

Weak Localization in Mono-layer Graphene with Rashba Spin-Orbit Interaction

Eduardo Serna*

Dep. de Física y Matemáticas, Universidad Iberoamericana, CDMX 01219, México

I. Rodríguez Vargas†

Unidad Académica de Física, Univ. Autónoma de Zacatecas, Zacatecas 98060, México

L. Diago-Cisneros‡

Facultad de Física, Universidad de La Habana, La Habana 10400, Cuba

(Dated: 26 December 2024)

In this work, we present a theoretical and computational analysis of the effects of Rashba-type spin-orbit interaction (SOIR) on the quantum dynamics and scattering of Dirac fermions (fD) in monolayer graphene (MLG). By using a Gaussian wave packet (GWP) approach, we calculate the temporal evolution of the GWP for various values of its wave number, initial energy, and potential barrier strength. Our findings demonstrate that the SOIR induces changes in both the appearance and intensity of the transmission coefficient. This is particularly significant because, in pristine MLG, no variations in the transmission coefficient had been observed under normal incidence. Additionally, we propose a novel approach for calculating the probability current density of a Dirac fermion flow in MLG with channel interference, which has not been previously reported in the literature.

I. INTRODUCTION

Monolayer graphene, a single layer of carbon atoms arranged in a honeycomb lattice, exhibits unique electronic properties stemming from quantum interference effects, spin-orbit interactions, and quantum dispersion. These properties are vital for potential applications in spintronics and quantum computing.

A. Weak Localization

Weak localization (WL) and weak antilocalization (WAL) are quantum phenomena arising from the interference of electron waves in disordered materials. In graphene, these effects are heavily influenced by spin-orbit interactions (SOI), which describe the coupling between an electron's spin and its momentum. Strong SOI can cause a transition from WL to WAL, modifying the phase coherence length (the distance over which electron

waves maintain their phase relationship) and impacting electrical conductivity[1, 2]. This transition is crucial for understanding spin interactions within graphene and designing quantum devices.

B. Rashba-Type Spin-Orbit Interaction

Rashba-type SOI, originating from structural asymmetries in a material, can be significantly enhanced in graphene by proximity to other materials like transition metal dichalcogenides (TMDs) layered materials composed of a transition metal and two chalcogen atoms. This interaction introduces a strong SOI without altering graphene's structure[2, 3]. The strength of this Rashba coupling affects phenomena such as spin-polarized-edge states (electrons at the material's edges possessing a preferred spin orientation) and is tunable using external electric fields. This tunability is a key advantage for spintronic applications.

C. Quantum Dispersion and Anomalous Hall Effect

These interactions also impact quantum dispersion, the relationship between an electron's energy and momentum. The anomalous Hall effect (AHE), where a transverse voltage arises without an external magnetic field, has been observed in edge-bonded monolayer graphene[4]. This demonstrates both ordinary and anomalous Hall effects, indicating long-range ferromagnetic order (spontaneous alignment of electron spins) and suggesting applications in carbon-based spintronics[5]. The theoretical prediction of the quantum anomalous Hall (QAH) effect in graphene-based heterostructures further highlights the potential for hosting non-trivial topological phases.

Electrostatic potential and Rashba spin-orbit interaction dramatically alter electron transmission in graphene, even at perpendicular incidence, defying the Klein paradox. The observed phenomenon results from several interacting factors: the creation of a classically forbidden region by the Potential, SOIR-induced spin degen-

* sernaed95@gmail.com

† isaac@fisica.uaz.edu.mx

‡ ldiago@fisica.uh.cu

eracy lifting and heavy hole effective mass alteration, spin-dependent interphase scattering, the formation of quasi-bound states leading to resonant tunneling, and the significant impact of the heavy hole effective mass on tunneling characteristics. These factors, particularly the deviation from the Dirac point dispersion relation, significantly modify transmission, requiring further computational and experimental investigation to fully elucidate this phenomenon and refine our understanding of graphene electron transport.

II. DEVELOPMENT

A. Physical Model

A quantum channel was fabricated using a hexagonal boron nitride substrate, upon which monolayer graphene (MLG) was deposited and subsequently capped with a silicon dioxide layer. Two metallic electrodes were incorporated to generate a perpendicular electric field, thereby confining a Gaussian wave packet (GWP) within the graphene. A rectangular potential barrier, integrated within this channel, resulted in the creation of a spin-orbit interaction resonance (SOIR).

B. Mathematical Model

From the physical model, we can get a mathematical model which describes the temporal evolution and consequently the quantum dispersion of the fDs in the MLG.

Starting with the pristine graphene hamiltonian[6]:

$$\hat{H}_G = v_F \vec{\sigma} \cdot \vec{p}, \quad (1)$$

with $\vec{\sigma} = \hat{\sigma}_x \hat{i} + \hat{\sigma}_y \hat{j}$, being the pseudospin Pauli matrices $\hat{\sigma}_x = \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix}$, $\hat{\sigma}_y = \begin{pmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{pmatrix}$, and $\vec{p} = \hat{p}_x \hat{i} + \hat{p}_y \hat{j}$, the momentum operator, which x, y components read $\hat{p}_x = -i\hbar \frac{\partial}{\partial x}$ and $\hat{p}_y = -i\hbar \frac{\partial}{\partial y}$, respectively. From this point forward, v_F stands for the Fermi velocity of the carriers in MLG, which satisfies

$$v_F \approx \frac{c}{300}. \quad (2)$$

The previous hamiltonian can be rewritten as:

$$\hat{H}_G = -i\hbar v_F \begin{pmatrix} 0 & \frac{\partial}{\partial x} - i \frac{\partial}{\partial y} \\ \frac{\partial}{\partial x} + i \frac{\partial}{\partial y} & 0 \end{pmatrix}. \quad (3)$$

Assuming that the momentum-dependent term of the Rashba Hamiltonian for Q1D (quasi-one dimensional) semiconductor hetero-structures can be extended to the context of MLG-Q1D[7, 8], it follows that the hamiltonian for the SOIR can be written as:

$$\hat{H}_R = \begin{pmatrix} 0 & k_{\alpha-} + k_{\beta-} \\ k_{\alpha+} + k_{\beta+} & 0 \end{pmatrix}, \quad (4)$$

where $k_{\alpha\pm} = \alpha(k_{\pm}^2/k_{\mp})$ and $k_{\beta\pm} = \beta k_{\pm}^3$; also defining that $k_{\pm} = k_x \pm ik_y$ which are the initial wave numbers of the system. The symbols α and β represent the linear and cubic contribution of the SOIR respectively. We are also taking into account that $\alpha = -\beta$, following the conclusions presented by Wong and Mireles[9].

For this research, we assume the heavy holes only in the region defined by the potential barrier.

The potential barrier is defined only in the specified region.

With the following hamiltonian:

$$\hat{H}_V = I_2 V(x) \quad (5)$$

Adding up the graphene(3), the SOIR(4), and the potential barrier(5) Hamiltonians, while also zeroing the parameters in the y direction, we get:

$$\hat{H} = \begin{pmatrix} V(x) & (k_{\alpha-} + k_{\beta-}) - i\hbar v_F \frac{\partial}{\partial x} \\ (k_{\alpha+} + k_{\beta+}) - i\hbar v_F \frac{\partial}{\partial x} & V(x) \end{pmatrix}. \quad (6)$$

Note that if we wanted to see the results in the y direction, we would have to zero the partial derivatives of x .

C. Finite differences scheme

La principal ecuación a resolver es la ecuación de Schrödinger dependiente del tiempo:

$$i\hbar \frac{d}{dt} \Psi(x, t) = \hat{H} \Psi(x, t) \quad (7)$$

En nuestro caso consideramos un paquete de ondas gaussiano (GWP) para cada componente del pseudoespinor $\Psi(x, t) = \begin{pmatrix} \psi_A(x, t) \\ \psi_B(x, t) \end{pmatrix}$. El GWP en un tiempo inicial tiene la siguiente forma:

$$\psi_j(x, t_0) = \frac{\xi_j}{\sqrt[4]{\pi\sigma^2}} e^{-\frac{(x-x_0)^2}{2\sigma^2}} e^{ixk_0} \quad (8)$$

donde ξ es la configuración inicial del pseudoespinor, k_0 es el número de onda inicial en x y el subíndice j indica la componente que se está usando.

Para el desarrollo de este artículo estamos ocupando las siguientes opciones de configuración del pseudoespinor:

$$\xi = \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix}, \begin{pmatrix} 1 \\ 1 \end{pmatrix}, \begin{pmatrix} 1 \\ i \end{pmatrix}, \begin{pmatrix} 1 \\ e^{i\pi/4} \end{pmatrix}. \quad (9)$$

El paquete de ondas entonces queda definido de la siguiente manera:

$$\Psi(x, 0) = \frac{1}{\sqrt{\xi_A^2 + \xi_B^2}} \begin{pmatrix} \psi_A \\ \psi_B \end{pmatrix} \quad (10)$$

Para la densidad de probabilidad calculada a continuación, usamos la siguiente definición:

$$\rho(x, t) = |\Psi|^2 = |\psi_A|^2 + |\psi_B|^2 \quad (11)$$

D. Temporal Evolution Operator

Para resolver la ecuación de Schrödinger(7) se propone el uso de un operador de evolución temporal(TEO), a partir de la siguiente ecuación:

$$\Psi(x, t) = \hat{U}(t, t_0) \Psi(x, t_0) \quad (12)$$

podemos ver que al aplicar el operador, obtenemos un tiempo t para un tiempo t_0 . Si se sustituye la ecuación del TEO(12) en la ecuación de Schrödinger(7), se puede desarrollar el álgebra y resolver la ecuación diferencial obteniendo al TEO. Sabemos que el hamiltoniano no depende del tiempo, entonces podemos reescribir la ec.(12) como:

$$\Psi(x, t) = e^{-\frac{i\delta t}{\hbar} \hat{H}} \Psi(x, t_0) \quad (13)$$

donde δt es el paso en el tiempo que discretizaremos más adelante. La exponencial anterior se puede aproximar a través de la serie de Taylor de primer orden como:

$$e^{-\frac{i\delta t}{\hbar} \hat{H}} = \frac{2}{\mathbf{I} + \frac{i\delta t}{2\hbar} \hat{H}} - bn\mathbf{I} \quad (14)$$

Haciendo uso de un cambio de variable podemos reescribir la ecuación anterior(14) como:

$$\Phi(x, t_0) + \frac{i\delta t}{2\hbar} \hat{H} \Phi(x, t_0) = 2\Psi(x, t_0) \quad (15)$$

esta ecuación representa un sistema de ecuaciones de 2×2 (ya que tenemos dos incógnitas que son ϕ_A y ϕ_B y al

desarrollar la matriz, podemos ver que se forman dos ecuaciones).

Como ambas ecuaciones tienen derivadas, ocupamos el método de diferencias finitas para resolver ambas ecuaciones para todo el espacio simultáneamente. Para realizar esto, primero discretizamos al sistema de ecuaciones(15) a lo largo de todo el espacio j desde 0 hasta J .

Para mantener la estabilidad del análisis numérico en el método de diferencias finitas, se debe respetar la siguiente condición[10]:

$$\delta t \leq \frac{(\delta x)^2}{2} \quad (16)$$

Para discretizar las derivadas, ocupamos la expansión en serie de Taylor hasta el primer grado para el punto x_j posterior y anterior:

$$\begin{aligned} f(x_j + \delta x) &= f(x_j) + (x_j + \delta x - x_j) f'(x_j) \\ &= f(x_j) + \delta x f'(x_j), \\ f(x_j - \delta x) &= f(x_j) + (x_j - \delta x - x_j) f'(x_j) \\ &= f(x_j) - \delta x f'(x_j) \end{aligned} \quad (17)$$

si restamos la segunda ecuación de la primera y despejamos, podemos encontrar las “Diferencias Centradas” que podemos discretizar también como:

$$f'(x_j) = \frac{f(x_j + \delta x) - f(x_j - \delta x)}{2\delta x} = \frac{f_{j+1} - f_{j-1}}{2\delta x} \quad (18)$$

De este modo podemos reescribir nuestro sistema de ecuaciones, una vez realizada la discretización y el desarrollo algebraico de la matriz:

$$\begin{aligned} \phi_{A,j} + \frac{i\delta t}{2\hbar} (V_j \phi_{A,j} + (k_{\alpha-,j} + k_{\beta-,j}) \phi_{B,j} - \\ i\hbar v_F \frac{\phi_{B,j+1} - \phi_{B,j-1}}{2\delta x}) = 2\psi_{A,j} \end{aligned} \quad (19)$$

$$\begin{aligned} \phi_{B,j} + \frac{i\delta t}{2\hbar} (V_j \phi_{B,j} + (k_{\alpha+,j} + k_{\beta+,j}) \phi_{A,j} - \\ i\hbar v_F \frac{\phi_{A,j+1} - \phi_{A,j-1}}{2\delta x}) = 2\psi_{B,j} \end{aligned} \quad (20)$$

Si sumamos las ecuaciones ec.(19) y ec.(20):

$$2 \begin{pmatrix} \psi_{A,1} + \psi_{B,1} \\ \psi_{A,2} + \psi_{B,2} \\ \vdots \\ \psi_{A,J} + \psi_{B,J} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} N & Q & 0 & \dots & \dots & \dots & 0 \\ -Q & N & Q & 0 & \dots & \dots & 0 \\ 0 & -Q & N & Q & 0 & \dots & 0 \\ \vdots & 0 & -Q & N & Q & \ddots & 0 \\ \vdots & \vdots & 0 & -Q & N & \ddots & 0 \\ \vdots & \vdots & \vdots & \ddots & \ddots & \ddots & Q \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & -Q & N \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \phi_{A,1} \\ \phi_{A,2} \\ \vdots \\ \phi_{A,J} \end{pmatrix} \quad (21)$$

$$+ \begin{pmatrix} M & Q & 0 & \dots & \dots & \dots & 0 \\ -Q & M & Q & 0 & \dots & \dots & 0 \\ 0 & -Q & M & Q & 0 & \dots & 0 \\ \vdots & 0 & -Q & M & Q & \ddots & 0 \\ \vdots & \vdots & 0 & -Q & M & \ddots & 0 \\ \vdots & \vdots & \vdots & \ddots & \ddots & \ddots & Q \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & -Q & M \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \phi_{B,1} \\ \phi_{B,2} \\ \vdots \\ \phi_{B,J} \end{pmatrix} \quad (22)$$

donde $N = 1 + \frac{i\delta t}{2\hbar} (V_j + (k_{\alpha+,j} + k_{\beta+,j}))$, $Q = \frac{i\hbar v_F}{2\delta x}$ y $M = 1 + \frac{i\delta t}{2\hbar} (V_j + (k_{\alpha-,j} + k_{\beta-,j}))$.

Como se puede ver, el tamaño de la matriz depende del tamaño de nuestro sistema. Si se escoge $\delta x = 1\text{\AA}$ entonces un pozo cuántico de 1200\AA generará una matriz de 1200×1200 .

Repetimos el procedimiento anterior pero ahora restando las ecuaciones ec.(19) y ec.(20)

Viendo estas matrices podemos redefinirlas como dos ecuaciones matriciales sencillas $2\psi_+ = \mathbb{N}\phi_A + \mathbb{M}\phi_B$ y $2\psi_- = \mathbb{L}\phi_A + \mathbb{P}\phi_B$. Estas ecuaciones se pueden tratar como un sistema de ecuaciones matriciales que se resuelven así:

$$\begin{aligned} \phi_A &= (2\mathbb{N}^{-1})\psi_+ - (\mathbb{N}^{-1}\mathbb{M})\phi_B \\ \phi_B &= 2(-\mathbb{L}\mathbb{N}^{-1}\mathbb{M} + \mathbb{P})^{-1}(\psi_- - \mathbb{L}\mathbb{N}^{-1}\psi_+) \end{aligned} \quad (23)$$

Una vez que contamos con el sistema de ecuaciones discretizado, se puede calcular la evolución temporal con:

$$\Psi_j^n + 1 = \Phi_j^n - \Psi_j^n \quad (24)$$

Repetiendo el proceso para cada n hasta llegar a N .

E. Probability Current Density

Una vez que se cuenta con la evolución temporal, podemos calcular su coeficiente de transmisión a partir del cálculo de la corriente de densidad de probabilidad (PCD). Para encontrar esta corriente, partimos desde la siguiente ecuación de continuidad:

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} + \nabla \cdot \vec{j} = 0 \quad (25)$$

Aplicando el traspuesto conjugado a la ecuación de Schrödinger dependiente del tiempo(7), y multiplicando por la derecha por Ψ ; lo podemos incorporar la ecuación de la densidad de probabilidad(11). Al mismo tiempo se considera el Hamiltoniano del grafeno(1), el cual sabemos que es hermitiano ya que se compone de las matrices de Pauli. De esta forma podemos construir la siguiente ecuación:

$$\frac{\partial}{\partial t} \int \rho d\vec{r} = -v_f \int (\Psi \vec{\sigma} \cdot \nabla \Psi^{T*} + \Psi^{T*} \vec{\sigma} \cdot \nabla \Psi) d\vec{r} \quad (26)$$

Podemos reescribir la ecuación factorizando ∇ y quitando la integral de ambos lados:

$$\frac{\partial}{\partial t} \rho = -v_f \nabla \cdot (\Psi^\dagger \vec{\sigma} \Psi) \quad (27)$$

Sustituyendo en la ecuación de continuidad de la densidad de probabilidad ec.(25):

$$\nabla \cdot \vec{j} = v_f \nabla \cdot (\Psi^\dagger \vec{\sigma} \Psi) \quad (28)$$

Eliminando ∇ de ambos lados:

$$\vec{j} = v_f \Psi^\dagger \vec{\sigma} \Psi \quad (29)$$

De esta forma, hemos obtenido la densidad de corriente de probabilidad en grafeno.

Si queremos obtener las componentes de la densidad de corriente, podemos hacerlo de la siguiente forma:

$$\vec{j} = v_f \begin{pmatrix} \Psi^\dagger \sigma_x \Psi \\ \Psi^\dagger \sigma_y \Psi \end{pmatrix} = v_f \begin{pmatrix} \Psi_A^\dagger \Psi_B + \Psi_B^\dagger \Psi_A \\ i(-\Psi_A^\dagger \Psi_B + \Psi_B^\dagger \Psi_A) \end{pmatrix} \quad (30)$$

To determine the numerical value of \vec{j} , we identify the peaks in the probability density plots. Subsequently, we calculate the minima of the Gaussian curves to find the apparent width of the GWP. Finally, we locate two precise moments: immediately before the wave packet interacts with the potential barrier and the exact moment it has traversed the barrier.

Con los tiempos definidos de entrada (t_1) y de salida (t_2), usamos la ecuación ec.(30) para todo el espacio en cada uno de los tiempos.

Con esto podemos ahora sí calcular el coeficiente de transmisión:

$$T = \left| \frac{\vec{j}_{out} \cdot \hat{n}}{\vec{j}_{in} \cdot \hat{n}} \right|, \quad (31)$$

en este contexto, se realiza el cociente entre la corriente transmitida y la corriente incidente, considerando el producto con el vector normal a la barrera. En el caso unidimensional aquí abordado, dicho vector puede representarse como (1, 0) o (0, 1), dependiendo de si el paquete de onda gaussiano (GWP) se propaga a lo largo del eje x o del eje y , respectivamente.

III. DISCUSSION OF RESULTS

A continuación se muestran las figuras obtenidas con el procedimiento obtenido anteriormente.

En las imágenes podemos notar ciertos aspectos interesantes, empezando con la fig.1. Esta figura muestra una caída del coeficiente de transmisión conforme la intensidad de la barrera de potencial aumenta. Este resultado muestra una contradicción con lo que ya se especifica en la literatura, en el grafeno se esperaría observar una transmisión total debido a las mismas propiedades del material[11, 12].

Por otro lado, tenemos la transmisión bajo presencia de SOIR. Es evidente que se forma una correlación: a mayor altura de la barrera de potencial y mayor el número de onda inicial del paquete de ondas, entonces menor será la transmisión. Sin embargo, el comportamiento interesante aquí es que conforme el valor de k_0 sea mayor, y V_b sea menor; entonces se obtiene una transmisión más cercana a 1.

The observed behavior might be the result of one or more of the following aspects:

- Wave Packet Characteristics: Not a single momentum eigenstate.
- Quantum interference effects[13]
- Weak localization: (might be only when having SOIR)

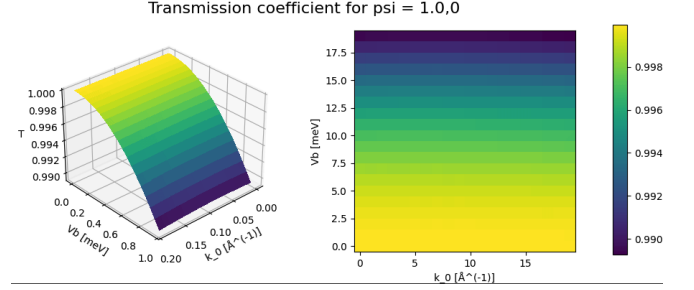


FIG. 1: Transmisión en grafeno prístino. En el eje vertical vemos el coeficiente de transmisión, y en el plano está la intensidad de la barrera de potencial en meV contra el número de onda inicial \AA^{-1} . Podemos ver que el coeficiente de transmisión se mantiene constante a lo largo de los diferentes valores de k , sin embargo, conforme la barrera de potencial aumenta, el coeficiente de transmisión disminuye. Desde 1 hasta 0.990.

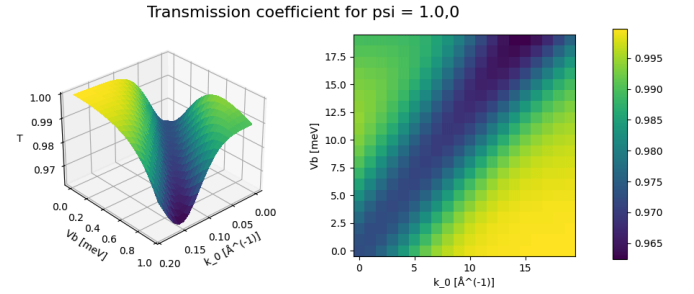


FIG. 2: Transmisión considerando SOIR en la zona de la barrera de potencial. En este caso se observa que el coeficiente de transmisión varía drásticamente formando un patrón similar a una hoja semi-doblada. En el mapa de colores se observa claramente una tendencia.

IV. CONCLUSIONS

ACKNOWLEDGMENTS

- [1] W. E. Liu, E. M. Hankiewicz, and D. Culcer, *Materials* **10**, 7 (2017).
- [2] A. Avsar, J. Y. Tan, T. Taychatanapat, J. Balakrishnan, G. K. W. Koon, Y. Yeo, J. Lahiri, A. Carvalho, A. S. Rodin, E. C. T. O'Farrell, G. Eda, A. H. C. Neto, and B. Özyilmaz, *Nat. Commun.* **5**, 4875 (2014).
- [3] Z. Wang, D.-K. Ki, J. Y. Khoo, D. Mauro, H. Berger,

L. S. Levitov, and A. F. Morpurgo, *Phys. Rev. X* **6**, 041020 (2016).

- [4] H. Liu, H. Wang, Z. Peng, J. Jin, Z. Wang, K. Peng, W. Wang, Y. Xu, Y. Wang, Z. Wei, D. Zhang, Y. J. Li, W. Chu, and L. Sun, *Nanoscale Horiz.* **8**, 1235 (2023).
- [5] Y.-T. Yao, S.-Y. Xu, and T.-R. Chang, *Mater. Horiz.* **11**, 3420 (2024).

- [6] A. K. Geim and K. S. Novoselov, *Nature Mater.* **6**, 183 (2007).
- [7] R. Cuan and L. Diago-Cisneros, *Rev. Cub. Fís.* **27**, 212 (2010).
- [8] E. Serna, I. R. Vargas, R. Pérez-Álvarez, and L. Diago-Cisneros, *J. Appl. Phys.* **125**, 203902 (2019).
- [9] A. W. López, Acoplamiento espín-Órbita en heteroestructuras semiconductoras (2005).
- [10] A. Carrillo and O. Mendoza, *Geofísica UNAM* (2015).
- [11] D. W. Horsell, F. V. Tikhonenko, R. V. Gorbachev, and A. K. Savchenko, *Phil. Trans. R. Soc. A* **366**, 245 (2008).
- [12] A. F. Young and P. Kim, *Nature Phys* **5**, 222 (2009).
- [13] A. Molgado, O. Morales, and J. A. Vallejo, *Rev. Mex. Fis. E* **64**, 1 (2018).