

DA  
3404  
2003  
HG

電場効果ドーピング $C_{60}$ の構造と電子状態の  
第一原理的研究

工学研究科

筑波大学

2004年3月

千田 忠彦

04010808

寄贈  
千田忠彦氏

# 目次

論文要旨	3
第1章 序論	4
1.1 C <sub>60</sub> の研究の発展	4
1.2 C <sub>60</sub> 分子と C <sub>60</sub> 固体	5
1.3 化学的ドーピング	7
1.4 電場効果ドーピング	12
1.5 研究目的	14
第2章 計算手法	16
2.1 密度汎関数理論	16
2.2 局所スピン密度近似	18
2.3 LCAO 法	20
2.4 Full-Potential 法	22
2.5 全エネルギー計算	24
2.6 力の計算	26
2.7 2次元 Ewald 法	27
2.8 計算モデル	31
2.9 計算条件	33
第3章 結果と考察	35
3.1 構造最適化	35
3.2 電荷密度分布	38
3.3 ポテンシャル	42
3.4 バンド構造	46
3.5 状態密度	49
3.6 3層モデル	51
3.7 低キャリア濃度	58
3.8 Thomas-Fermi 法による解析	59
第4章 結論	61
謝辞	63
付録 A $D_{lm}$ の表式	64

付 録 B 構造最適化前のバンド構造と状態密度	66
付 録 C Thomas-Fermi 方程式	68
参考文献	70
論文リスト	74