

Quantum Dispersion in Mono-layer Graphene using Wave Packets and Rashba Spin-Orbit Interaction

Eduardo Serna*

Centro de Investigación en Ciencias, Universidad Autónoma del Estado de Morelos, Morelos, 62209, México

I. Rodríguez Vargas[†]

Unidad Académica de Física, Universidad Autónoma de Zacatecas, Zacatecas, 98060, México

L. Diago-Cisneros[‡]

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

(Dated: March 21, 2025)

This paper presents a theoretical and computational study on the impact of Rashba spin-orbit interaction (SOIR) on electron transmission through a potential barrier in monolayer graphene. The energy dispersion relations were numerically obtained via the finite differences method applied to the Schrödinger equation, using a model Hamiltonian incorporating graphene, SOIR, and a potential barrier. Our findings reveal that the presence of SOIR significantly modifies the electron transmission coefficients compared with pristine graphene conditions. While electron transmission in pristine graphene remains near unity with minor reductions due to quantum interference effects in a Gaussian wave packet, introducing SOIR leads to intricate transmission patterns dependent on the barrier parameters and wave packet characteristics. These effects arise from phenomena such as spin degeneracy lifting and spin-dependent scattering mechanisms. The results emphasize the critical role that SOIR plays in engineering sophisticated quantum devices, offering potential applications in spintronic technologies and quantum computing.

I. INTRODUCTION

La dispersión cuántica en grafeno, entendida como la relación entre niveles de energía y sus respectivos vectores de onda, es esencial para explicar las sobresalientes propiedades electrónicas y de transporte observadas en este material bidimensional único. Su estructura de red hexagonal genera fermiones de Dirac sin masa, lo que origina particulares fenómenos cuánticos como movilidad extremadamente alta, transporte balístico en escalas micrométricas, y ausencia intrínseca de banda prohibida[1]. Dentro de estos fenómenos, resulta especialmente interesante estudiar el papel de la SOIR, que puede modificar significativamente el comportamiento electrónico y conducir a efectos novedosos de interferencia y dispersión relacionados con el espín electrónico.

La comprensión precisa de estas interacciones es crítica no solamente desde la perspectiva teórica, sino que además representa la base fundamental para aplicaciones tecnológicas emergentes en áreas estratégicas tales como la spintrónica y la computación cuántica[2–4]. En este contexto, la ecuación de Schrödinger provee el marco fundamental para analizar el transporte electrónico, siendo particularmente idónea su solución numérica mediante métodos robustos como la técnica de diferencias finitas (FDM). Consecuentemente, el objetivo central de este trabajo es calcular detalladamente las relaciones de dispersión

energética para electrones en grafeno monocapa bajo interacción SOIR utilizando paquetes de onda gaussianos, destacando cómo estos efectos cuánticos pueden ser explotados para la ingeniería avanzada de dispositivos nanotecnológicos especializados en aplicaciones spintrónicas y de información cuántica.

Finalmente, cabe destacar que uno de los aspectos esenciales abordados en este trabajo radica en la formulación analítica precisa del vector corriente, cuya expresión analítica es dada por la ecuación(35). Esta expresión representa un pilar fundamental para comprender detalladamente los efectos y mecanismos subyacentes en los fenómenos de transporte electrónico en presencia de SOIR. Por ello, la obtención y análisis de dicha ecuación constituye una aportación significativa al campo, especialmente en aplicaciones relacionadas con dispositivos spintrónicos y tecnologías cuánticas emergentes.

A. Klein Paradox

Applying an electrostatic potential to graphene can create regions where electrons are classically forbidden due to energy constraints[5]. For instance, a negative gate voltage can shift the Fermi level into the valence band, establishing a potential barrier that electrons do not have sufficient energy to overcome, according to classical physics[6]. However, in graphene, electron transmission through such barriers can exhibit unusual behavior due to the Klein paradox.

The Klein paradox describes the phenomenon where electrons in graphene can tunnel through electrostatic potential barriers with a probability approaching unity,

* sernaed95@gmail.com

† isaac@fisica.uaz.edu.mx

‡ ldiago@fisica.uh.cu

even at perpendicular incidence, seemingly defying the principles of classical mechanics[7]. This counterintuitive transmission arises from the relativistic nature of electrons in graphene, where, within the barrier region, incident electrons can be converted into holes, allowing for unimpeded passage[8]. The Klein paradox is a direct consequence of graphene's unique linear dispersion relation and the associated massless Dirac fermion behavior. While this perfect transmission through barriers might pose challenges for achieving electron confinement in some device designs, it also presents opportunities for developing novel tunneling-based electronic devices. Beyond simply creating a forbidden region, the application of electrostatic potential can dramatically alter electron transmission through various other mechanisms, influencing the refractive index and leading to phenomena like electron lensing[9].

B. Rashba-Type Spin-Orbit Interaction

SOIR is a relativistic effect that arises in systems lacking structural inversion symmetry[10]. La SOIR es especialmente relevante debido a su capacidad para modificar significativamente la estructura electrónica del grafeno, induciendo acoplamientos particulares entre el espín y el momento de los electrones. Esto lleva a exhibir fenómenos emergentes tales como la interferencia cuántica dependiente del espín y efectos de dispersión no convencionales. El impacto de la SOIR no solo aporta nuevas perspectivas en física fundamental, sino que también abre posibilidades prometedoras para aplicaciones avanzadas en tecnologías spintrónicas y dispositivos basados en información cuántica.

In graphene, SOIR can be induced by an external electric field applied perpendicular to the graphene plane or through proximity to a substrate[11]. A key consequence of SOIR is the breaking of spin degeneracy, where the energy levels of electrons with opposite spins are no longer the same, even in the absence of an external magnetic field[12]. Controlling spin degeneracy through electric fields via SOIR is particularly valuable for spintronic applications. It enables electron spin manipulation without depending on magnetic fields, which typically require more power and are challenging to incorporate effectively into nanoscale systems.

Furthermore, SOIR modifies the effective mass of charge carriers in graphene[13]. It can lead to the opening of an energy gap at the Dirac points, effectively giving the otherwise massless Dirac fermions a finite mass. In systems with strong spin-orbit coupling, such as certain heavy-hole systems, specific types of SOIR (like k^3 -Rashba spin-orbit coupling) can even result in anisotropic band structures and the emergence of additional spin-degeneracy points under light illumination. While this specific example refers to heavy holes, the principle that SOIR can significantly alter the band structure and effective mass of carriers is relevant to graphene, particularly when con-

sidering proximity-induced effects from substrates with strong spin-orbit coupling[14]. The modification of the effective mass by SOIR can profoundly impact graphene's transport properties, influencing carrier mobility and the density of states. Notably, tuning the strength of SOIR in graphene can even induce a transition from the Klein tunneling regime (perfect transmission) to the anti-Klein tunneling regime (perfect reflection) when electrons encounter a potential barrier. This ability to control the transmission probability through potential barriers using SOIR opens up exciting possibilities for creating novel electronic devices that leverage this fundamental quantum mechanical phenomenon[15].

En la próxima sección, se describirá detalladamente el modelo físico-matemático adoptado en este estudio. Partiendo de la base conceptual presentada anteriormente sobre la dispersión cuántica y la interacción espín-órbita tipo Rashba, se definirá el sistema y las ecuaciones correspondientes que permiten simular numéricamente los fenómenos observados en nuestros resultados.

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. We also added a rectangular electrostatic potential barrier, where we incorporate the SOIR. The system is more deeply explained in our previous article[1]

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[16]:

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

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[1, 17, 18], 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.

Para poder calcular los valores de las constantes de acoplamiento α y β , nos basamos en las ecuaciones propuestas por Wong y Mireles[19]:

$$\alpha = \frac{eE_b P^2}{3E_i(E_i + E_g)} \quad (5)$$

$$\beta = -\frac{eE_b P^2 (2E_i + E_g)}{3E_i(E_i + E_g)^2 k_c^2} \quad (6)$$

$$E_i = \frac{2P^2 k_c^2}{3E_g} \quad (7)$$

$$\frac{2P^2}{m_0 E_g} = \frac{m_0}{m^*} - 1 \quad (8)$$

$$E_b = \frac{V_b}{el} \quad (9)$$

donde e es la carga de los huecos pesados en la zona de la barrera de potencial, P es el momentum de los portadores de carga, E_g es la energía del “band gap”, k_c es un número de onda crítico que cumple la condición $k \ll k_c$, m_0 es la masa del electrón libre, m^* la masa de los portadores de carga en la zona de la barrera de potencial, V_b es la altura de la barrera y l es el ancho de la barrera.

Tomando como base datos experimentales previos ([20–22]) definimos a manera de prueba $E_g = 0.03$ eV y $m^* = 0.47m_0$; mientras que definimos un valor para el número de onda crítico $k_c = 0.2 \text{ \AA}^{-1}$ que coincide con los valores obtenidos experimentalmente.

Si sustituimos estos valores numéricos podemos usar (8) para obtener $P^2 = 1.54 \times 10^{-32} \text{ kg}\cdot\text{eV}$; y, por lo tanto, $E_i = 1.37 \times 10^{-32}$.

Finalmente, el ancho y la altura de la barrera los definimos tomando como base diferentes modelos físicos ya presentados en la literatura.

Usando estos resultados numéricos podemos encontrar α y β . Por ejemplo, si $l = 100 \text{ \AA}$ y $V_b = 0.5 \text{ eV}$, entonces $\alpha = 0.25 \text{ eV}\cdot\text{\AA}$ y $\beta = -1.56 \text{ eV}\cdot\text{\AA}$.

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:

$$\hat{H}_V = I_2 V(x) \quad (10)$$

Adding up the graphene(3), the SOIR(4), and the potential barrier(10) Hamiltonians, while also zeroing the parameters in the y direction, we get:

$$\hat{H} = \begin{pmatrix} V(x) & (k_{\alpha-} + k_{\beta-}) - i\hbar v_F \frac{\partial}{\partial x} \\ (k_{\alpha+} + k_{\beta+}) - i\hbar v_F \frac{\partial}{\partial x} & V(x) \end{pmatrix}. \quad (11)$$

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:

$$i\hbar \frac{d}{dt} \Psi(x, t) = \hat{H} \Psi(x, t) \quad (12)$$

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:

$$\psi_j(x, t_0) = \frac{\xi_j}{\sqrt[4]{\pi\sigma^2}} e^{-\frac{(x-x_0)^2}{2\sigma^2}} e^{ixk_0} \quad (13)$$

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:

$$\xi = \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix}, \begin{pmatrix} 1 \\ 1 \end{pmatrix}, \begin{pmatrix} 1 \\ i \end{pmatrix}, \begin{pmatrix} 1 \\ e^{i\pi/4} \end{pmatrix}. \quad (14)$$

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

$$\Psi(x, 0) = \frac{1}{\sqrt{\xi_A^2 + \xi_B^2}} \begin{pmatrix} \psi_A \\ \psi_B \end{pmatrix} \quad (15)$$

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

$$\rho(x, t) = |\Psi|^2 = |\psi_A|^2 + |\psi_B|^2 \quad (16)$$

D. Temporal Evolution Operator

Para resolver la ecuación de Schrödinger(12) se propone el uso de un operador de evolución temporal(TEO), a partir de la siguiente ecuación:

$$\Psi(x, t) = \hat{U}(t, t_0) \Psi(x, t_0) \quad (17)$$

Podemos ver que al aplicar el operador, obtenemos un tiempo t para un tiempo t_0 . Si se sustituye la ecuación del TEO(17) en la ecuación de Schrödinger(12), 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.(17) como:

$$\Psi(x, t) = e^{-\frac{i\delta t}{\hbar} \hat{H}} \Psi(x, t_0) \quad (18)$$

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:

$$e^{-\frac{i\delta t}{\hbar} \hat{H}} = \frac{2}{\mathbf{I} + \frac{i\delta t}{2\hbar} \hat{H}} - bnI \quad (19)$$

Haciendo uso de un cambio de variable podemos reescribir la ecuación anterior(19) como:

$$\Phi(x, t_0) + \frac{i\delta t}{2\hbar} \hat{H} \Phi(x, t_0) = 2\Psi(x, t_0) \quad (20)$$

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(20) 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[23]:

$$\delta t \leq \frac{(\delta x)^2}{2} \quad (21)$$

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

$$\begin{aligned} f(x_j + \delta x) &= f(x_j) + (x_j + \delta x - x_j) f'(x_j) \\ &= f(x_j) + \delta x f'(x_j), \\ f(x_j - \delta x) &= f(x_j) + (x_j - \delta x - x_j) f'(x_j) \\ &= f(x_j) - \delta x f'(x_j), \end{aligned} \quad (22)$$

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

$$f'(x_j) = \frac{f(x_j + \delta x) - f(x_j - \delta x)}{2\delta x} = \frac{f_{j+1} - f_{j-1}}{2\delta x} \quad (23)$$

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

$$\begin{aligned} \phi_{A,j} + \frac{i\delta t}{2\hbar} (V_j \phi_{A,j} + (k_{\alpha-,j} + k_{\beta-,j}) \phi_{B,j} - \\ i\hbar v_F \frac{\phi_{B,j+1} - \phi_{B,j-1}}{2\delta x}) = 2\psi_{A,j} \end{aligned} \quad (24)$$

$$\begin{aligned} \phi_{B,j} + \frac{i\delta t}{2\hbar} (V_j \phi_{B,j} + (k_{\alpha+,j} + k_{\beta+,j}) \phi_{A,j} - \\ i\hbar v_F \frac{\phi_{A,j+1} - \phi_{A,j-1}}{2\delta x}) = 2\psi_{B,j} \end{aligned} \quad (25)$$

Si sumamos las ecuaciones ec.(24) y ec.(25):

$$2 \begin{pmatrix} \psi_{A,1} + \psi_{B,1} \\ \psi_{A,2} + \psi_{B,2} \\ \vdots \\ \psi_{A,J} + \psi_{B,J} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} N & Q & 0 & \dots & \dots & \dots & 0 \\ -Q & N & Q & 0 & \dots & \dots & 0 \\ 0 & -Q & N & Q & 0 & \dots & 0 \\ \vdots & 0 & -Q & N & Q & \ddots & 0 \\ \vdots & \vdots & 0 & -Q & N & \ddots & 0 \\ \vdots & \vdots & \vdots & \ddots & \ddots & \ddots & Q \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & -Q & N \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \phi_{A,1} \\ \phi_{A,2} \\ \vdots \\ \phi_{A,J} \end{pmatrix} \quad (26)$$

$$+ \begin{pmatrix} M & Q & 0 & \dots & \dots & \dots & 0 \\ -Q & M & Q & 0 & \dots & \dots & 0 \\ 0 & -Q & M & Q & 0 & \dots & 0 \\ \vdots & 0 & -Q & M & Q & \ddots & 0 \\ \vdots & \vdots & 0 & -Q & M & \ddots & 0 \\ \vdots & \vdots & \vdots & \ddots & \ddots & \ddots & Q \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & -Q & M \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \phi_{B,1} \\ \phi_{B,2} \\ \vdots \\ \phi_{B,J} \end{pmatrix} \quad (27)$$

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.(24) y ec.(25)

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:

$$\begin{aligned} \phi_A &= (2\mathbb{N}^{-1})\psi_+ - (\mathbb{N}^{-1}\mathbb{M})\phi_B \\ \phi_B &= 2(-\mathbb{L}\mathbb{N}^{-1}\mathbb{M} + \mathbb{P})^{-1}(\psi_- - \mathbb{L}\mathbb{N}^{-1}\psi_+) \end{aligned} \quad (28)$$

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

$$\Psi_j^n + 1 = \Phi_j^n - \Psi_j^n \quad (29)$$

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:

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} + \nabla \cdot \vec{j} = 0 \quad (30)$$

Aplicando el traspuesto conjugado a la ecuación de Schrödinger dependiente del tiempo(12), y multiplicando por la derecha por Ψ ; lo podemos incorporar la ecuación de la densidad de probabilidad(16). 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:

$$\frac{\partial}{\partial t} \int \rho d\vec{r} = -v_f \int (\Psi \vec{\sigma} \cdot \nabla \Psi^{T*} + \Psi^{T*} \vec{\sigma} \cdot \nabla \Psi) d\vec{r} \quad (31)$$

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

$$\frac{\partial}{\partial t} \rho = -v_f \nabla \cdot (\Psi^\dagger \vec{\sigma} \Psi) \quad (32)$$

Sustituyendo en la ecuación de continuidad de la densidad de probabilidad ec.(30):

$$\nabla \cdot \vec{j} = v_f \nabla \cdot (\Psi^\dagger \vec{\sigma} \Psi) \quad (33)$$

Eliminando ∇ de ambos lados:

$$\vec{j} = v_f \Psi^\dagger \vec{\sigma} \Psi \quad (34)$$

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:

$$\vec{j} = v_f \begin{pmatrix} \Psi^\dagger \sigma_x \Psi \\ \Psi^\dagger \sigma_y \Psi \end{pmatrix} = v_f \begin{pmatrix} \Psi_A^\dagger \Psi_B + \Psi_B^\dagger \Psi_A \\ i(-\Psi_A^\dagger \Psi_B + \Psi_B^\dagger \Psi_A) \end{pmatrix} \quad (35)$$

La importancia de la expresión del vector corriente, mostrada explícitamente en la ecuación(35), radica en la comprensión detallada del comportamiento de pseudospines del grafeno. La caracterización clara de ambas componentes del vector corriente resulta central para interpretar los resultados numéricos y entender la fenomenología asociada al transporte en estas estructuras.

A manera de comprobación, si consideramos una función de onda plana incidente, podemos expresarla como:

$$\Psi(\vec{r}) = \frac{e^{i\vec{k}\cdot\vec{r}}}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} 1 \\ e^{i\theta} \end{pmatrix}, \quad (36)$$

donde θ es el ángulo de incidencia respecto a la dirección normal a la barrera y $\vec{k} = k(\cos\theta, \sin\theta)$ es el vector de onda.

Si sustituimos la ec.(36) en la ec.(35) podemos simplemente realizar la multiplicación de la siguiente forma para obtener la densidad de corriente de probabilidad incidente a la barrera sobre el eje X ($j_{x,in}$):

$$\begin{aligned} j_{x,in} &= v_f \frac{1}{2} \begin{pmatrix} e^{-i\theta} & 1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 1 \\ e^{i\theta} \end{pmatrix} \\ &= v_f \left(\frac{e^{-i\theta} + e^{i\theta}}{2} \right) \\ &= v_f \cos\theta \end{aligned} \quad (37)$$

Esta simplificación es lo que se usa habitualmente en la literatura[24, 25].

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.(35) para todo el espacio en cada uno de los tiempos.

Con esto podemos ahora sí calcular el coeficiente de transmisión:

$$T = \left| \frac{\vec{j}_{out} \cdot \hat{n}}{\vec{j}_{in} \cdot \hat{n}} \right|, \quad (38)$$

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.

Una vez presentado el marco conceptual y las ecuaciones fundamentales del sistema estudiado, procedemos a continuación con el análisis y discusión crítica de los

resultados obtenidos mediante las simulaciones numéricas. Esta sección nos permitirá evaluar y contrastar detalladamente la influencia del término Rashba sobre la transmisión cuántica en grafeno monocapa.

III. DISCUSSION OF RESULTS

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

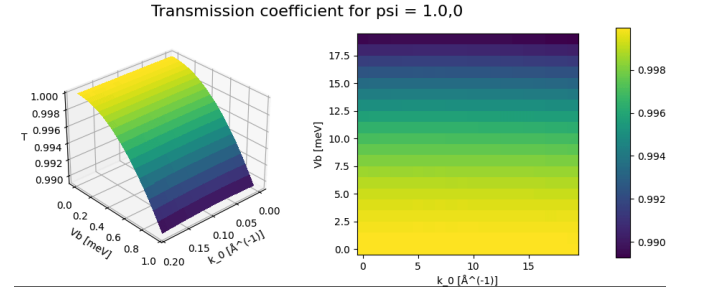


FIG. 1. figure

Transmission coefficient (T) in pristine graphene with initial pseudospin configuration $\xi = (1, 0)$, plotted against potential barrier height (V_b , in meV) and initial wave vector (k_0 , in \AA^{-1}). The 3D plot and 2D heatmap show that transmission is largely independent of the initial wave vector but decreases noticeably as the barrier height increases, ranging from 1 to approximately 0.990.

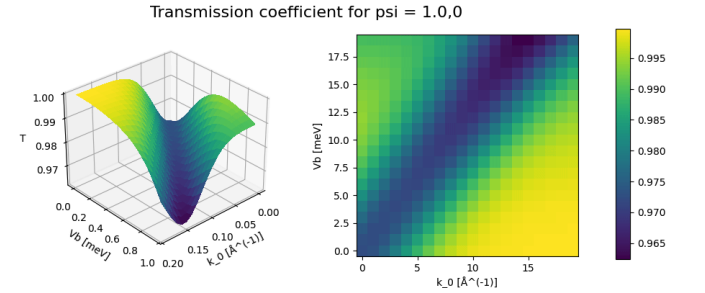


FIG. 2. figure

Coefficiente de transmisión (T) en función de la altura de la barrera de potencial (V_b) y el número de onda inicial (k_0) con una configuración inicial de pseudospin $\xi = (1, 0)$. La superficie 3D y el mapa de color 2D muestran una dependencia no monótona de T con respecto a V_b y k_0 , destacando la influencia del acoplamiento espín-órbita en la transmisión a través de la barrera.

En las imágenes podemos notar ciertos aspectos interesantes, empezando con la fig.1. La imagen presenta dos gráficos que ilustran el coeficiente de transmisión (T) en función de V_b (en meV) y k_0 (en \AA^{-1}) para un valor fijo de $\xi = (1, 0)$. El gráfico de la izquierda es una visualización tridimensional donde T está en el eje z , V_b en el eje x y k_0 en el eje y , con una escala de colores que varía desde morado oscuro (menor T) hasta amarillo brillante (mayor T). El gráfico de la derecha es un mapa de calor bidimensional que ofrece una vista superior, con el eje x

representando k_0 y el eje y representando Vb , usando el mismo mapa de colores que el gráfico 3D. Ambos gráficos muestran que el coeficiente de transmisión generalmente se mantiene muy cerca de 1, indicando una alta transmisión. Conforme aumenta Vb , T tiende a disminuir, mientras que la dependencia respecto a k_0 es mínima. En general, los gráficos demuestran cómo cambia T con variaciones en Vb y k_0 , destacando una leve disminución de T al aumentar Vb y un cambio insignificante respecto a k_0 .

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[26, 27].

Estas diferencias observadas pueden atribuirse principalmente a los siguientes aspectos relacionados con nuestro método y condiciones de simulación:

- **Wave Packet Characteristics:** Nuestra simulación utiliza un paquete de onda (GWP) compuesto por múltiples autoestados de momentum en lugar de considerar un único estado propio. Esta elección implica contribuciones simultáneas de varios estados, que potencialmente generan interferencias cuánticas afectando ligeramente el coeficiente de transmisión[28]. Este punto, resaltado por nuestra modelación dinámica en tiempo, marca una diferencia significativa respecto a los modelos teóricos ideales donde dichas interferencias no aparecen.

Además, nuestra simulación contempla explícitamente la variable tiempo, algo poco frecuente en estudios teóricos previos ideales y estáticos. Investigar cómo estos aspectos dinámicos, como el tiempo de fase o el tiempo de túnel, afectan específicamente la transmisión observada es un objetivo importante propuesto para trabajos posteriores.

- **Efectos de interferencia cuántica por dispersión del paquete en el tiempo:** Como ha sido sugerido por la literatura[29], al evolucionar temporalmente un paquete de onda gaussiano suficientemente ancho, este se dispersa espacialmente de tal forma que diferentes partes del mismo interactúan simultáneamente con la barrera, causando interferencias internas consigo mismas. Tal interferencia es una posible causa adicional de las fluctuaciones en la transmisión observada en nuestros resultados numéricos.

Estos puntos explican las diferencias encontradas claramente desde una perspectiva metodológica y vinculan nuestros resultados numéricos respecto a la predicción teórica mencionada en los estudios previos. Esto no solo aclara la aparente contradicción, sino que también permite reforzar claramente el vínculo entre nuestros resultados específicos y el objetivo principal de analizar efectos dinámicos y propiedades que surgen al emplear paquetes de onda Gaussianos en simulaciones de tunneling cuántico en sistemas basados en grafeno.

Por otro lado, tenemos la transmisión bajo presencia de SOIR (Fig.2).

Se observa una correlación entre las variables: generalmente, a mayor altura de la barrera de potencial (Vb) y mayor número de onda inicial (k_0), se espera una menor transmisión. Sin embargo, la interacción espín-órbita introduce un comportamiento más complejo. A medida que k_0 aumenta y Vb disminuye, la transmisión se acerca a 1, indicando una mayor probabilidad de tunelamiento cuántico debido a la SOIR.

Aunque la variación en el coeficiente de transmisión es pequeña (del orden de 10^{-2}), es significativa y atribuible a la interacción SOIR. Los electrones, con sus diferentes componentes de pseudospín, interactúan, y esta interacción se ve afectada por el número de onda inicial del paquete de ondas gaussiano (GWP), como se observó en estudios previos[1]. Por lo tanto, la SOIR modula la interacción, lo que a su vez causa las fluctuaciones observadas en el coeficiente de transmisión.

Es importante destacar aquí que la obtención analítica del vector corriente (ec. 35) ha sido determinante para interpretar los resultados obtenidos numéricamente. En particular, esta ecuación permite vincular explícitamente diferencias observadas en los coeficientes de transmisión con los componentes pseudospinoriales y sus correlaciones cruzadas debido a la interacción Rashba. Por lo tanto, este resultado no solo brinda claridad conceptual, sino que también sienta las bases para futuras investigaciones teóricas y experimentales sobre transporte spintrónico avanzado en grafeno.

Tras analizar exhaustivamente los resultados numéricos y discutir los aspectos particulares observados en los coeficientes de transmisión electrónica con y sin interacción Rashba, podemos sintetizar a continuación las principales conclusiones alcanzadas en este trabajo, resaltando sus implicaciones teóricas y tecnológicas, así como las perspectivas para futuros estudios y aplicaciones.

IV. CONCLUSIONS

En este trabajo exploramos el efecto de la interacción espín-órbita tipo Rashba (SOIR) sobre la transmisión electrónica a través de una barrera potencial en grafeno monocapa mediante simulaciones numéricas del tipo paquetes de onda gaussianos basadas en diferencias finitas (FDM). Los resultados obtenidos revelaron cómo la presencia del término Rashba introduce modificaciones sustanciales y complejas en los coeficientes de transmisión respecto al comportamiento sencillo observado en grafeno prístino. Dichas variaciones tienen origen en mecanismos de dispersión dependientes del espín, como levantamiento de la degeneración de espín e interferencias cuánticas derivadas de las múltiples componentes de los paquetes de onda usados en nuestras simulaciones.

En relación con las cuestiones planteadas inicialmente en este estudio, logramos demostrar que las interacciones SOIR sí modifican significativamente las características de

transmisión, respondiendo así afirmativamente a nuestras interrogantes iniciales. Además, aclaramos que pequeñas desviaciones observadas en grafeno prístino respecto a la transmisión teórica unitaria son consecuencia directa de la naturaleza de los paquetes gaussianos empleados, enfatizando la importancia de considerar estos efectos en simulaciones y aplicaciones prácticas.

En conjunto, nuestros hallazgos destacan claramente que un conocimiento detallado de la SOIR proporciona capacidad predictiva y herramientas esenciales para la ingeniería de dispositivos espintrónicos y plataformas aplicables a la computación cuántica. Por tanto, este estudio reafirma firmemente la relevancia de estos fenómenos cuánticos fundamentales en escenarios tecnológicos actuales y futuros.

-
- [1] E. Serna, I. R. Vargas, R. Pérez-Álvarez, and L. D. Cisneros, J. Appl. Phys. **125**, 203902 (2019).
 - [2] W. E. Liu, E. M. Hankiewicz, and D. Culcer, Materials **10**, 7 (2017).
 - [3] 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).
 - [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] E. B. Sonin, Phys. Rev. B **79**, 19 (2009).
 - [6] L. Dell'Anna, P. Majari, and M. R. Setare, J. Phys.: Condens. Matter **30**, 415301 (2018).
 - [7] B. Trauzettel, D. V. Bulaev, D. Loss, and G. Burkard, Nat. Phys. **3**, 192 (2007).
 - [8] A. E. Bernardini, J. Phys. A: Math. Theor. **43**, 489801 (2010).
 - [9] E. Paredes-Rocha, Y. Betancur-Ocampo, N. Szpak, and T. Stegmann, Phys. Rev. B **103**, 045404 (2021).
 - [10] Y. Avishai and Y. B. Band, Phys. Rev. B **104**, 075414 (2021).
 - [11] D. Shcherbakov, P. Stepanov, and et. al., Sci. Adv. **7**, 5 (2021).
 - [12] F. Delkhosh and A. Phirouznia, Physica E **66**, 252 (2015).
 - [13] 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).
 - [14] Y. Gindikin and A. Kamenev, Phys. Rev. B **111**, 035104 (2025).
 - [15] Y.-T. Yao, S.-Y. Xu, and T.-R. Chang, Mater. Horiz. **11**, 3420 (2024).
 - [16] A. K. Geim and K. S. Novoselov, Nature Mater. **6**, 183 (2007).
 - [17] R. Cuan and L. Diago-Cisneros, Rev. Cub. Fís. **27**, 212 (2010).
 - [18] R. Cuan and L. Diago-Cisneros, EPL **110**, 67001 (2015).
 - [19] A. W. López, *Acoplamiento Espín-Órbita en Heteroestructuras Semiconductoras*, Master's thesis, Universidad Nacional Autónoma de México (2005).
 - [20] B. Hunt, J. Sanchez-Yamagishi, A. Young, M. Yankowitz, B. LeRoy, K. Watanabe, T. Taniguchi, P. Moon, M. Koshino, P. Jarillo-Herrero, and R. Ashoor, Science **340**, 1427 (2013).
 - [21] M. S. Fuhrer, Science **340**, 1413 (2013).
 - [22] P. Palla, G. R. Uppu, A. S. Ethiraj, and J. P. Raina, Bull. Mater. Sci. **39**, 1441 (2016).
 - [23] A. Carrillo and O. Mendoza, Geofísica UNAM (2015).
 - [24] D. Dahal and G. Gumbs, J. Phys. Chem. Solids **100**, 83 (2017).
 - [25] Z. Wu, K. Chang, J. T. Liu, X. J. Li, and K. S. Chan, J. Appl. Phys. **105**, 043702 (2009).
 - [26] D. W. Horsell, F. V. Tikhonenko, R. V. Gorbachev, and A. K. Savchenko, Phil. Trans. R. Soc. A **366**, 245 (2008).
 - [27] A. F. Young and P. Kim, Nature Phys **5**, 222 (2009).
 - [28] M. Staelens and F. Marsiglio, Am. J. Phys. **89**, 693 (2021).
 - [29] A. Molgado, O. Morales, and J. A. Vallejo, Rev. Mex. Fis. E **64**, 1 (2018).