

## 付録B 構造最適化前のバンド構造と状態密度

ここでは単層モデルにおいて、構造最適化を行わず、中性  $C_{60}(111)$  の構造を用いて計算した電場効果ドーピング  $C_{60}$  のバンド構造、 $C1s$  の準位、状態密度を示す。

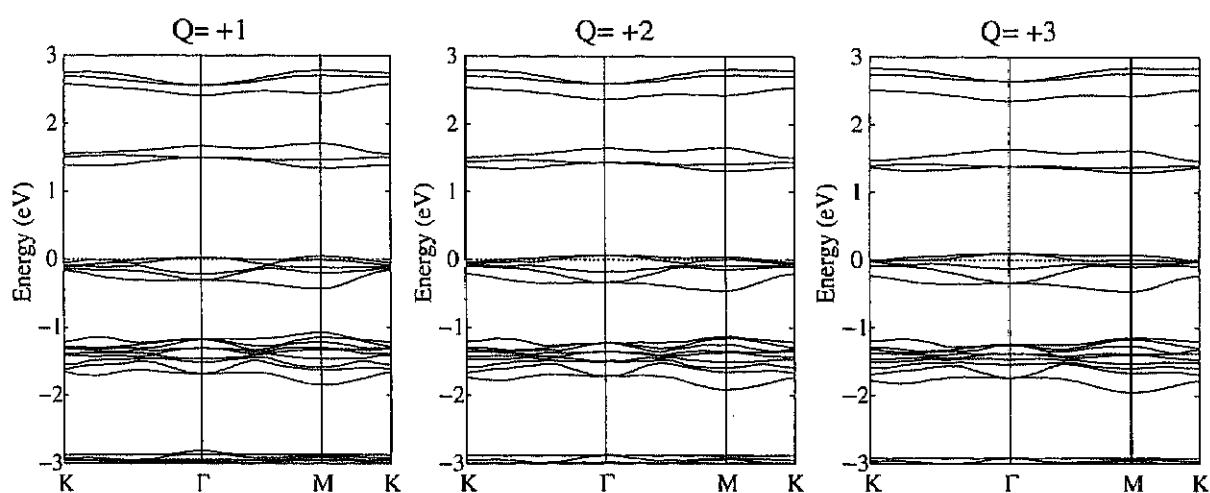


図 B.1: 構造最適化前のホールドーピング  $C_{60}$  のバンド構造. エネルギーの原点は Fermi 準位に取ってある.

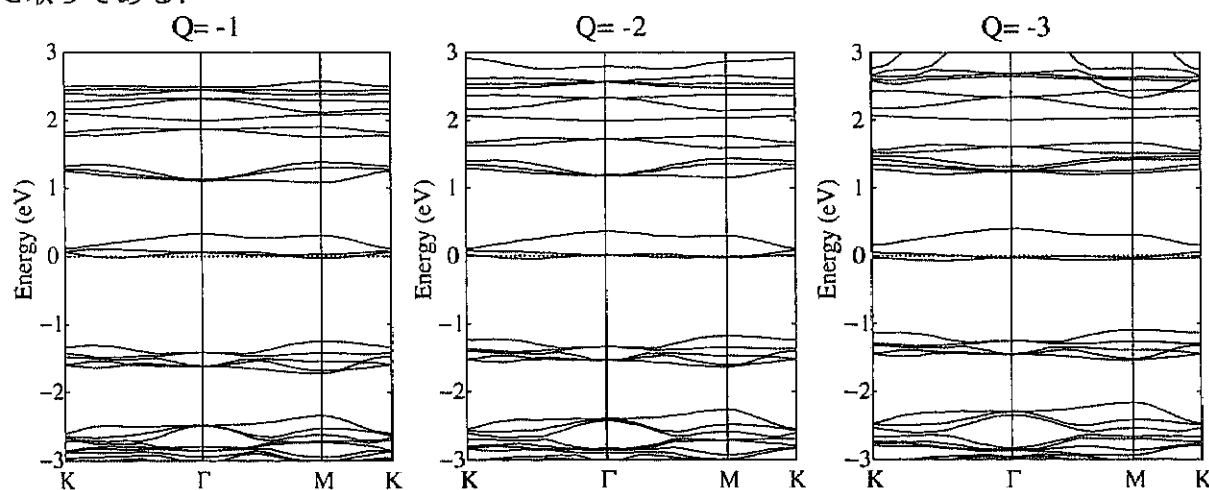


図 B.2: 構造最適化前の電子ドーピング  $C_{60}$  のバンド構造. エネルギーの原点は Fermi 準位に取ってある.

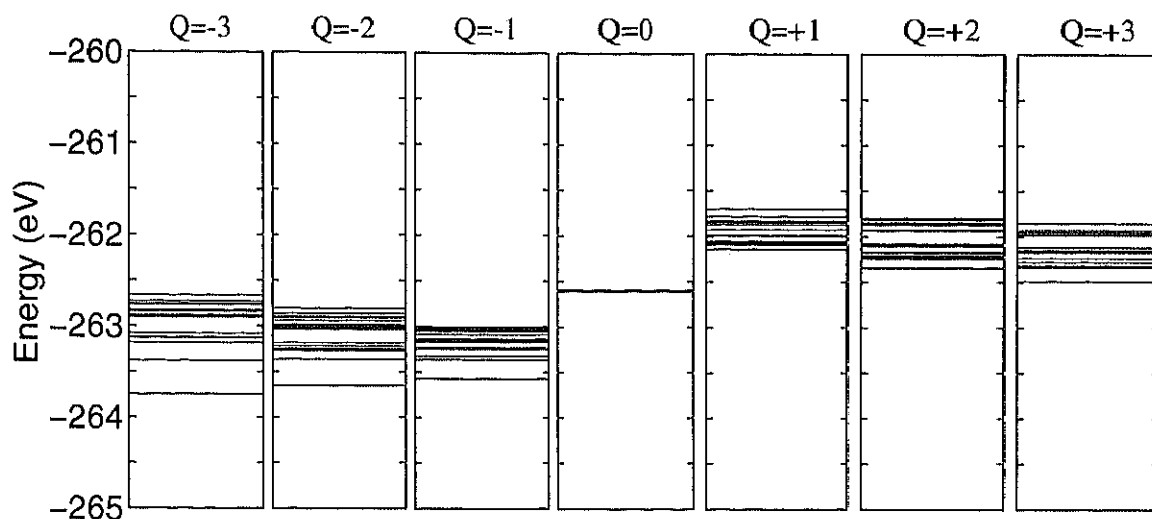


図 B.3: 構造最適化前の C1s のエネルギー準位

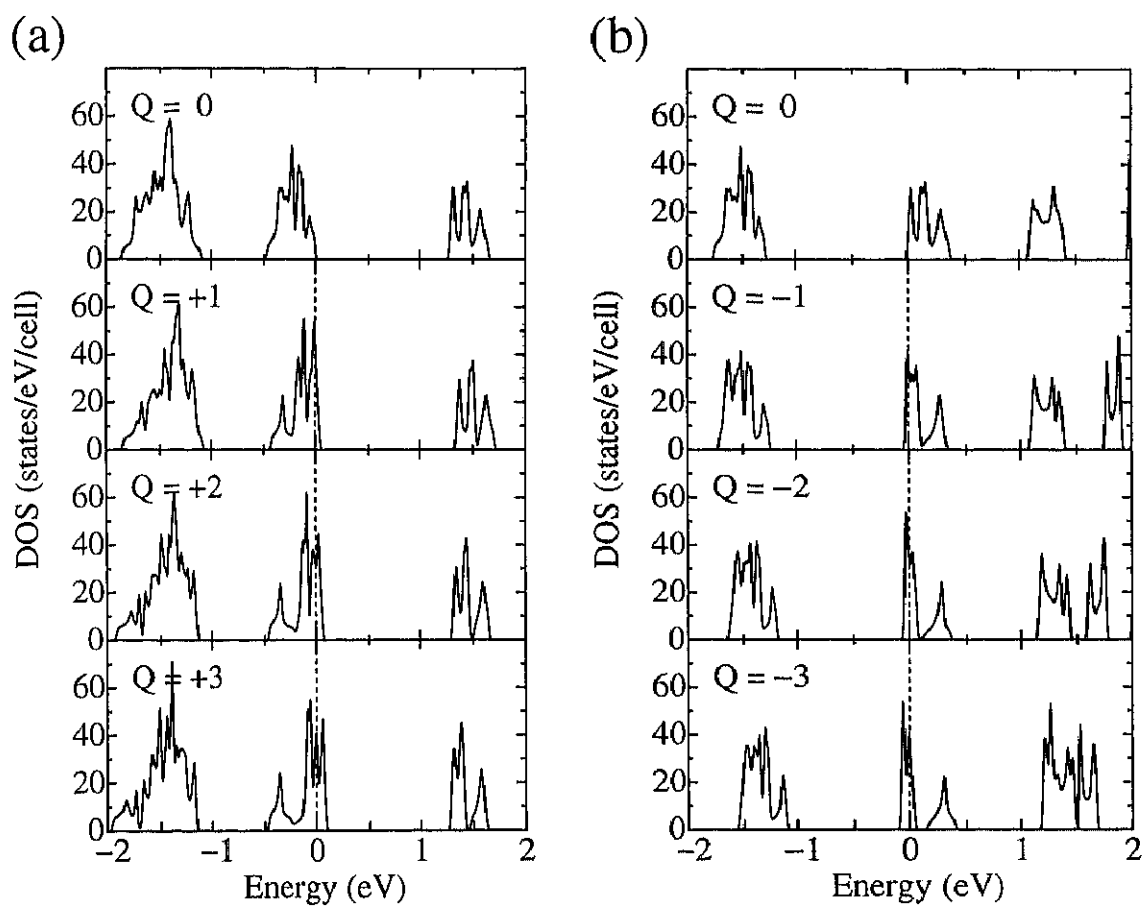


図 B.4: 構造最適化前の (a) ホールドーピング C<sub>60</sub>, (b) 電子ドーピング C<sub>60</sub> の状態密度