

## 多層グラフェン/Ni(111)のスピンスピン分極と ラッシュバ効果の第一原理計算

<sup>1</sup>金沢大学理工研究域数物科学系, <sup>2</sup>金沢大学大学院自然科学研究科数物科学専攻

石井史之<sup>1</sup>, 小鷹浩毅<sup>2</sup>, 澤田啓介<sup>2</sup>, 斎藤峯雄<sup>1</sup>

最近, スピントロニクス応用との関連で, Ni(111)上のグラフェンにおいて, ラッシュバ効果によって起こるスピンスピン分裂した電子状態や実空間のスピンスピン分極が議論されている. [1-3].

我々は, 局在基底電子状態計算コードOpenMX[4]に実装されたスピンスピン軌道相互作用を含んだノンコリニアスピンスピン密度汎関数法によって, 実空間と運動量空間でスピンスピン分極したNi(111)上の多層グラフェンの電子状態を明らかにした. 単層グラフェン/Ni(111)では, グラフェンの状態はNiの状態と強く混成している為, ディラックコーン型のバンド分散は完全に破壊されるが, 二層グラフェン/Ni(111)ではディラックコーン型のバンド分散がマイノリティスピンスピン成分のみ回復されることが明らかとなった.

我々は多層グラフェン/Ni(111)のブリルアンゾーンのK点近傍のスピンスピン分裂したバンドが形成する, 運動量空間におけるスピンスピン渦のエネルギー依存性を調べたのでその結果について報告する. また, 同じハニカム格子を持つ, Bi(111)薄膜におけるラッシュバ効果と比較し, 議論する.

[1] Yu. S. Dedkov, M. Fonin, U. Rüdiger, and C. Laubschat, *Phys. Rev. Lett.* **100**, 107602 (2008).

[2] O. Rader, A. Varykhalov, and J. Sanchez-Barriga, D. Marchenko, A. Rybkin, and A. M. Shikin, *Phys. Rev. Lett.* **102**, 057602 (2009).

[3] K. Sawada, F. Ishii, M. Saito, *Phys. Rev. B* **82**, 245426 (2010).

[4] T. Ozaki, H. Kino, J. Yu, M. J. Han, N. Kobayashi, M. Ohfuti, F. Ishii, T. Ohwaki, H. Weng, M. Toyoda, and K. Terakura, [http:// www.openmx-square.org/](http://www.openmx-square.org/)