

# Contents

<b>1</b>	<b>序論</b>	<b>9</b>
1.1	第一原理電子状態計算	9
1.2	DFTの問題点	9
1.2.1	電子状態	10
1.2.2	結晶構造	10
1.2.3	電子相関効果と有限温度効果	11
1.3	DFT+DMFTの問題点	12
1.3.1	DFT+DMFTのアルゴリズム	13
1.3.2	不純物問題ソルバー	14
1.4	研究の目的	14
<b>2</b>	<b>手法</b>	<b>17</b>
2.1	DMFT 自己無撞着ループ	17
2.2	自然軌道を用いた数値対角化ソルバー	17
2.2.1	自由電子浴の初期グリーン関数 $G_0(\omega)$ の離散化	19
2.2.2	熱浴グリーン関数の計算 (step 1)	20
2.2.3	不純物アンダーソン模型の作成 (step 2-1)	21
2.2.4	基底状態と不純物グリーン関数の計算 (step 2-2)	22
2.2.5	自己エネルギー (step 3)	24
2.3	ポールの数の削減方法	24
2.4	自然軌道	25
<b>3</b>	<b>結果</b>	<b>29</b>
3.1	2次摂動との比較	30
3.2	先行研究との比較	32
3.3	その他のパラメータの結果	34
<b>4</b>	<b>まとめ</b>	<b>35</b>
<b>5</b>	<b>付録</b>	<b>37</b>
A	LOBCG法	37

B	ランチョス法および thick restart ランチョス法 . . . . .	38
---	--	----