Fe を入れて、 χ をはかるという例の実験で、Ir はちょうど Fe に local moment が出来かけたところにあたっているということです。ところでその χ の T -dependence は単純ではな

く、 $\chi \propto 1/T - \theta$ とはならず、ダラダラと $T = 0$ で constant に近づく様な感じでした。それが大分高温のところからその様なのです。Taylor-Steyert の Mössbauer の実験の結果も定性的に Geballe と一致しておりました。local moment が出来かけているというのは、Anderson の model で言えば大きな V_{sd} , または小さな ϵ_d に相当し、これは同時に大きな negative $J \sim -V^2/\epsilon_d$ を与える。従って critical な温度 T_{KS} は room temperature の order となり Fe のまわりには、高温から conduction electron spin の localization がはじまり、上の様な χ の T -dependence が出る、という説明は、虫がよすぎるのかどうか知りませんが、local moment が小さい時には何か複雑なことがおこっているということだけは事実の様です。

これを読み返して少々驚くのは、このとき Anderson はかなりよくその後の Kondo 効果の発展を見通していたことです。Anderson の予想は前半が芳田理論、後半が山田・芳田理論として実現するのですが、実現するとこんどは Anderson はそれを正当に評価できなくなってしまう、という奇妙な成りゆきがこの後続くことになります。¹⁰⁾ もう1つ、これはわれながら (!) 感心するのですが、Geballe 等の実験について、その意義を見ていたことです。

私は 1966 年 3 月、2 年間の La Jolla 滞在を終えて帰国しました。その年の秋か暮れだったと思います。ベル研究所の Hamann のところから名大に移っていた私のところに部厚いプレプリントが届きました。¹¹⁾ 読んでみると、私の出したグリーン関数のセルフ・コンシステント方程式をきちんと解いたというのです。その結果は、電気抵抗の温度変化が $T = 0$ の 1 点と高温領域は私のでよいが、途中はまったく違ったものになる、というものでした (図 4)。 $T = 0$ の振舞いがこんな風に異常になるとは、私はまったく予想していませんでした。さらに、Zittartz と Müller-Hartmann からプレプリントが送られてきて、¹²⁾ こちらはもっと数学的にきちんと解いていて、結果は Hamann と同じでした。

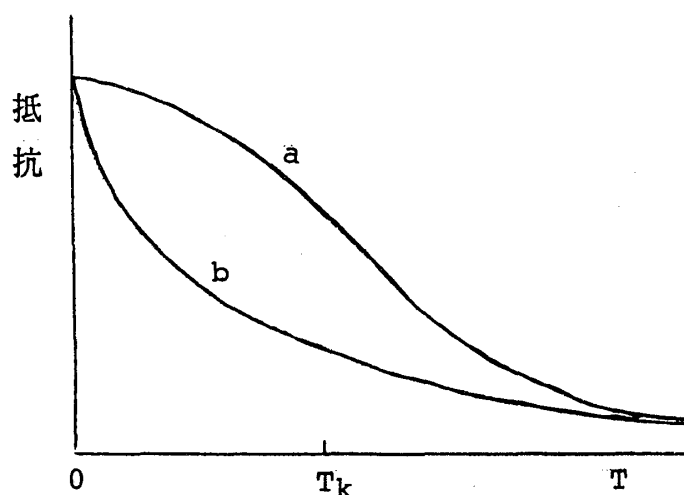


図 4 Nagaoka 近似による抵抗の温度変化 (a) 私の解 (b) Hamann の解

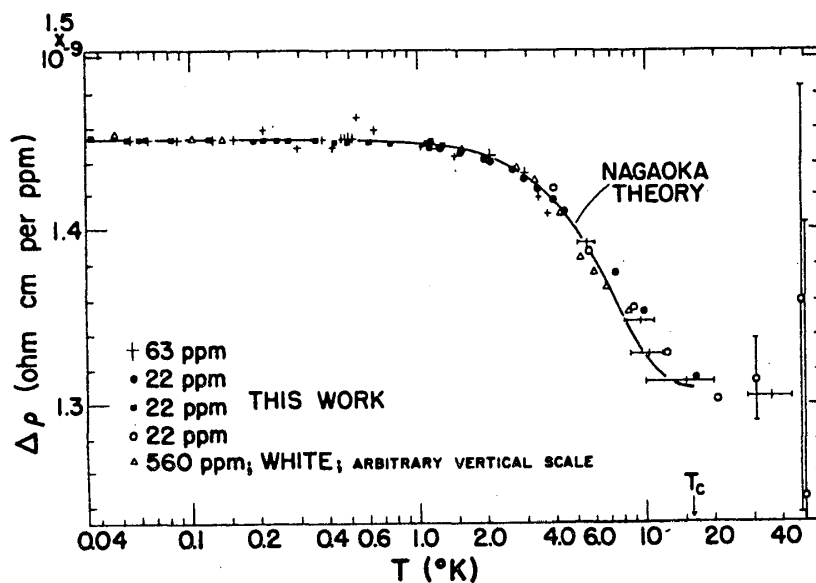


図5 Daybell-Steyertの実験(文献14))

Zittartzはさらに、私の近似と Suhl の近似がまったく同じものであることを示す論文を送ってよこしました。¹³⁾ 今から考えてみますと、Suhl の場合の1電子散乱のチャンネルに限る近似と、私の局在スピンの1電子の相関までを取り入れる近似とが同じものであることは当然のように思われるのですが、やっていた本人どうしはすぐそばにいながら、相手のことはよく理解できていなかったわけです。

Hamann からのプレプリントが届いた直後だったと思います。皮肉なことに Daybell と Steyert の実験の論文が届き、¹⁴⁾ そこでは Cu-Fe の希薄合金の実験結果が私の理論によくあうとしてあるのです(図5)。考えてみると、論文の届く順序がこれでよかったわけで、逆でしたら、私は Daybell-Steyert で大喜びし、Hamann でがっかりしていたことでしょう。Daybell-Steyert の論文が Phys. Rev. Letters に載ったあとに、学会で都築俊夫さんにお会いしたときでした。都築さんから、おめでとう、と声をかけられ、「いや、あれは」と説明しなければなりませんでした。

このあと、束縛状態の芳田理論が出、さらに Wilson のくりこみ理論、山田・芳田理論、厳密解と続く発展については、このあとの山田耕作さんの講演をお聞きいただくことにして、¹ 私の A の論文にからむ話はこのあたりでおしまいにしたいと思います。

5. すき間による強磁性

もう一度、話は La Jolla 時代に戻ります。La Jolla にやってきてから約1年間、Kondo 効果のことを続けていましたが、一段落したので渡米前に考えていたことに挑戦しようと思いました。

¹ 講演会ではこのあと山田耕作さんに Kondo 効果の理論の発展についてレビューしていただいた。

ハバード模型の高密度、強相関極限の問題です。

斥力 U が十分に大きく、電子数が原子当り 1 個であれば、電子系が絶縁体になることは明らかです。電子が動き出し金属らしくなるには、少しでもすき間がなければなりません。そこで最も簡単に思える場合として、 U が無限大で、電子数が原子数より 1 個足りない場合、つまりすき間が 1 個ある場合を考えることにしました。電子のとび移りは最隣接格子点の間でのみ起きるとします。

このすき間は絶縁体にできた空孔ではありますが、半導体の価電子帯にできるホールと同じものではありません。すき間が動きまわりますと、すき間だけは元の位置に戻ってもまわりの電子は位置を変えてしまうからです。唯一の例外はすべての電子のスピンが同じ向きに揃っている場合です。ですから、電子のスピンが完全に揃えば、すき間は自由に動くことができ、それだけエネルギーは下がるだろう、と想像されます。つまり、すき間の存在は電子系を強磁性にするのではないのでしょうか。

このことを証明するために、次の問題を考えてみることにしました。すべての電子スピンが同一方向に揃ったところに、1 個のすき間をつくり 1 個の電子のスピンだけを逆向きにします。このような状態で最もエネルギーの低い状態を探すことは、いわばすき間と逆向きスピンとの 2 体問題を解くことです。そう難しくはないはずです。もしも、このときすき間と逆向きスピンとの束縛状態ができて、エネルギーが全スピンが揃った場合よりも下がるようであれば、全スピンの揃った状態は基底状態でないことになります。

少し苦勞しましたが、この問題は解くことができました。その結果は半分は期待通りで、半分は意外でした。期待通りだったのは、2 次元でいえば正方格子、3 次元では単純立方格子や体心立方格子、つまり格子がたがいに最隣接格子点であるような 2 つの副格子に分かれる構造のもの（二部格子）の場合には、エネルギーの低い状態はなく、スピンが完全に揃った強磁性状態が基底状態らしい、とわかったことです。意外だったのは（これを意外と感じたのは、私の考えが足りなかったせいなのですが）、それ以外の、例えば面心立方格子などではエネルギーの低い状態があることがわかり、スピンの完全に揃った状態は基底状態でないことが証明されてしまったことでした。

もちろん、この前半の結論は強磁性状態のスピン波的な励起に対する安定性を示しただけであって、強磁性状態が基底状態であることの証明にはなっていません。しかし、結論は正しかろうと見込がつかしましたから、きっと証明できるはずだ、と思いました。それからいろいろ苦勞をして見つけた証明が B の論文では述べられています。

1965 年の夏、東部で不規則系をテーマにしたゴードン会議が開かれ、Suhl が Kondo 効果の話をする事になり、私にも一緒に出るよう誘ってくれました。渡米して 2 年目の、はじめての東部への旅でした。ゴートン会議の中味はよく覚えていません。Mott などの有名人と会えたのが収穫といえば収穫でした。三沢節夫さんともお会いしたのを記憶しています。

その帰途、ベル研究所を訪れました。前年 La Jolla に来ていた Wolff の紹介で Anderson に会うのが目的です。はじめて会う Anderson は少しこわかったですが、物理の話については一言二言をいうと全部わかってもらえる風で、さすがという印象をもったものです。はじめ Kondo 効果の話をし、低温では局在スピンと電子スピンの間にある種の束縛状態ができて、一重項状態になっているのだと思う、と私の予想をいうと、Anderson は自分もそう思う、と同意してくれたのを覚えています。前に話しました 3M での彼の講演はこのときの議論とほぼ同じ線だったと思います。

Anderson がほかに何か話はないか、というので、ハバード模型がすき間で強磁性になる話をしました。証明の細かいところまでは話していないのですが、結論をすぐに信じてくれて、それは面白い、といいます。Anderson がいうには、金属が強磁性になるにはバンドの縮退が絶対に必要だと考えているものもいる。(例えば、同じベル研にいる Herring がそうだ。) 簡単なモデルの特殊な場合であっても、縮退のないバンドで強磁性が出ることが厳密に証明できたというのはたいへん面白いから、すぐ論文を書きなさい。

私は Anderson にほめられて自分の発見に自信をもち、La Jolla に帰りました。ところが、間もなく Thouless からの手紙が届いたのです。手紙にはこういうことが書いてありました。“私は先日 Anderson に会ったが、そこであなたが私と同じ発見をしていることを知った。私の証明は簡単で、かくかくしかじか、である。あなたは私よりも先に進んでいると思うが、とにかく私の論文のプレプリント¹⁵⁾をあとで送る。”

このことを Suhl に話しますと、“なに、まだ論文にしていない話を Anderson にしたって？ 彼に話すのは世界中に公表するようなものだ。すぐに論文にきなさい！”というのです。なるほど、これが競争というものか、とはじめて実感したわけです。Suhl にしても自分の研究費でやとっている若いものがみすみす論文を 1 つ損するのを見過ごすわけにはいかないのです。

すぐ短いレターを書いて Phys. Rev. Letters に送ったのですが、これでは内容がわからん、といって断られました。また Suhl に相談すると、Solid State Communications なら自分も編者だからすぐ載せられる、そっちに出しなさいということになり、まずレターが Solid State Communications に載りました。¹⁶⁾ Thouless にお前の方が進んでいるだろう、といわれますと、できていた証明だけの本論文にもできず、有限な U 、有限なすき間の濃度の場合の議論を加えて論文を書き、これが Phys. Rev. に載って、B の論文になったのです。

この金属強磁性の話を Anderson に話したことは、この論文を有名にする点では得をすることにつながったと思います。この話が Anderson には印象深かったらしく、しかも Thouless の話としてではなく、最初に聞いた私の話として記憶していたのだと思います。高温超伝導が出て、強相関電子系におけるすき間 (Anderson のホロン) の振舞いが問題になったとき、20 年以上前の私の話を思い出したのでしょう。1988 年以後の急激な引用数増加のきっかけを作ったのはたぶん Anderson にちがいない、と私は思っています。

論文 B で私がした証明に私自身は愛着をもっていますが、ややこしすぎるので、ここではもっ

6	13	10	2
15	1	14	8
9	7	3	11
12	4	5	

(a)

1	2	3	4
5	6	7	8
9	10	11	12
13	14	15	

(b)

1	2	3	4
5	6	7	8
9	10	11	12
13	15	14	

(c)

図6 15 パズル

と簡単な証明を1つご紹介したいと思います。図6のようなパズルをたぶんご存知と思います。15パズルというようですが、² (a) のようにでたらめに配列した札を1つだけあるすき間を使って並べかえ、例えば (b) のように順序よく並べるのです。遊んだことのある方はご存知と思いますが、場合によっては (c) になってしまい、こうなると絶対に (b) にすることはできません。

このパズルはまさしく、 $U = \infty$ の2次元正方格子ハバード模型ですき間が1個ある場合です。このような二部格子では1個のすき間による粒子の移動では粒子の偶置換しか起きえません。このことは簡単に証明できます。図の (c) から (b) への並べかえは14と15の入れかえですから奇置換であり、不可能なわけです。

電子系の場合、偶置換しか起きないとすれば波動関数は符号を変える必要がありません。このとき、波動関数を軌道部分とスピン部分の積に

$$\Psi(\mathbf{r}_1, \sigma_1, \mathbf{r}_2, \sigma_2, \dots, \mathbf{r}_N, \sigma_N) = \Phi(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2, \dots, \mathbf{r}_N) \chi(\sigma_1, \sigma_2, \dots, \sigma_N) \quad (8)$$

と書いたとしますと、エネルギーが最も低いのは Φ がボース粒子系の基底状態と同じになった場合です。 Φ が粒子置換に対して対称ですから、 χ も対称であればよく、それはスピンが完全に向きを揃えた状態に当たります。そのとき Ψ も必要な対称性を満たしているわけです。

この証明から、二部格子以外では証明が成り立たないことがすぐにわかります。二部格子以外ではすき間の移動で奇置換が可能だからです。二部格子でもすき間で2個あると、もう成りたちません。2個のすき間が近くにあると、2粒子の置換、つまり奇置換も可能になるからです。

このことが、のちのちに問題を残すことになっていました。マクロな系の強磁性を論じようとすれば、どうしてもすき間が有限の濃度である場合を考えねばなりません。しかし、1個ならよいが2個ならだめというのでは、有限の濃度で何が起こるかはまったく予想できなくなってしまい

² 講演会のあと、円慶勝市さんが「パズル遊びへの招待」(高木茂男著、PHP 研究所、1994年)という本のコピーを送って下さった。この本によると15パズルを考案したのはサム・ロイドというアメリカ人で、1878年のことだそうである。ロイドはこのパズルを売り出したとき、図6の(c)から(b)への並べかえに1000ドルの賞金を出したという。もちろん、不可能なことを知った上での話題づくりのためだったが、おかげでこのパズルは爆発的に流行したそうである。

ます。楽天的に考えますと、濃度が十分に薄く、すき間がばらばらに離れて動いていればいいのですから、強磁性になりそうが気がするのですが、ほんとうにそれでいいのかどうか。主として計算機によるたくさんの論文が現れたのは、このことを確かめるためでした。現在どこまではっきりしているのか、私はよく知りませんが、まだ結論は出ていないと聞いています。その後の発展については斯波弘行さんの話をお聞き下さい。³

6. その後

帰国後、私は基研から名大に移りました。そこでの研究は最初しばらくはこの2つの研究の続きでした。Kondo 効果に関しては、超伝導中の Kondo 効果の問題を松浦民房さん、市ノ瀬慎一さん、宗田敏雄さんと、¹⁷⁾ 不純物が2個ある場合のことを佐藤紘為さんと ¹⁸⁾ 研究しました。すき間による強磁性についてはこれを固体 ^3He に適用した研究を寺中久男さんと ¹⁹⁾ しています。私のこれまでの研究生活のうちの前半部分は、この2編の論文で占められている、といってもよいと思います。

30年以上前からの昔話をながながと話してしまいました。最後までつきあって下さった皆様に心からお礼申し上げます。

* * *

私の二つの論文の元を辿っていきますと、その出発点は1961年のICMにあり、その翌年の磁性不純物に関する金徳洲さんとの共同研究にあることがわかります。その金さんが昨年4月急逝されました。講演会にも来て下さるはずだったのがご不幸があつて取消になり、その翌月に亡くなられたのです。私にとっては、この話を一番聞いていただきたかった人でした。心よりご冥福をお祈りし、この講演のまとめを献じたいと思います。

文 献

- 1) J. Kondo: Prog. Theor. Phys. **32** (1964), 37.
- 2) A. M. Clogston, B. T. Matthias, M. Peter, H. J. Williams, E. Corenzwit and R. C. Scherwood: Phys. Rev. **125** (1962), 541.
- 3) P. W. Anderson: Phys. Rev. **124** (1961), 41.
- 4) D. J. Kim and Y. Nagaoka: Prog. Theor. Phys. **30** (1963), 743.
- 5) J. Kanamori: Prog. Theor. Phys. **30** (1963), 275.
- 6) D. N. Zubarev: Usp. Fiz. Nauk **71** (1960), 71. [Sov. Phys.-Uspekhi **3** (1960), 320.]
- 7) J. Hubbard: Proc. Roy. Soc. (London) **A276** (1963), 238.

³ 講演会ではハバード模型と電子相関の研究の発展について斯波弘行さんに話していただいた。

- 8) H. Suhl: Phys. Rev. **138** (1965), **A515**.
- 9) 長岡洋介: 物性研究 **5** (1966), 235.
- 10) 長岡洋介: 日本物理学会誌 **44** (1989), 389; 固体物理 **25**(1990), 29; 同 **25** (1990), 14.
- 11) D. R. Hamann: Phys. Rev. **158** (1967), 570.
- 12) J. Zittartz and E. Müller-Hartmann: Z. Phys. **212** (1968), 380.
- 13) J. Zittartz: Z. Phys. **217** (1968), 43.
- 14) M. D. Daybell and W. A. Steyert: Phys. Rev. Letters **18** (1967), 398.
- 15) D. J. Thouless: Proc. Phys. Soc. (London) **86** (1965), 893.
- 16) Y. Nagaoka: Solid State Commun. **3** (1965), 409.
- 17) T. Soda, T. Matsuura and Y. Nagaoka: Prog. Theor. Phys. **38** (1967), 551.
T. Matsuura and Y. Nagaoka: Prog. Theor. Phys. **46** (1971), 364.
T. Matsuura and Y. Nagaoka: Solid State Commun. **18** (1976), 1583.
T. Matsuura, S. Ichinose and Y. Nagaoka: Prog. Theor. Phys. **57** (1977), 713.
- 18) K. Sato and Y. Nagaoka: Prog. Theor. Phys. **47** (1972), 348; *ibid* **49**(1973), 1377;
ibid **50** (1973), 37; *ibid* **53** (1975), 366.
- 19) H. Jichu and Y. Nagaoka: Prog. Theor. Phys. **61** (1979), 1273; *ibid* **65** (1981), 414.