

Modelos matemáticos para la descripción de patrones de Moiré en redes de Bravais



UNIVERSIDAD DE MEDELLIN

Trabajo de grado para optar al título de Magister en
Modelación y Ciencia Computacional

Presentado por:

MARÍA CRISTINA OSPINA MEDINA

Dirigida por:

FRANCISCO CARO LOPERA

JULIÁN DAVID CORREA ABAD

UNIVERSIDAD DE MEDELLIN

FACULTAD DE CIENCIAS BÁSICAS

Medellín, 2017

Índice general

Resumen	9
1. Introducción	13
1.1. Red Bravais	16
1.1.1. Redes de Bravais Bidimensionales	18
1.1.2. Redes de Bravais Tridimensionales	19
1.2. Celdas primitivas de bicapas rotadas	22
1.3. Teoría de Formas	23
2. Patrones de Moiré en redes de Bravais	27
2.1. Definición de Conmensurabilidad	27
2.2. Red Cuadrada Bravais-Moiré	30
2.2.1. Número de puntos en la súper celda cuadrada.	42
2.2.2. Pentagrafeno como un ejemplo de rotaciones conmen- surables en redes de Bravais cuadradas	46
2.3. Red hexagonal Bravais-Moiré	51
2.3.1. Número de puntos en la súper celda hexagonal.	63
2.4. Red Bravais-Moiré cuadrada centrada	68
2.4.1. Número de puntos en la celda súper cuadrada centrada.	74
2.4.2. Conclusiones.	79

3. Teoría de Formas para obtener celdas cuasicomensurables	81
3.1. Introducción a la Teoría de Formas	81
3.1.1. Definiciones	82
3.2. Patrones de Moiré entre dos Capas de Grafeno: Caso no con- mensurable	85
3.2.1. Metodología	87
3.2.2. Resultados	90
3.2.3. Conclusiones	95
Perspectiva	99

Índice de figuras

1.1. Redes Bravais bidimensional (1) Red Oblicua - (2) Red Rectangular (3) Red Centrada Rectangular (4) Red Hexagonal (5) Red Cuadrada	18
1.2. Red Bravais tridimensional - P: Primitiva centrada C: Centrada en una sola cara I: Centrada en el cuerpo F: Centrada en las caras (1) Cúbica P (2) Cúbica I (3) Cúbica F (4) Tetragonal P (5) Tetragonal I (6) Ortorrómbica P (7) Ortorrómbica C (8) Ortorrómbica I (9) Ortorrómbica F (10) Monoclinica P (11) Monoclinica C (12) Triclinica (13) Romboedral (14) Hexagonal	20
2.1. Red B_{norot} para $r, s = -3, -2, \dots, 2, 3$, vectores primitivos $\mathbf{u}_1, \mathbf{u}_2$ y el centro $\mathbf{c}_{r,s} = r\mathbf{u}_1 + s\mathbf{u}_2$, para $r = 2, s = 1$	31
2.2. Patrones cuadrados Bravais-Moiré de rotación conmensurable asociados al par (2, 1).	34
2.3. Patrones cuadrados Bravais-Moiré de rotación conmensurable asociados al par (3, 2).	35
2.4. Patrones cuadrados Bravais-Moiré de rotación conmensurable asociados al par (3, 1).	36
2.5. Patrones cuadrados Bravais-Moiré de rotación conmensurable asociados al par (4, 3).	37
2.6. Patrones cuadrados Bravais-Moiré de rotación conmensurable asociados al par (4, 2).	38

2.7. Octantes 1, 3, 5, 7 como dominios de los vértices primitivos de los patrones súper cuadrados Bravais-Moiré, para $r = 2, 3, \dots, 9$ y $s = 1, 2, \dots, 8$	40
2.8. Súper celda primitiva cuadrada tipo I, que contiene puntos internos. Ejemplo para pares (r, s) : (3, 1), (5, 3), (5, 1), (7, 5), (7, 3), (7, 1).	44
2.9. Súper celda primitiva cuadrada tipo II, que contiene dos puntos adicionales en los lados p_1p_2 y p_1p_4 . Ejemplo para pares (r, s) : (2, 1), (3, 2), (4, 3), (4, 1), (5, 4), (5, 2), (6, 5), (6, 1), (7, 4), (7, 2).	45
2.10. Celda unitaria de pentagrafeno, vista frontal y vista lateral.	47
2.11. Bicapa de pentagrafeno rotada un ángulo $\theta = 36,9^\circ$, (a) sistema completo, (b) capa inferior y (c) capa superior. Se consideran cuatro imagenes de la celda unitaria para observar la periodicidad.	48
2.12. Bicapas de pentagrafeno rotadas para diferentes ángulos (a) $\theta = 53,1^\circ$, (b) $\theta = 22,6^\circ$, (c) $\theta = 61,9^\circ$, (d) $\theta = 16,3^\circ$, (e) $\theta = 67,4^\circ$ y (d) $\theta = 46,4^\circ$. En cada caso se consideran cuatro imágenes de la celda unitaria para observar la periodicidad.	50
2.13. Redes B_{norot} y C_{norot} para $r, s = -4, -3, \dots, 3, 4$, vectores primitivos $\mathbf{u}_1, \mathbf{u}_2$ y el centro $\mathbf{c}_{r,s} = r\mathbf{u}_1 + s\mathbf{u}_2$, for $r = 5, s = 1$	53
2.14. Patrones hexagonales Bravais-Moiré de rotaciones conmensurables asociadas a los pares $(r = 5, s = 1)$ o $(x = 2, y = 1)$	56
2.15. Patrones hexagonales Bravais-Moiré de rotaciones conmensurables asociadas a los pares $(r = 8, s = 2)$ o $(x = 3, y = 2)$	57
2.16. Patrones hexagonales Bravais-Moiré de rotaciones conmensurables asociadas a los pares $(r = 7, s = 1)$ o $(x = 3, y = 1)$	58
2.17. Patrones hexagonales Bravais-Moiré de rotaciones conmensurables asociadas a los pares $(r = 11, s = 3)$ o $(x = 4, y = 3)$	59
2.18. Patrones hexagonales Bravais-Moiré de rotaciones conmensurables asociadas a los pares $(r = 10, s = 2)$ o $(x = 4, y = 2)$	60
2.19. 12-antes 1, 3, 5, 7, 11 como dominios de los vértices primitivos de los patrones Bravais Moiré del súper hexágono, para $x = 2, 3, \dots, 7$ y $y = 1, 2, \dots, 6$ con centros indexados por $r = 2x + y$ y $s = y$	62

ÍNDICE DE FIGURAS

2.20. Súper celda primitiva hexagonal tipo I, conteniendo solo puntos internos. Ejemplo para los pares $(r = 2x + y, s = y)$, $(5, 1)$, $(8, 2)$, $(7, 1)$, $(11, 3)$, $(14, 4)$, $(13, 3)$, $(19, 5)$, $(17, 3)$, $(16, 2)$	65
2.21. Súper celda primitiva hexagonal tipo II, conteniendo seis puntos de trisección adiconales en los lados p_1p_2 , p_2p_3 y p_3p_4 . Ejemplo para los pares $(r = 2x + y, s = y)$ $(9, 1)$, $(12, 2)$, $(18, 4)$, $(15, 1)$. 66	66
2.22. Red B_{norot} para $r, s = -4, -3, \dots, 3, 4$, vectores primitivos $\mathbf{u}_1, \mathbf{u}_2$ y el centro $\mathbf{c}_{r,s} = r\mathbf{u}_1 + s\mathbf{u}_2$, for $r = 2, s = 1$	69
2.23. Patrones Bravais-Moiré cuadrados centrados de rotación conmensurable asociados con los pares $(2, 1)$	72
2.24. Patrones Bravais-Moiré cuadrados centrados de rotación conmensurable asociados con los pares $(3, 2)$	73
2.25. Patrones Bravais-Moiré cuadrados centrados de rotación conmensurable asociados con los pares $(3, 1)$	74
2.26. Patrones Bravais-Moiré cuadrados centrados de rotación conmensurable asociados con los pares $(4, 3)$	75
2.27. Patrones Bravais-Moiré cuadrados centrados de rotación conmensurable asociados con los pares $(4, 2)$	76
2.28. Octantes 1, 3, 5, 7 como dominio de los vértices primitivos de los patrones Bravais Moiré del súper cuadrado centrado, para $r = 2, 3, \dots, 9$ y $s = 1, 2, \dots, 8$	77
2.29. Súper celda primitiva cuadrada centrada. Ejemplo para coprimos en el dominio $r = 2, 3, \dots, 7$ y $s = 1, \dots, 6$	78
3.1. Distancias de Riemman calculadas en ángulos conmensurables (0.380 rad y 0.230 rad) para calcular la supercelda - distancias en cero implican periodicidad	92
3.2. Distancias de Riemman en ángulos no conmensurables (0.368 rad, 0.355 rad y 0.343 rad)	93
3.3. Distancias de Riemman en ángulos no conmensurables (0.330 rad, 0.318 rad y 0.305 rad)	94
3.4. Distancias de Riemman en ángulos no conmensurables (0.292 rad, 0.280 rad y 0.268 rad)	95
3.5. Distancias de Riemman en ángulos no conmensurables (0.255 rad y 0.242 rad)	96
3.6. Patrones de Moiré - Ángulos no conmensurables entre dos conmensurables	97

3.7. Patrones de Moiré - Ángulos no commensurables entre dos commensurables 98

Índice de tablas

2.1.	Primeros pares de coprimos r y s para los vértices primitivos de los patrones Bravais-Moiré súper cuadrados y ángulo conmensurable.	39
2.2.	Número de puntos de la súper celda cuadrada Bravais-Moiré, para los primeros pares de coprimos r y s , $s > 0, r > 1, r > s$.	46
2.3.	Principales parámetros para bicapas de pentagrafeno rotadas.	49
2.4.	Primeros pares de coprimos r y s para los vértices primitivos del súper hexágono Bravais Moiréy ángulo conmensurable ($0^\circ < \theta < 60^\circ$)	61
2.5.	Número de puntos de la súper celda hexagonal Bravais-Moiré, para los primeros pares de coprimos x y y , $y \geq 1, x \geq 2$ y $x > y$, con $r = 2x + y, s = y$	67
2.6.	Número de puntos de la súper celda cuadrada Bravais-Moiré, para los primeros pares de coprimos r y s , $s > 0, r > 1, r > s$.	79
3.1.	Distancias Procrustes en el espacio de formas	85
3.2.	Ángulos no conmensurables entre dos ángulos conmensurables y distancia en número de hexagonos.	91

Resumen

En las dos últimas décadas las propiedades físico-químicas de materiales bidimensionales han sido ampliamente estudiadas debido a las múltiples posibilidades que presentan para el desarrollo de dispositivos opto-electrónicos.

Estas propiedades pueden ser modificadas dopando, induciendo defectos o generando diferentes tipos de apilamiento con monocapas bidimensionales. En el caso de los apilamientos, sus propiedades pueden ser controladas a través del ángulo de rotación entre las capas.

Dado que los diferentes ángulos de rotación entre las capas de materiales bidimensionales apilados pueden originar diversas propiedades físico-químicas, el interés de este trabajo es desarrollar modelos matemáticos para la representación de celdas para sistemas de bicapas bidimensionales rotadas entre si. Estas rotaciones dan origen a patrones geométricos denominados patrones de Moiré, que a su vez se manifiestan en cambios de las propiedades

opto-electrónicas del sistema. Por ejemplo, en el caso de dos capas de grafeno rotadas entre sí, en su espectro de absorción se observan transiciones ópticas en el visible, las cuales no son observadas en una mono capa o en una bicapa sin rotar.

Para estudiar estos apilamientos, es necesario determinar sus celdas unitarias, que son la mínima unidad geométrica requerida para replicar el material. Estas celdas se pueden calcular por medio de la solución de ecuaciones diofánticas, por simetrías, reflexiones o ternas pitagóricas, determinando las celdas unitarias para ciertos ángulos denominados ángulos conmensurables. También se requiere conocer el número de puntos o de átomos en esta celda y de esta manera calcular las propiedades físico químicas de estos apilamientos haciendo uso de modelos físicos como tight binding o cálculo de primeros principios. En este sentido se tiene una limitante computacional en cuánto al número de puntos o átomos contenidos en la celda unitaria; se ofrece entonces una solución para esta limitante, tal que es emplear la teoría de formas, haciendo uso del concepto de distancia para determinar nuevas familias de ángulos de rotación que sean posibles de estudiar a través de celdas unitarias cuasiconmensurables.

Por lo anterior, en este trabajo se encuentran las celdas unitarias usando métodos analíticos de solución como ecuaciones diofánticas, reflexión, simetrías y ternas pitagóricas, para celdas de Bravais bidimensionales, cuadrada, hexagonal y cuadrada centrada. Adicionalmente, se aplica la teoría de formas para el caso de la celda triangular con una base de dos puntos por

punto de red.

Los resultados obtenidos muestran que el cálculo de las celdas primitivas, sus vectores y número de puntos, además de obtener el ángulo conmensurable por medio de la solución de las ecuaciones diofánticas, ternas pitagóricas, reflexión o simetrías, es posible encontrar expresiones analíticas para ángulos conmensurables para las celdas mencionadas, lo cual permite obtener rotaciones conmensurables independiente de la estructura atómica. Por otro lado, de la teoría de formas es posible obtener nuevas familias de ángulos que presentan una cuasiconmensurabilidad, permitiendo de esta forma aplicar modelos de enlace fuerte o incluso cálculos de primeros principios para estudiar las propiedades físico químicas de bicapas rotadas para ángulos no conmensurables.

CAPÍTULO 1

Introducción

Desde la síntesis del grafeno en 2004 por Novoseloc y otros [1], la fabricación de materiales bidimensionales (2D) ha tenido un gran auge [2]. Esto debido a sus múltiples propiedades y la necesidad de obtener nuevos materiales que permitan el desarrollo de dispositivos opto-electrónicos, más económicos, eficientes y amigables con el medio ambiente.

De los diferentes materiales bidimensionales se destaca el grafeno, ya que puede ser obtenido fácilmente por medio de exfoliación mecánica del grafito [3] y sus propiedades físico-químicas pueden ser controladas de diversas formas; una de estas es a través del apilamiento de múltiples capas y por medio de la rotación en diferentes ángulos de éstas capas.

Por si solo el grafeno posee excelentes propiedades como conductor, es altamente flexible, resistente y ligero; por otro lado es transparente a la

radiación visible, lo cual lo transforma en un excelente candidato para el desarrollo de dispositivos opto-electrónicos, con aplicaciones como: sensores, celdas solares, baterías y pantallas flexibles.

En los últimos años, las propiedades físicas de bicapas de grafeno han sido ampliamente estudiadas. Pilkyiung Moon y Mikito Koshino [4] estudiaron teóricamente las propiedades ópticas del grafeno rotado con varios apilamientos geométricos y demostraron que las características espectroscópicas sirven como una huella dactilar para identificar el ángulo de rotación entre dos capas. Adicionalmente, encontraron que el espectro de rotación casi evoluciona continuamente en el cambio del ángulo de rotación, independientemente de la conmensurabilidad de la red. Por otro lado, calcularon la absorción óptica en dos diferentes marcos, el modelo de enlace fuerte y el modelo continuo basado en la ecuación de Dirac. Para ángulos de rotación menores que 10° , el modelo efectivo que mejor reproduce la más baja energía en la estructura de bandas y la conductividad óptica es el modelo de enlace fuerte y también explica la regla de selección óptica analíticamente en términos de la simetría efectiva del Hamiltoniano. En otro trabajo, Mikito Koshino [5] presenta una formulación teórica general para describir la interacción entre capas en sistemas bicapa inconmensurables con estructuras cristalinas arbitrarias, mediante el uso de una descripción genérica del modelo de enlace fuerte. En este trabajo se muestra que el acoplamiento entre capas, que es muy complejo en el espacio real, se puede simplemente escribir en términos de procesos generalizados en el espacio recíproco. Esta formulación, es útil para describir la interacción en

la interfaz de dos dimensiones de diferentes materiales con estructuras de red arbitrarias y orientaciones relativas. Aplicando este método para una bicapa de grafeno inconmensurable con un ángulo de rotación grande, que no puede ser tratado como un patrón de Moiré se pueden obtener las cuasi estructuras de bandas y las densidades de estados dentro de una aproximación de primer orden[5].

A pesar de que estos modelos simplificados son de alta utilidad para describir el comportamiento cualitativo de diferentes apilamientos, estos son difíciles de aplicar en el caso de sistemas bidimensionales más generales como óxidos o capas formadas por moléculas u otros materiales 2D que se combinan entre si e interactúan a través de fuerzas de van der Waal[6, 7]. En la mayoría de casos una buena forma de estudiar este tipo de estructuras híbridas es por medio de cálculos de primeros principios, basados en la teoría del funcional densidad (DFT). Para un sistema periódico, DFT requiere como insumo una celda mínima que pueda ser replicada en el espacio para obtener el cristal infinito. En el caso de bicapas híbridas (compuestas por dos materiales diferentes) en la mayoría de casos las constantes de red no coinciden, lo cual obliga a encontrar una celda lo más aproximada posible a una celda conmensurable. Este problema se puede complicar aun más cuando se desea que las dos capas tengan un ángulo de rotación entre si, lo cual puede dar origen a nuevas propiedades físicas y abrir las puertas de la denominada twistrónica [8], que es la manipulación de las propiedades electrónicas en sistemas de múltiples capas 2D a través del ángulo entre ellas. Para abordar el estudio

de las propiedades físicas de sistemas rotados en los casos en los cuales ha sido posible la solución de las ecuaciones diofánticas, se ha encontrado que existen un conjunto de ángulos conmensurables que pueden ser obtenidos analíticamente. [9, 10, 11]

En general estas celdas conmensurables han sido ampliamente usadas para el caso de bicapas rotadas de grafeno o materiales 2D que presenten redes triangulares [12, 13, 14, 15]. Sin embargo, existen otros tipos de materiales cuyas redes no son triangulares y también se pueden apilar verticalmente, por lo cual pueden presentar ángulos de rotación entre las capas. Algunos ejemplos de estos materiales, pueden ser nuevos alotrópos del carbón como el pentagrafeno [16, 17] o algunas de las fases del fosforeno [18]. Debido a esto, en este trabajo se aborda el problema de obtener expresiones analíticas para los ángulos conmensurables de redes de Bravais, cuadradas, triangulares y hexagonales. Puesto que no sólo es de interés el estudio de los ángulos conmensurables, para tratar el caso de los ángulos no conmensurables se emplea la Teoría de Formas, en especial la aplicamos al cálculo de ángulos no conmensurables en el caso de una bicapa de grafeno.

1.1. Red Bravais

Un concepto importante en la descripción de cualquier sólido cristalino es el de red de Bravais, que especifica cómo las unidades básicas que lo componen (átomos, grupos de átomos o moléculas) se repiten periódicamente a lo largo

CAPÍTULO 1. INTRODUCCIÓN

del cristal. Una red de Bravais es un conjunto formado por todos los puntos cuyo vector de posición es de la forma

$$R = n_1 a_1 + n_2 a_2 + n_3 a_3$$

donde a_1 , a_2 y a_3 son tres vectores, linealmente independientes, y n_1 , n_2 y n_3 son números enteros. Así, el punto $\sum n_i a_i$ se alcanza moviendo n_i pasos de longitud en la dirección de a_i para $i = 1, 2$ y 3 .

Los vectores a_i se conocen como vectores primitivos de la red de Bravais y se evidencia que al trasladar una red Bravais según el vector de la forma R coincide consigo misma. La invariancia traslacional de la red de Bravais constituye su característica más importante.

Se llama celda primitiva unidad de una red de Bravais, a un volumen del espacio tal que trasladado mediante todos los vectores de dicha red, llena todo el espacio sin dejar vacíos ni superponerse. Esta condición implica que una celda primitiva unidad contiene únicamente un punto de la red. Sin embargo existe un número infinito de celdas primitivas, todas ellas con el mismo volumen.

Existe una única red de Bravais unidimensional, 5 redes bidimensionales y 14 modelos distintos de redes tridimensionales. La red unidimensional es elemental, es simplemente una secuencia de nodos equidistantes entre sí. Para las redes en dos o tres dimensiones se necesita generar una celda primitiva o unitaria, que son paralelogramos (2D) o paralelepípedos (3D) que son la menor subdivisión de una red cristalina que conserva las características generales de

toda la red, así que por traslación de la misma, es posible construirse la red completa en cualquier punto. Las celdas unitarias pueden ser definidas a partir de dos vectores (2D) o tres vectores (3D).

1.1.1. Redes de Bravais Bidimensionales

Las redes de Bravais bidimensionales son:

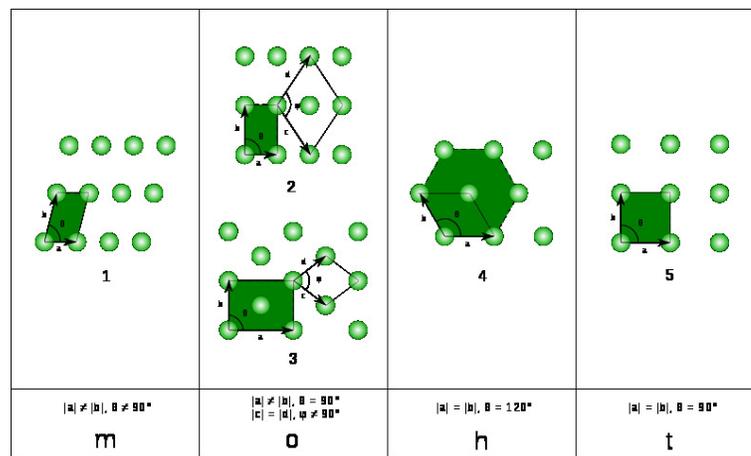


Figura 1.1: Redes Bravais bidimensional (1) Red Oblicua - (2) Red Rectangular (3) Red Centrada Rectangular (4) Red Hexagonal (5) Red Cuadrada

- Red oblicua: tiene una base en la que el módulo de los dos vectores es distinto. Además, el ángulo φ que forman no es de 90° .
- Red cuadrada: el módulo de ambos vectores debe ser el mismo y el ángulo que forman debe ser recto, es decir 90° . Éste es el tipo de red más sencillo.

- Red hexagonal: tiene una estructura de hexágonos, por eso no se tiene un ángulo recto sino que el ángulo entre los vectores de la base es de 120° . Los módulos de ambos vectores deben ser iguales.
- Red rectangular: se define como una modificación de la red cúbica. En lugar de tener los módulos de los dos vectores iguales, son diferentes. En cuanto al ángulo, éste sigue siendo de 90° .
- Red rectangular centrada: es igual a la red rectangular, con los módulos de los vectores diferentes y un ángulo de 90° ; cuenta con un punto extra en el centro del rectángulo. Se puede ver también como una red hexagonal con los módulos de los vectores distintos.

1.1.2. Redes de Bravais Tridimensionales

En este tipo de redes el número de ellas se incrementa hasta 14, repartidas en 7 tipos diferentes de estructuras cristalinas.

El sistema cúbico posee tres redes diferentes. Una de ellas es la red cúbica simple; esta conformada por un cubo con átomos en sus vértices. La otra es la red cúbica centrada en el cuerpo que difiere de la anterior porque tiene un átomo más en el centro. Por último, está la red cúbica centrada en las caras, cuya característica es que hay un átomo adicional sobre las caras.

Existen más tipos de redes como el diamante o la hexagonal compacta HCP o Hexagonal Close Packet.

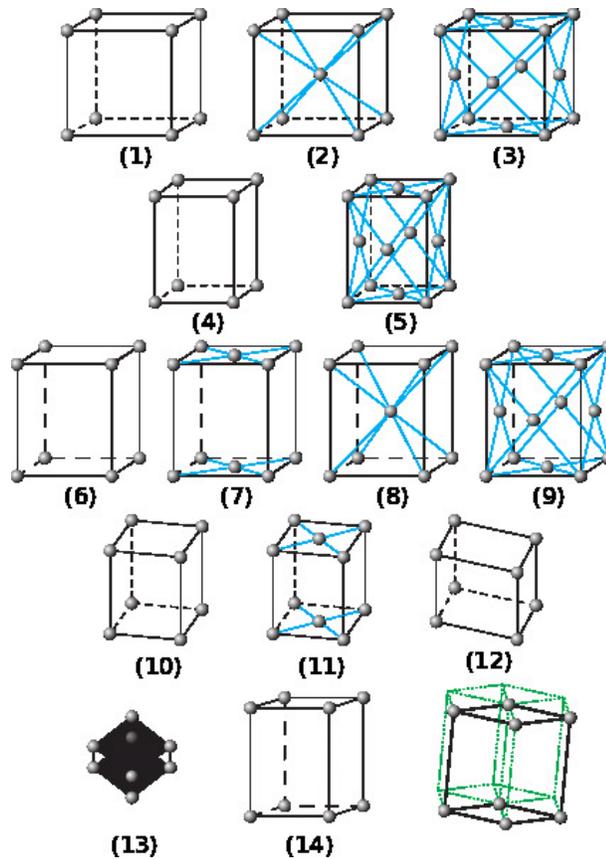


Figura 1.2: Red Bravais tridimensional - P: Primitiva centrada C: Centrada en una sola cara I: Centrada en el cuerpo F: Centrada en las caras (1) Cúbica P (2) Cúbica I (3) Cúbica F (4) Tetragonal P (5) Tetragonal I (6) Ortorrómbica P (7) Ortorrómbica C (8) Ortorrómbica I (9) Ortorrómbica F (10) Monoclinica P (11) Monoclinica C (12) Triclinica (13) Romboedra (14) Hexagonal

Se enumeran a continuación los 7 sistemas cristalinos y las redes de Bravais en el sistema que pertenece cada uno:

- Sistema Cristalino Cúbico: en este sistema llamado también isométrico, los tres ejes cristalográficos son todos de igual longitud y cortan a los

CAPÍTULO 1. INTRODUCCIÓN

ángulos rectos (90°). Las redes de Bravais de estos sistemas son: red cúbica primitiva o simple, red cúbica centrada en el cuerpo y red cúbica centrada en las caras.

- Sistema Cristalino Hexagonal: se caracteriza por tener 4 ejes. Tres ejes de igual longitud se encuentran en un plano y se cruzan en un ángulo de 120° (entre los extremos positivos). El cuarto eje (c) es más largo o corto que los otros tres y forma con ellos ángulos rectos. Existe una red de Bravais de este sistema denominada la red hexagonal primitiva o simple.
- Sistema Cristalino Trigonal: los ángulos entre los ejes del cristal, en el sistema trigonal o romboédrico, son idénticos, pero diferentes de 90° , y las tres dimensiones del cristal unitario son idénticas. Las redes de Bravais para estos sistemas son: red romboédrica primitiva o simple y red hexagonal R centrada.
- Sistema Cristalino Tetragonal: en este sistema dos ejes son iguales y uno diferente (más corto o más largo) pero todos ellos son perpendiculares entre sí. Las redes de Bravais para estos sistemas son: red Tetragonal primitiva o simple y red Tetragonal centrada en el interior.
- Sistema Cristalino Rómbico: en el sistema rómbico (u ortorrómbico) los ejes de referencia son desiguales y perpendiculares entre sí. Las redes de Bravais para este sistema son la red Rómbica primitiva o simple,

la red Rómbica centrada en las bases, la red Rómbica centrada en el interior y la red Rómbica centrada en las caras.

- Sistema Cristalino Monoclínico: en el sistema monoclínico dos de tres ejes de referencia desiguales se cortan oblicuamente (no de 90°) y el tercero es perpendicular al plano de otros dos. Las redes de Bravais de este sistema son la red Monoclínica primitiva o simple y la red Monoclínica centrada en las bases.
- Sistema Cristalino Triclínico: en el sistema Triclínico los tres ejes cristalográficos son todos desiguales en la longitud y se cortan a tres ángulos diferentes (cualquier ángulo pero diferentes de 90°). La red de Bravais para este tipo de sistema es la red triclínica primitiva o simple.

1.2. Celdas primitivas de bicapas rotadas

Las celda primitiva son un insumo necesario para calcular las propiedades físico químicas de un sistema bicapa rotado. Para el caso de ángulos conmensurables, se requiere derivar la forma general de estos. Para celdas de Bravais bidimensionales en el capítulo dos de este trabajo se propone una metodología general para redes Bravais cuadradas, cuadradas centradas y hexagonales, que nos permite encontrar los vectores y el ángulo conmensurable. Para desarrollar esta metodología se hace uso de métodos de cálculo como: ecuaciones diofánticas, simetrías, ternas pitagóricas y reflexión.

De ésta manera se encuentran celdas unitarias de sistemas planos de bicapas de dos redes de puntos rotadas entre si, y se demostrará que es posible encontrar una solución analítica que determine: el ángulo de rotación, el número de puntos en la celda y los vectores de esta. Estas soluciones analíticas quedan determinadas únicamente por un par de números coprimos y por la base de la celda unitaria escogida, la cual puede ser escalada para obtener de esta forma una solución general.

Dadas algunas dificultades para calcular las propiedades físico químicas del sistema bidimensional rotado, referentes al número de puntos en la celda y la de conocer las propiedades físico-químicas de sistemas no commensurables, se hace necesario proporcionar un método alternativo que calcule los vectores y ángulos, que ya no cumplen con la condición de commensurabilidad, el cuál hace uso de la teoría de formas, que se describe a continuación.

1.3. Teoría de Formas

En cuanto a la Teoría de Formas se puede decir que el análisis estadístico de la forma se ha desplegado en una serie de aplicaciones en casi todas las ciencias naturales y exactas, en la visión artificial y análisis de imágenes. En general, la Teoría de Formas ofrece soluciones para problemas en la diferenciación de objetos, mediante el resumen de puntos anatómicos o matemáticos llamados (landmarks), o puntos de referencia, bajo el supuesto de que esos puntos se pueden colocar (en presencia de aleatoriedad) en objetos similares,

y absorben toda la información geométrica de la forma del elemento.

La Teoría de Formas entra en el análisis, cuando comparaciones, ruido y/o inferencia se realizan en espacios especiales, entonces, de acuerdo a las simetrías que participan en el estudio, determinado y supervisado por el experto en el experimento, se pueden definir un número de diferentes formas. Hay tres clásicas bien estudiadas en la literatura, la euclidiana, la configuración y la forma proyectiva. La forma asociada es toda la información geométrica que permanece bajo la eliminación de la traslación, la rotación, la escala y la reflexión. Véase, por ejemplo [19] y las referencias en él.

Bajo supuestos deterministas, la Teoría de Formas, cuenta con un número de enfoques; una fuente de sus principales aspectos se dan por ejemplo en [20]. Como consecuencia del entendimiento geométrico de la forma, la Teoría Procrustes incluye análisis proyectivo de la forma y su relación con el análisis de la forma afín y ello se ha estudiado profusamente en las aplicaciones. Algunos trabajos en esta dirección se deben a [21, 22], entre muchos otros.

Debido a la importancia de la geometría de las celdas de sistemas multicapas planas, en este trabajo se pretende aplicar la Teoría de Formas para encontrar celdas para ángulos no conmensurables, logrando diseñar celdas unitarias, que posibilitan barridos completos entre ángulos conmensurables, lo que permite observar la transición entre los patrones geométricos y evaluar el comportamiento de fenómenos físicos de la estructura.

La literatura publicada no evidencia una conexión entre otras aproximaciones geométricas y la obtención de ángulos no conmensurables para iden-

CAPÍTULO 1. INTRODUCCIÓN

tificar el cambio de las propiedades físicas del sistema cuando se pasa de un sistema conocido (conmensurable) a uno no conocido (inconmensurable), es decir, como se conocen las propiedades físicas en ángulos conmensurables, es de interés mirar las transiciones en ángulos no conmensurables. Para ello se hace necesario el uso de otras teorías que muestren la cuasi periodicidad necesaria para realizar los análisis tradicionales realizados con ángulos conmensurables y medir allí las propiedades físicas.

CAPÍTULO 2

Patrones de Moiré en redes de Bravais

En este capítulo se deriva la forma general de los ángulos conmensurables para celdas de Bravais cuadradas, cuadrada centrada y hexagonales. Para ello se utilizan métodos de cálculo como ecuaciones diofánticas, simetrías, ternas pitagóricas y reflexión. También se encuentra el número de puntos o átomos en la celda unitaria y los respectivos vectores de red para los casos mencionados. A manera de aplicación, se encuentran los vectores, ángulos y número de átomos para el estudio de bicapas de pentagrafeno rotadas entre sí.

2.1. Definición de Conmensurabilidad

2.1.1 Ángulo conmensurable Dadas dos láttices de Bravais B_{rot} y B_{norot} , inicialmente coincidentes. Una rotación θ de B_{rot} , respecto a B_{norot} que se

2.1. DEFINICIÓN DE COMMENSURABILIDAD

utiliza como sistema de referencia, se dice commensurable si el vector posición $\mathbf{c}_{r',s'}$, asociado a un par de enteros r' y s' de B_{norot} coincide con el vector posición $\mathbf{c}_{r,s}$, de un par de enteros r y s de B_{rot} .

En términos de ecuaciones diofánticas, θ es commensurable si es solución de

$$\mathbf{c}_{r,s} = \mathbf{R}(\theta)\mathbf{c}_{r',s'}, \quad (2.1)$$

donde $\mathbf{c}_{r,s} = r\mathbf{u}_1 + s\mathbf{u}_2$, $\mathbf{c}_{r',s'} = r'\mathbf{u}_1 + s'\mathbf{u}_2$, $r, s, r', s' \in \mathbb{Z}$, $\mathbf{R}(\theta) = \begin{pmatrix} \cos(\theta) & -\sin(\theta) \\ \sin(\theta) & \cos(\theta) \end{pmatrix}$

y $\mathbf{u}_i = \begin{pmatrix} u_{i1} \\ u_{i2} \end{pmatrix}$, $i = 1, 2$ representan la base de la red. Sea $\mathbf{T} = \begin{pmatrix} u_{11} & u_{21} \\ u_{12} & u_{22} \end{pmatrix}$

la matriz de cambio de base a coordenadas cartesianas, entonces (2.1) se puede escribir como:

$$\begin{pmatrix} r \\ s \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} -\frac{(u_{12}u_{22} + u_{11}u_{21})\sin(\theta) + (u_{12}u_{21} - u_{11}u_{22})\cos(\theta)}{u_{11}u_{22} - u_{12}u_{21}} & -\frac{(u_{22}^2 + u_{21}^2)\sin(\theta)}{u_{11}u_{22} - u_{12}u_{21}} \\ \frac{(u_{12}^2 + u_{11}^2)\sin(\theta)}{u_{11}u_{22} - u_{12}u_{21}} & \frac{(u_{12}u_{22} + u_{11}u_{21})\sin(\theta) + (u_{11}u_{22} - u_{12}u_{21})\cos(\theta)}{u_{11}u_{22} - u_{12}u_{21}} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} r' \\ s' \end{pmatrix} \quad (2.2)$$

Es decir la commensurabilidad está restringida a un mapeo de un par de enteros (r', s') en otro par de enteros (r, s) . Una condición necesaria y suficiente para tal mapeo, es que la matriz en (2.2) asuma sólo valores racionales [23].

De la superposición de los dos latices bajo commensurabilidad, resultan

patrones periódicos que llamaremos de Bravais-Moiré. Esos patrones se pueden agrupar por súper celdas que reproducen todo el sistema. Los vectores que definen esas súper celdas se obtienen tradicionalmente una vez se ha calculado el ángulo conmensurable. Por ello la literatura ha puesto todo el esfuerzo en la solución de las ecuaciones diofánticas que definen el ángulo conmensurable, para después obtener la súper celda que replica la red.

El sistema de ecuaciones diofánticas (2.2) puede establecerse como general para cualquier sistema de dos redes de Bravais, aunque la literatura sólo ha estudiado el Bravais hexagonal. Lamentablemente, existen múltiples inconsistencias en los resultados publicados. El primer artículo que estudió consistentemente la solución de las ecuaciones 2.2 fue publicado en 2008 por Schallcross y otro [10], tomando $(u_{11} = \sqrt{3}, u_{12} = 0, u_{21} = \sqrt{3}/2, u_{22} = 3/2)$ y resolviendo por inspección las ecuaciones, luego ellos mismo ampliaron y corrigieron los resultados [11] y posteriormente publicaron un erratum a dicho artículo[24].

Esta metodología de solución del problema hexagonal, partiendo del ángulo resuelto por inspección para llegar a los vectores de la súper celda periódica fue la motivación para establecer una teoría consistente a todos los Bravais-Moiré, explotando la simetría olvidada en los trabajos anteriores e invirtiendo el proceso, definiendo primero de manera exhaustiva la súper celda periódica, y de tal construcción inferir fácilmente el ángulo, aspecto que no requiere la solución de ecuaciones diofánticas. Este nuevo método también encontró y resolvió otras inconsistencias como el número de puntos en la súper celda

hexagonal, por ejemplo.

De otro lado, cuando la teoría matemática de Bravais-Moiré aquí implementada, se desea aplicar a redes atómicas, emerge el concepto de ángulo conmensurable. Dejamos su definición y explicación para el último apartado de esta tesis.

2.2. Red Cuadrada Bravais-Moiré

Considere la red $k\frac{\sqrt{2}}{2}Z \times k\frac{\sqrt{2}}{2}Z$, donde k es una constante usualmente impuesta cuando un conjunto discreto de puntos se ve como una estructura atómica cristalográfica; por ejemplo, $k = 1,44 \text{ \AA}$ se toma para una red Bravais hexagonal de grafeno. Para simplificar, tomaremos $k = 1$. Si u y v son el sistema de referencia asociado a la red, cambiamos las coordenadas por la rotación $x = u + \frac{\sqrt{2}}{2}$, $y = v + \frac{\sqrt{2}}{2}$, el nuevo conjunto es llamado la nueva red no rotada y se denotará por B_{norot} .

Hay un número de posibles vectores primitivos que expanden la red, en particular, proponemos los siguientes:

$$\begin{aligned}\mathbf{u}_1 &= k\sqrt{2} \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix} \\ \mathbf{u}_2 &= k\sqrt{2} \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix}\end{aligned}\tag{2.3}$$

Cualquier centro de la celda cuadrada de red puede ser representado por

el vector posición

$$\mathbf{c}_{r,s} = r\mathbf{u}_1 + s\mathbf{u}_2,$$

con $r, s \in \mathbb{Z}$.

Desde el punto de vista físico, B_{norot} puede ser visto como red Bravais cuadrada. La figura 2.1 muestra la red B_{norot} para $r, s = -3, -2, \dots, 2, 3$, el centro $c_{2,1}$ y los vectores primitivos.

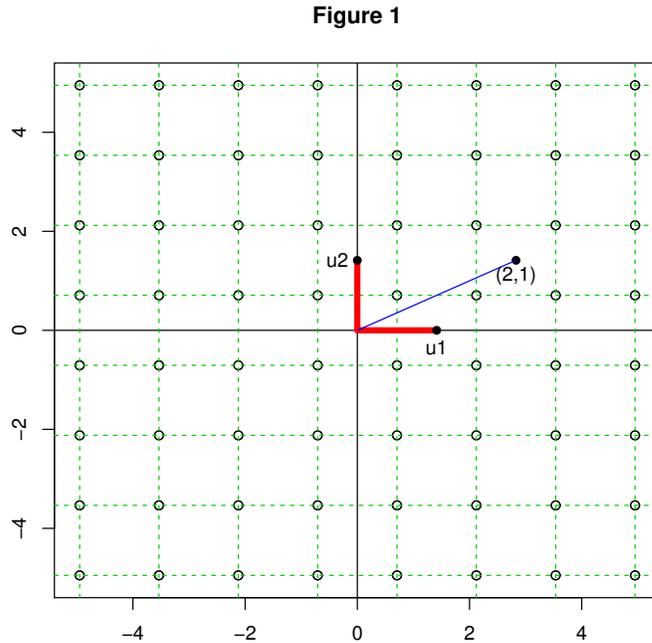


Figura 2.1: Red B_{norot} para $r, s = -3, -2, \dots, 2, 3$, vectores primitivos $\mathbf{u}_1, \mathbf{u}_2$ y el centro $\mathbf{c}_{r,s} = r\mathbf{u}_1 + s\mathbf{u}_2$, para $r = 2, s = 1$.

Entonces, para cada centro, el vector posición de los cuatro puntos en la

celda unitaria de la red cuadrada está dado por:

$\mathbf{c}_{r,s} + \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} \pm 1 \\ \pm 1 \end{pmatrix}$ y $\mathbf{c}_{r,s} + \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} \pm 1 \\ \mp 1 \end{pmatrix}$. Nótese, que el sistema de referencia es obtenido cuando $r = s = 0$

Ahora, los patrones de Moiré aparecen cuando una segunda red Bravais, digamos B_{rot} , inicialmente coincidente con B_{norot} , es rotada alrededor del mismo centro de referencia, por cierto ángulo θ . La rotación θ es definida como un ángulo conmensurable si el vector posición $\mathbf{c}_{r,s}$, para cada par de enteros r y s de B_{norot} coincide con el vector posición $\mathbf{c}_{r',s'}$, de un par de enteros r' y s' de B_{rot} .

Desde la teoría de Moiré, los patrones resultantes asociados con la rotación conmensurable de ambas redes, forman una súper red cuadrada periódica de puntos, replicada por una súper celda con vectores posición

$$\begin{aligned} \mathbf{p}_{r,s,1} &= \mathbf{c}_{r,s} \\ \mathbf{p}_{r,s,2} &= \mathbf{R}(-\pi/2) \mathbf{p}_{r,s,1} \\ \mathbf{p}_{r,s,3} &= \mathbf{R}(-\pi) \mathbf{p}_{r,s,1} \\ \mathbf{p}_{r,s,4} &= \mathbf{R}(-3\pi/2) \mathbf{p}_{r,s,1}, \end{aligned} \tag{2.4}$$

para sustituir un par de enteros (r, s) en el primer octante, que explicaremos a continuación. Aquí la matriz de rotación esta dada por:

$$\mathbf{R}(\theta) = \begin{pmatrix} \cos(\theta) & -\sin(\theta) \\ \sin(\theta) & \cos(\theta) \end{pmatrix}$$

En términos del sistema de referencia no rotado, los vértices primitivos están localizados en:

$$\begin{aligned} p_1 &= (\sqrt{2}r, \sqrt{2}s) \\ p_2 &= (-\sqrt{2}s, \sqrt{2}r) \\ p_3 &= (-\sqrt{2}r, -\sqrt{2}s) \\ p_4 &= (\sqrt{2}s, -\sqrt{2}r). \end{aligned} \tag{2.5}$$

Notar la existencia de tales patrones súper cuadrados centrados en pares de enteros, es el hecho más importante para entender la caracterización de la teoría Moiré-Bravais. Como ejemplos, las figuras 2.2 a 2.6 muestran que los patrones cuadrados Bravais-Moiré de rotación conmensurable r, s asociados a los pares: $(2, 1)$, $(3, 2)$, $(3, 1)$, $(4, 3)$ y $(4, 2)$.

De la figura 2.2 y 2.6, vale la pena notar que sólo enteros coprimos r y s producen diferentes patrones de Moiré, siguiendo el ejemplo, es claro que los patrones de Moiré asociados a $(2, 1)$ son los mismos que para $(2w, w)$, para todo número natural w .

Procedemos a derivar la forma general de ángulos conmensurables de la red cuadrada Bravais-Moiré. Primero definimos el dominio de todos los pares posibles (r, s) para la red primitiva cuadrada $\mathbf{p}_{r,s,i}$, $i = 1, 2, 3, 4$. Dada

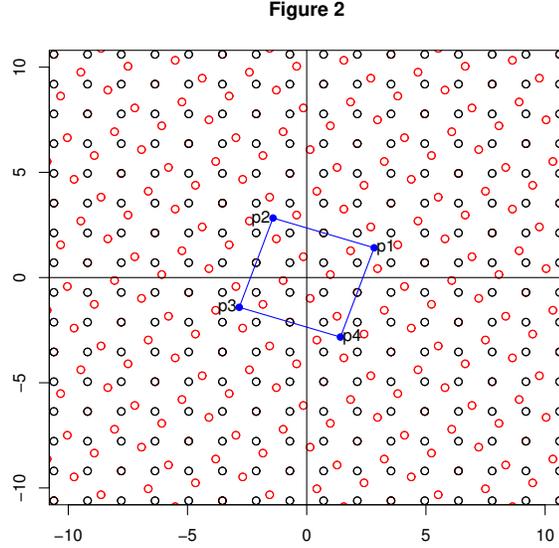


Figura 2.2: Patrones cuadrados Bravais-Moiré de rotación conmensurable asociados al par $(2, 1)$.

la simetría impuesta por (2.4), hay cuatro dominios naturales para encontrar la conmensurabilidad, por ejemplo, coincidir el centro de B_{norot} con un centro de B_{rot} después de la rotación.

El dominio del vértice primitivo p_1 , con vector posición $\mathbf{p}_{r,s,1}$, está justo en el primer octante, por ejemplo, todos los posibles coprimos r y s en el primer cuadrante limitado por los rayos $x > 0$ y $x > y$; en términos de la red base, $p_1 = (\sqrt{2}r, \sqrt{2}s)$, para todos los enteros $r > 1$, $s > 0$, $r > s$. Para probar que esta restricción da todos los centros admisibles en el primer octante, sólo tener en cuenta que: para cada centro indexado por $r > 1$, $s > 0$, $r > s$, el ángulo correspondiente en posición regular es $\alpha = \tan^{-1} \left(\frac{\sqrt{2}s}{\sqrt{2}r} \right) = \tan^{-1} \left(\frac{s}{r} \right)$.

Figure 3

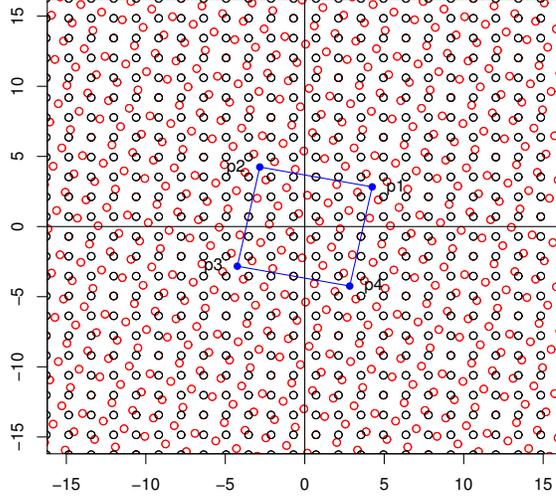


Figura 2.3: Patrones cuadrados Bravais-Moiré de rotación conmensurable asociados al par $(3, 2)$.

Para $s = r - 1$ y $r \rightarrow \infty$, $\alpha \rightarrow \pi/4$; mientras tanto para $s = 1$ y $r \rightarrow \infty$, $\alpha \rightarrow 0$, como debe ser.

El dominio de vector primitivo p_2 , con el vector posición $\mathbf{p}_{r,s,2}$, sigue desde (2.4) una rotación en sentido contrario a las agujas del reloj $\frac{\pi}{2}$ del dominio precedente, es decir, es consistente con todos los coprimos posibles r y s en el segundo cuadrante limitado por los rayos $x < 0$ y $x < y$, el tercer octante; o simplemente, $p_2 = (-\sqrt{2}s, \sqrt{2}r)$, para todos los enteros $r > 1$, $r > s$.

En forma similar, el dominio para el vértice primitivo p_3 , con vector posición $\mathbf{p}_{r,s,3}$, esta dado por todos los posibles coprimos r y s en el tercer cuadrante limitado por los rayos $x < 0$ y $x < y$, o el primer octante; a saber,

Figure 4

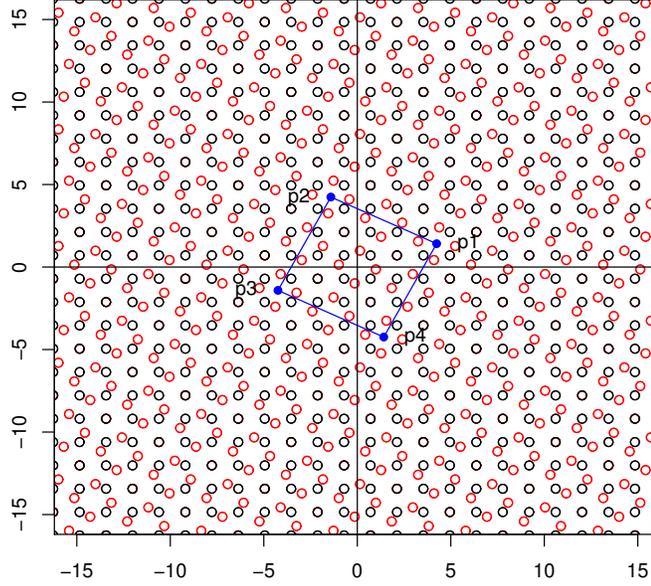


Figura 2.4: Patrones cuadrados Bravais-Moiré de rotación conmensurable asociados al par $(3, 1)$.

$p_3 = (-\sqrt{2}r, -\sqrt{2}s)$, para todos los enteros $r > 1$, $r > s$.

Y finalmente el dominio del vértice primitivo p_4 , con vector posición $\mathbf{p}_{r,s,4}$, está dado por todos los posibles coprimos r y s en el cuarto cuadrante limitando con los rayos $x > 0$ y $x < y$, o el séptimo octante; a saber, $p_4 = (\sqrt{2}s, -\sqrt{2}r)$, para todos los enteros, $r > 1$, $r > s$.

Note que todos los vértices primitivos estan dados justamente en términos de los coprimos $r > 1$, $r > s$, que se encuentran en el primer cuadrante (o primer octante) limitado por los rayos $x > 0$ y $x > y$.

Figure 5

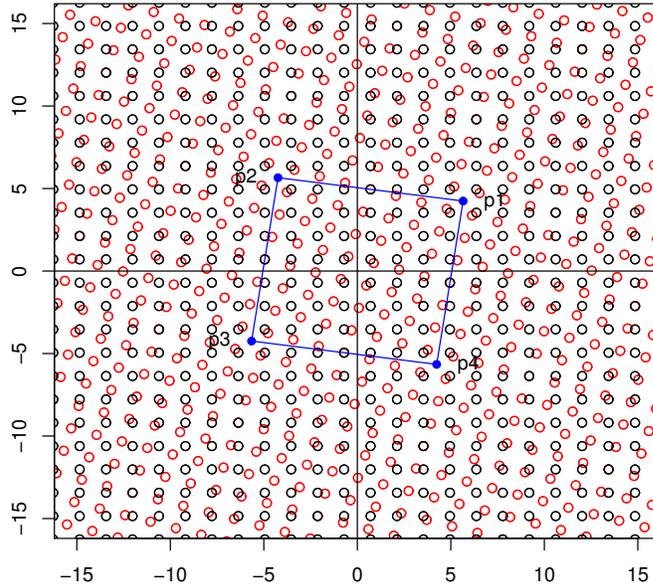


Figura 2.5: Patrones cuadrados Bravais-Moiré de rotación conmensurable asociados al par $(4, 3)$.

La tabla 2.2 proporciona una lista de primeros pares r y s , y la Figura 2.7 representa los puntos asociados de los cuadrados primitivos en los correspondientes dominios.

Hasta ahora, tenemos definidos todos los posibles centros de red, los cuales pueden ser coincidentes en ambos B_{norot} y B_{rot} bajo conmensurabilidad θ ; cada posible par de coprimos r, s definen un único cuadrado primitivo con vértices $p_i, i = 1, \dots, 4$; entonces cuatro de los ocho octantes de la red completa B_{norot} han sido completados, aspecto que demuestra que el ángu-

Figure 6

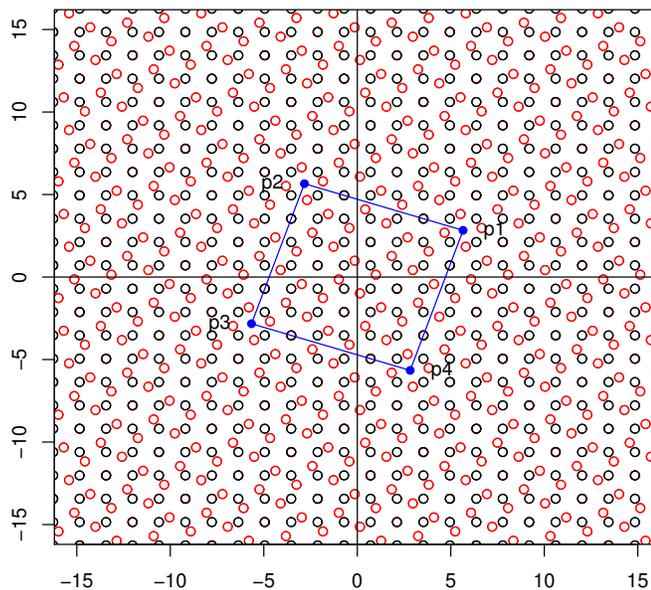


Figura 2.6: Patrones cuadrados Bravais-Moiré de rotación conmensurable asociados al par $(4, 2)$.

lo conmensurable puede ser restringido por $0 < \theta < \frac{\pi}{2}$. Sólo necesitamos obtener θ como una función de r y s .

Desde la definición, $p_1 = (\sqrt{2}r, \sqrt{2}s)$, $1 < r$, $0 < s$, $r > s$ coprimos, están en el centro de B_{norot} , en el primer octante, el cual coincide con un centro de B_{rot} , así que, necesitamos encontrar el punto original del sistema de referencia de B_{norot} que se convierte en p_1 después de la rotación de B_{rot} . La solución es bastante simple y ésta sugiere para los cuatro octantes complementarios $(2, 4, 6, 8)$ para los dominios $(1, 3, 5, 7)$ de p_1, \dots, p_4 , respectivamente, ver Fi-

CAPÍTULO 2. PATRONES DE MOIRÉ EN REDES DE BRAVAIS

Tabla 2.1: Primeros pares de coprimos r y s para los vértices primitivos de los patrones Bravais-Moiré súper cuadrados y ángulo commensurable. ($0^\circ < \theta < 90^\circ$)

r	2	3	3	4	4	5	5	5	5	6	6	7	7	7
s	1	2	1	3	1	4	3	2	1	5	1	6	5	4
θ	36.9	22.6	53.1	16.3	61.9	12.7	28.1	46.4	67.4	10.4	71.1	8.8	18.9	30.5
r	7	7	7	8	8	8	8	9	9	9	9	9	9	
s	3	2	1	7	5	3	1	8	7	5	4	2	1	
θ	43.6	58.1	73.7	7.6	26.0	48.9	75.7	6.7	14.3	31.9	42.1	64.9	77.3	

gura 2.7; dado que $0 < \theta < \frac{\pi}{2}$, así que, $0 < \frac{\theta}{2} < \frac{\pi}{4}$ y $0 < \frac{\pi}{4} - \frac{\theta}{2} < \frac{\pi}{4}$, entonces una rotación de $\frac{\pi}{4}$ contrario a las agujas del reloj del vector posición de p_1 siempre está en el octavo octante, porque, si $1 < r$, $r > s$ son coprimos, y el $\mathbf{q}_{r,s,1}$ es el vector rotado, entonces

$$\begin{aligned}
 \mathbf{q}_{r,s,1} &= \mathbf{R}(\pi/4) \mathbf{p}_{r,s,1} \\
 &= \begin{pmatrix} -(r-s) \\ r+s \end{pmatrix}.
 \end{aligned} \tag{2.6}$$

Para probar que $\mathbf{q}_{r,s,1}$ pertenece al octavo octante, β significa la dirección del vector respecto a $x > 0$. Desde (2.6), $\tan \beta = \frac{s-r}{r+s}$, y dado que los coprimos $r > s$, $s > 0$, $r > 1$, tenemos que $-1 < \tan \beta < 0$. Un ángulo extremo s es obtenido tomando $s = 1$, así que $r \rightarrow \infty$ tenemos que $\tan \beta \rightarrow -1$; mientras tanto para $s = r - 1$ y $r \rightarrow \infty$, tenemos que $\tan \beta \rightarrow 0$, luego, recogiendo los hechos anteriores tenemos que, $7\pi/4 < \beta < 2\pi$. Mediante el uso de las desigualdades $0 < \frac{\theta}{2} < \frac{\pi}{4}$ y $0 < \frac{\pi}{4} - \frac{\theta}{2} < \frac{\pi}{4}$, y la manera inducida que B_{rot} fue

Figure 7

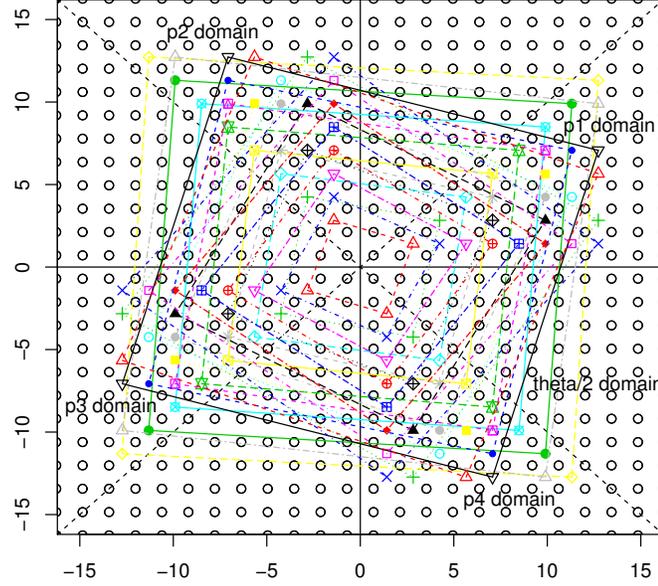


Figura 2.7: Octantes 1, 3, 5, 7 como dominios de los vértices primitivos de los patrones súper cuadrados Bravais-Moiré, para $r = 2, 3, \dots, 9$ y $s = 1, 2, \dots, 8$.

encontrado por la rotación $\theta = 2\frac{\theta}{2}$, el ángulo $\frac{\pi}{4} - \frac{\theta}{2}$ es determinado por $\mathbf{p}_{r,s,1}$ y $x > 0$, mientras tanto, $\frac{\theta}{2}$ es determinado por $\mathbf{q}_{r,s,1}$ y $x > 0$, ver Figura 2.7; significa que $\tan \frac{\theta}{2} = \frac{s-r}{r+s}$, y usando $\cos \theta = \frac{1-\tan^2 \frac{\theta}{2}}{1+\tan^2 \frac{\theta}{2}}$, obtenemos que el ángulo conmensurable $0 < \theta < \frac{\pi}{2}$ en el sentido de las agujas del reloj, respecto a $x > 0$, esta dado por:

$$\theta = \cos^{-1} \left(\frac{2rs}{r^2 + s^2} \right), r, s \text{ coprimos, } r > 1, s > 0, r > s, \quad (2.7)$$

ver Tabla 2.2.

Una alternativa derivada de la ecuación 2.21 usa la fuerte simetría de los patrones de Moiré explicados en la figura 2.7. Es simple probar que el segundo octante de la red Bravais B_{norot} es sólo una reflexión, alrededor de la línea $y = x$, del primer octante de B_{norot} . Significa que conmensurabilidad $0 < \theta < \frac{\pi}{2}$ exige que el vector posición del centro $p_1 = (\sqrt{2}r, \sqrt{2}s)$, en el primer octante, es la reflexión, sobre $y = x$, del vector posición del centro $w_1 = (\sqrt{2}s, \sqrt{2}r)$, que pertenece al segundo octante. Entonces pedimos θ tal que p_1 sea girado en sentido contrario a las agujas del reloj de tal manera que coincidan con la reflexión w_1 . Así que para todos los coprimos $r > 1$, $s > 0$, $r > s$, sea $\alpha_i > 0$, $\alpha_f > 0$ la dirección del vector posición determinado por p_1 y w_1 , respectivamente; entonces $\theta_i < \theta < \theta_f$, y $\cos \theta = \cos(\theta_f - \theta_i) = \cos \theta_f \cos \theta_i + \sin \theta_f \sin \theta_i = \frac{\sqrt{2}s}{\sqrt{2(r^2+s^2)}} \frac{\sqrt{2}r}{\sqrt{2(r^2+s^2)}} + \frac{\sqrt{2}r}{\sqrt{2(r^2+s^2)}} \frac{\sqrt{2}s}{\sqrt{2(r^2+s^2)}} = \frac{2rs}{r^2+s^2}$, como era requerido.

Finalmente, otra prueba puede ser implementada. La reflexión w_1 de p_1 alrededor de la línea $y = \tan(\frac{\pi}{4})x$, puede ser vista en el contexto de conmensurabilidad como lo siguiente: en las mismas condiciones de la última declaración, reclamamos para $0 < \theta < \frac{\pi}{2}$ tal que la ecuación $\begin{pmatrix} \sqrt{2}r \\ \sqrt{2}s \end{pmatrix} = \mathbf{R}(\theta) \begin{pmatrix} \sqrt{2}s \\ \sqrt{2}r \end{pmatrix}$ tiene soluciones enteras r y s en el primer octante. Esto es equivalente a $\begin{pmatrix} r \\ s \end{pmatrix} = \mathbf{R}(\theta) \begin{pmatrix} s \\ r \end{pmatrix}$, así que $\begin{pmatrix} r \\ s \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} s \cos \theta - r \sin \theta \\ s \sin \theta + r \cos \theta \end{pmatrix}$. Ahora, desde un curso básico de álgebra abstracta, sabemos que este sistema de ecuaciones diofánticas, tiene solución en el primer octante, si y

solo si, $\cos \theta$ y $\sin \theta$ son racionales, y dado que están relacionadas por la igualdad $\cos^2 \theta + \sin^2 \theta = 1$, sólo pedimos triples pitagóricos a, b, c tales que $a^2 + b^2 = c^2$, donde $\cos \theta = a/c$ y $\sin \theta = b/c$. Este es un problema clásico en la teoría numérica, resuelto desde la antigüedad, probamos aquí una solución alternativa dada por [25]. En este caso el triple pitagórico viene de: $[n^2 - 2nu + 2u^2]^2 = [2u(n - u)]^2 + [n(n - 2u)]^2$, con $n, u \in \mathbb{Z}$, siendo $r = u$ y $s = n - u$, obtenemos $\cos \theta = \frac{2rs}{r^2 + s^2}$, como debe ser.

Considere la ecuación Diofántica $(\frac{a}{c})^2 + (\frac{b}{c})^2 = 1$ o simplemente $x^2 + y^2 = 1$, con $x = a/c, y = b/c$. Pedimos enteros $r > s > 0$, tales que $\frac{r}{s}$ es la proyección del polo $(0, 1)$ para $x > 0$. Supongamos que la dirección de la línea intercepta la circunferencia (x, y) , significa que $\frac{x}{\frac{r}{s}} + \frac{y}{1} = 1$; reemplazando y en $x^2 + y^2 = 1$, usando nuestra restricción para coprimos $r > s, s > 0, r > 1$, tenemos el resultado requerido $x = \cos \theta = \frac{2rs}{r^2 + s^2}$.

2.2.1. Número de puntos en la súper celda cuadrada.

Terminamos la caracterización de esta red Bravais-Moiré encontrando el número de puntos en cada súper celda cuadrada primitiva. Por la simetría de los patrones de Moiré bajo conmensurabilidad, es claro que hay una celda primitiva mas pequeña que el súper cuadrado; podríamos dividir la celda primitiva en dos triángulos iguales y tomar uno de ellos para replicar la red completa; pero oculta la construcción natural de los patrones y algunas preguntas como el número de puntos obtenidos artificialmente.

Si consideramos la súper celda cuadrada primitiva con vértices $p_i, i =$

CAPÍTULO 2. PATRONES DE MOIRÉ EN REDES DE BRAVAIS

1, 2, 3, 4, dados en (2.5). El área del cuadrado es $4(r^2 + s^2)$ y el área de la celda base cuadrada de puntos de la red Bravais es 2 (ver (2.3)), entonces el cuadrado primitivo contiene exactamente $2(r^2 + s^2)$ celdas cuadradas de puntos de la red Bravais. Ahora, con el fin de utilizar esta división entera de áreas para establecer el número de puntos que contiene tal súper cuadrado, tenemos que anotar que hay dos conjuntos posibles de puntos en el área confinada por el cuadrado: Tipo I. Todos los puntos están dentro del cuadrado; o Tipo II. También son puntos en los lados del cuadrado (Si restringimos a coprimos $r > 1, s > 0, r > s$, habrá exactamente cuatro puntos en los bordes, cada uno en el centro del lado del cuadrado). Tenga en cuenta que sólo debemos enfocarnos en uno de los dos Bravais del sistema. Las figuras 2.8 y 2.9 muestran el Bravais no rotado en los dos casos abordados, respectivamente, y para todos los posibles pares de coprimos en el rango $r = 2, 3, \dots, 7$ y $s = 1, \dots, 6$. El primer tipo es ilustrado por el (r, s) pares $(3, 1), (5, 3), (5, 1), (7, 5), (7, 3), (7, 1)$. Los pares restantes $(2, 1), (3, 2), (4, 3), (4, 1), (5, 4), (5, 2), (6, 5), (6, 1), (7, 4), (7, 2)$ pertenecen al segundo tipo. Finalmente, es importante anotar que los centros en la red cuadrada Bravais-Moiré no hacen parte de la red cristalográfica, así que el número de puntos del cuadrado primitivo requeridos en el primer conjunto son exactamente el número de veces que el súper cuadrado contiene la base de la celda súper cuadrada. En el segundo conjunto, necesitamos adicionar dos puntos más (los otros dos pertenecen a un vecindario primitivo). Elegimos, por ejemplo, el punto medio del segmento p_1p_2 y p_1p_4 , ver líneas negras

y puntos medios en la figura 2.9. Observar que los cuatro puntos centrales mencionados se encuentran en los octantes 2, 4, 6, 8, respectivamente, ver de nuevo la figura 2.7.

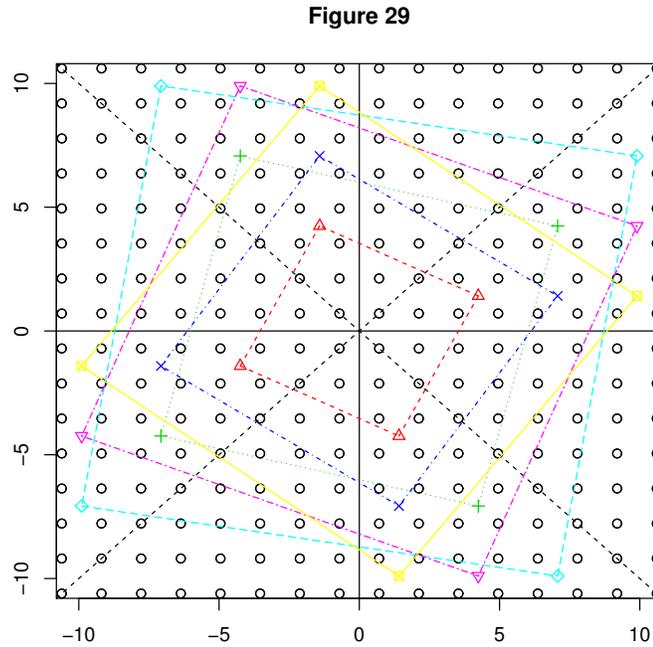


Figura 2.8: Súper celda primitiva cuadrada tipo I, que contiene puntos internos. Ejemplo para pares (r, s) : $(3, 1)$, $(5, 3)$, $(5, 1)$, $(7, 5)$, $(7, 3)$, $(7, 1)$.

Analíticamente si p_{12} y p_{14} son los correspondientes puntos centrales en las celdas tipo II, entonces el vector posición de p_{14} es sólo una rotación $\pi/2$ en el sentido de las agujas del reloj del vector posición p_{12} . Entonces sólo tenemos que estudiar uno de ellos. De (2.5): $p_{12} = (\frac{r-s}{\sqrt{2}}, \frac{r+s}{\sqrt{2}})$, que pertenece al segundo octante. Por (2.3), las celdas tipo II deben satisfacer las relaciones Diofánticas

Figure 30

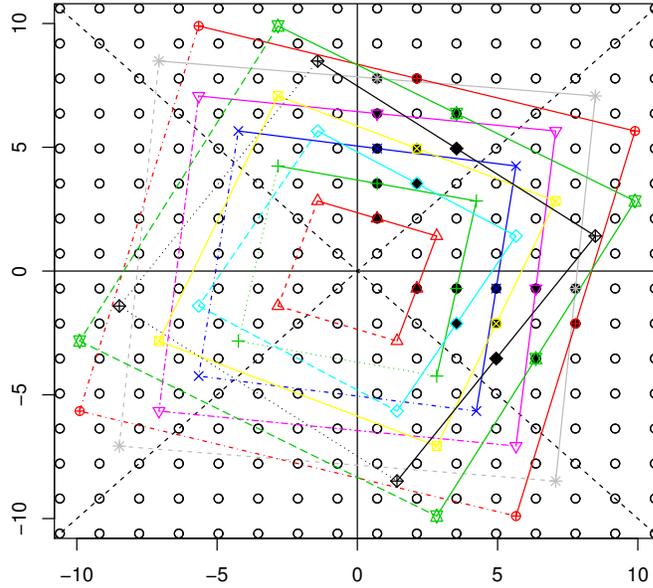


Figura 2.9: Súper celda primitiva cuadrada tipo II, que contiene dos puntos adicionales en los lados p_1p_2 y p_1p_4 . Ejemplo para pares (r, s) : $(2, 1)$, $(3, 2)$, $(4, 3)$, $(4, 1)$, $(5, 4)$, $(5, 2)$, $(6, 5)$, $(6, 1)$, $(7, 4)$, $(7, 2)$.

$\frac{r-s}{\sqrt{2}} = \frac{m}{\sqrt{2}}$ y $\frac{r+s}{\sqrt{2}} = \frac{n}{\sqrt{2}}$, por $m, n = 1, 3, 5, 7, \dots; m < n$. Solucionado esto y multiplicando por dos con el fin de incluir la Bravais rotada B_{rot} obtenemos el número de puntos N de la súper celda cuadrada Bravais-Moiré de tipo I, como

$$N = 4(r^2 + s^2), \quad r, s \text{ coprimos, } r > 1, s > 0, r > s. \quad (2.8)$$

Mientras tanto, el número de puntos N de la súper celda cuadrada Bravais-

Tabla 2.2: Número de puntos de la súper celda cuadrada Bravais-Moiré, para los primeros pares de coprimos r y s , $s > 0, r > 1, r > s$.

r	2	3	3	4	4	5	5	5	5
s	1	2	1	3	1	4	3	2	1
N	24	56	40	104	72	168	136	120	104
r	6	6	7	7	7	7	7	7	7
s	5	1	6	5	4	3	2	1	1
N	248	152	344	296	264	232	216	200	200

Moiré de tipo II, está dada por

$$N = 4(r^2 + s^2) + 4, \quad r = \frac{m+n}{2}, s = \frac{n-m}{2}, m, n = 1, 3, 5, 7, \dots; m < n. \quad (2.9)$$

Aquí m, n son seleccionados de tal manera que los resultados r, s son coprimos y $r > 1, s > 0, r > s$.

Algunos ejemplos se dan en la tabla 2.2

2.2.2. Pentagrafeno como un ejemplo de rotaciones conmensurables en redes de Bravais cuadradas

Como ejemplo de la aplicación de la rotación en ángulos conmensurables para redes de Bravais cuadradas, en esta sección aplicaremos esta rotación sobre dos láminas de pentagrafeno (PG). El pentagrafeno es un nuevo alótropo del carbono el cual ha sido propuesto recientemente en forma teórica [26]. El PG está compuesto por pentágonos y reensambla los característicos azulejos del Cairo. Desde el punto de vista físico, el PG se caracteriza por tener un band gap de aproximadamente 3,25 eV, lo que lo convierte en un excelente

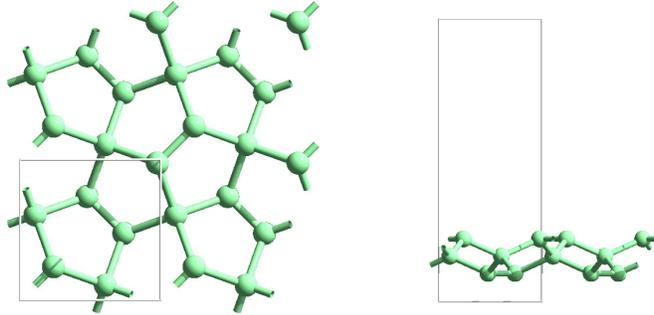


Figura 2.10: Celda unitaria de pentagrafeno, vista frontal y vista lateral.

candidato para el futuro de desarrollo de dispositivos opto-electrónicos. A pesar de ser una propuesta teórica reciente, múltiples estudios teóricos sobre sus propiedades han sido reportados en los dos últimos años [17, 27, 28]. A lo largo de esta sección nosotros nos concentraremos únicamente en las propiedades geométricas del PG. Como lo mencionamos anteriormente, el pentagrafeno es una estructura periódica formada por átomos de carbono arreglados en forma de pentagonos, que forman una red tetragonal con constantes de red $a = b = 3,64 \text{ \AA}$, es decir podemos analizar esta estructura como una red bidimensional cuadrada. En su celda unitaria el pentagrafeno cuenta con 6 átomos de carbono, tal como muestra la Figura 2.10.

Para formar el sistema de dos capas de PG rotadas entre sí, nosotros empleamos la solución a las ecuaciones diofánticas para la red cuadrada, las cuales se pueden resumir en el ángulo de rotación conmensurable dado por la ecuación 2.7, de la sección anterior. Como ejemplo en la Figura 2.11, observamos dos capas de PG con un ángulo de rotación $\theta = 36,9^\circ$, que

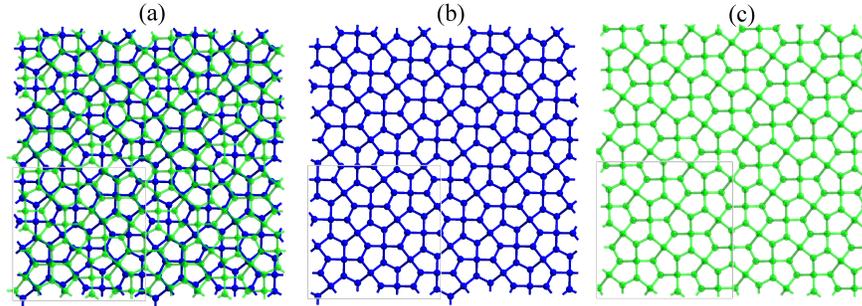


Figura 2.11: Bicapa de pentagrafeno rotada un ángulo $\theta = 36,9^\circ$, (a) sistema completo, (b) capa inferior y (c) capa superior. Se consideran cuatro imágenes de la celda unitaria para observar la periodicidad.

equivale a tomar $r = 2$ y $s = 1$ en la ecuación 2.7. Para obtener la celda unitaria de la Figura 2.11, el procedimiento que se aplica consiste en construir una súper celda de PG, lo suficientemente grande para poder recortarla, luego ésta súper celda se duplica y se rota el ángulo conmensurable dado por la ecuación 2.7. Luego se aplica un algoritmo de corte (ver Apéndice A) para encontrar los átomos que quedan dentro de la caja, limitada por los vértices p_1, p_2, p_3 y p_4 , tal como se describe en la sección anterior.

Para enfatizar en la aplicabilidad de las rotaciones conmensurables para redes cuadradas en la Figura 2.12, se muestran seis ángulos conmensurables, para los primeros pares de coprimos, (r, s) $(3, 1)$, $(3, 2)$, $(4, 1)$, $(4, 3)$, $(5, 1)$ y $(5, 2)$. Finalmente en la siguiente tabla resumimos las características para cada una de estas estructuras.

Tal y como se observa en la tabla, con la aplicación del procedimiento propuesto para el cálculo de la celda unitaria, es posible encontrar el ángulo

CAPÍTULO 2. PATRONES DE MOIRÉ EN REDES DE BRAVAIS

Tabla 2.3: Principales parámetros para bicapas de pentagrafeno rotadas.

(r,s)	θ	Constante de red (Å)	Número de átomos
(2,1)	36,9°	11,544	120
(3,1)	53,1°	16,326	240
(3,2)	22,6°	18,614	312
(4,1)	61,9°	21,286	408
(4,3)	16,3°	25,813	600
(5,1)	67,4°	26,325	624
(5,2)	46,4°	27,802	696

de rotación conmensurable y el número de átomos contenidos en ella, así como la constante de red, permitiendo de esta forma aplicar modelos de enlace fuerte o incluso cálculos de primeros principios para estudiar las propiedades físico químicas de este sistema bidimensional.

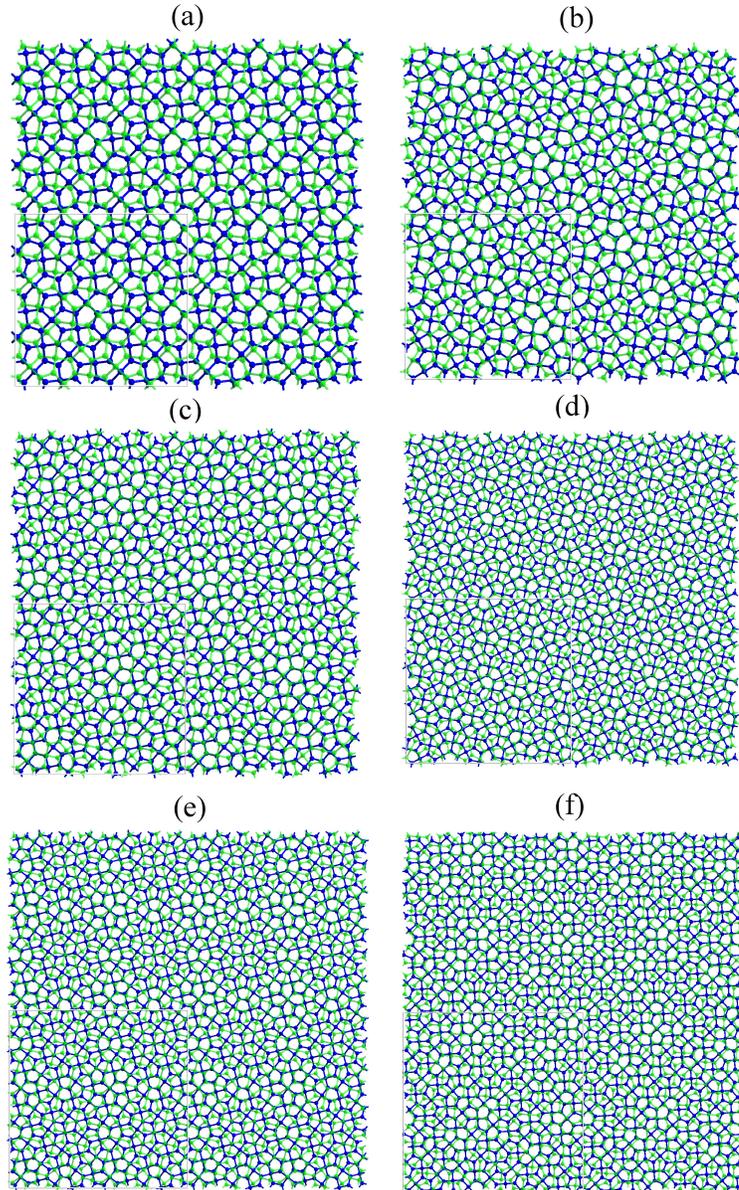


Figura 2.12: Bicapas de pentagrafeno rotadas para diferentes ángulos (a) $\theta = 53,1^\circ$, (b) $\theta = 22,6^\circ$, (c) $\theta = 61,9^\circ$, (d) $\theta = 16,3^\circ$, (e) $\theta = 67,4^\circ$ y (f) $\theta = 46,4^\circ$. En cada caso se consideran cuatro imágenes de la celda unitaria para observar la periodicidad.

2.3. Red hexagonal Bravais-Moiré

En esta sección nosotros aplicamos el mismo procedimiento de las secciones anteriores con el fin de obtener la red hexagonal Bravais-Moiré. En los casos anteriores la red de los centros eran simples traslaciones de la red cristalográfica pero en el caso hexagonal los centros están localizados en una red rectangular. Además se calcula el número de puntos en la celda primitiva hexagonal.

Considere la red $k\frac{\sqrt{2}}{2}Z \times k\frac{\sqrt{2}}{2}Z$, donde k es una constante usualmente impuesta cuando el conjunto de puntos, es visto como una estructura atómica cristalográfica por ejemplo, $k = 1,44 \text{ \AA}$ es tomado para una red Bravais hexagonal de grafeno. Para simplificar, tomaremos $k = 1$. Si u y v son el sistema de referencia asociados a la red, cambiamos las coordenadas de traslación $x = u + \frac{\sqrt{2}}{2}$, $y = v + \frac{\sqrt{2}}{2}$, el nuevo conjunto es llamado la red centrada no rotada y la denominaremos por C_{norot} .

La literatura del grafeno reporta muchísimos vectores primitivos que expanden la red hexagonal sin embargo los vectores primitivos de la red Bravais cuadrada nos sugieren el siguiente múltiplo escalar de la base canónica:

$$\begin{aligned}\mathbf{u}_1 &= k \frac{\sqrt{3}}{2} \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix} \\ \mathbf{u}_2 &= k \frac{3}{2} \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix}\end{aligned}\tag{2.10}$$

Cualquier centro en forma de paralelogramo en la red C_{norot} puede ser representado por el vector posición

$$\mathbf{c}_{r,s} = r\mathbf{u}_1 + s\mathbf{u}_2,$$

con $r, s \in \mathbb{Z}$. Note que, el centro del sistema de referencia es obtenido cuando $r = s = 0$.

Entonces para cada centro $\mathbf{c}_{r,s}$ en C_{norot} , construimos la red hexagonal no rotada Bravais los seis vectores posición son

$$\mathbf{c}_{r,s} + \begin{pmatrix} \pm\sqrt{3}/2 \\ \pm 1/2 \end{pmatrix}, \quad \mathbf{c}_{r,s} + \begin{pmatrix} \pm\sqrt{3}/2 \\ \mp 1/2 \end{pmatrix}, \quad \mathbf{c}_{r,s} + \begin{pmatrix} 0 \\ \pm 1 \end{pmatrix},\tag{2.11}$$

y la red resultante no rotada Bravais hexagonal, será denotada por B_{norot} .

La figura 2.13 muestra la red B_{norot} para $r, s = -4, -3, \dots, 3, 4$; y también es graficada la red C_{norot} , con el centro $c_{5,1}$ y los vectores primitivos.

Como es usual, los patrones de Moiré aparecen cuando una segunda red

Figure 8

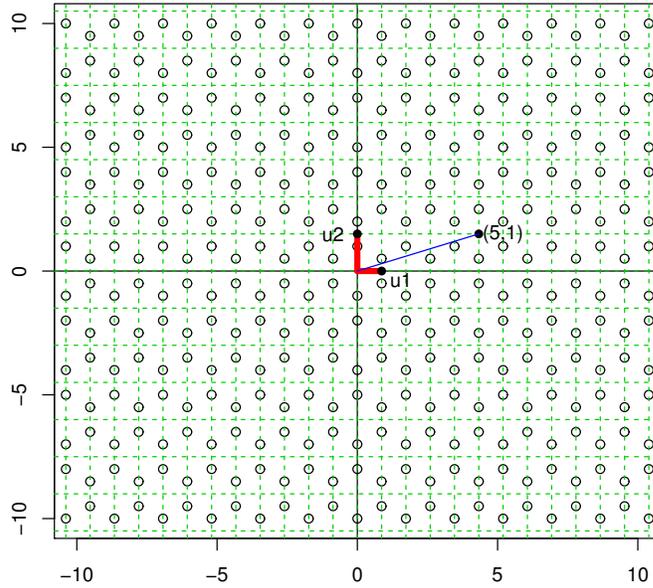


Figura 2.13: Redes B_{norot} y C_{norot} para $r, s = -4, -3, \dots, 3, 4$, vectores primitivos $\mathbf{u}_1, \mathbf{u}_2$ y el centro $\mathbf{c}_{r,s} = r\mathbf{u}_1 + s\mathbf{u}_2$, for $r = 5, s = 1$.

Bravais, B_{rot} , inicialmente coincidente con B_{norot} , es rotada, alrededor del mismo centro de referencia por cierto ángulo θ . La rotación θ es definida como un ángulo conmensurable si el vector posición $\mathbf{c}_{r,s}$, de un par de enteros r y s de B_{norot} coincide con el vector posición $\mathbf{c}_{r',s'}$, para un par de enteros r' y s' de B_{rot} .

La teoría de Moiré, muestra que los patrones resultantes, asociados a la rotación conmensurable, forman puntos hexagonales periódicos replicados

por una súper celda hexagonal con vectores posición:

$$\begin{aligned}
 \mathbf{p}_{r,s,1} &= \mathbf{c}_{r,s} \\
 \mathbf{p}_{r,s,2} &= \mathbf{R}(-\pi/3) \mathbf{p}_{r,s,1} \\
 \mathbf{p}_{r,s,3} &= \mathbf{R}(-2\pi/3) \mathbf{p}_{r,s,1} \\
 \mathbf{p}_{r,s,4} &= \mathbf{R}(-\pi) \mathbf{p}_{r,s,1} \\
 \mathbf{p}_{r,s,5} &= \mathbf{R}(-4\pi/3) \mathbf{p}_{r,s,1} \\
 \mathbf{p}_{r,s,6} &= \mathbf{R}(-5\pi/3) \mathbf{p}_{r,s,1}, \tag{2.12}
 \end{aligned}$$

para ciertos pares de enteros (r, s) , tales que los centros de la red hexagonal yace en el primer 12-ante, por ejemplo, la dirección α de un vector posición de centro p_1 debe satisfacer $0 < \alpha < \frac{\pi}{6}$. Explícitamente, la red base \mathbf{u}_1 y \mathbf{u}_2 para los centros en el primer 12-ante, restringen a aquellos enteros para que sean de la forma: $r = 2x + y$ y $s = y$, donde x, y son números naturales, $y \geq 1$, $x \geq 2$ y $x > y$. Bajo esta parametrización, note que $\tan \alpha = \frac{s}{r} = \sqrt{3} \frac{y}{2+x}$; los ángulos extremos del dominio de $\mathbf{p}_{r,s,1}$ se alcanzan como sigue: cuando $y = 1$ y $x \rightarrow \infty$, tenemos $\alpha \rightarrow 0$; mientras que $y = x - 1$ y $x \rightarrow \infty$ se conduce que $\tan \alpha \rightarrow \frac{1}{\sqrt{3}}$; mostrando que el vector posición de p_1 , indexados por la restricción r, s , tiene dirección $0 < \alpha < \frac{\pi}{6}$.

Como en el caso de la Bravais cuadrada, la simetría de los patrones de Moiré dividen el plano en doce partes iguales:

$0 < \theta < \pi/6, \pi/6 < \theta < 2\pi/6, \dots, 11\pi/6 < \theta < 12\pi/6$, enumerados en el sentido contrario de las agujas del reloj.

CAPÍTULO 2. PATRONES DE MOIRÉ EN REDES DE BRAVAIS

En términos del sistema no rotado, los vértices primitivos esta localizados en:

$$\begin{aligned}
 p_1 &= \left(\sqrt{3}r/2, 3s/2 \right) \\
 p_2 &= \left(-\sqrt{3}(3s-r)/4, 3(s+r)/4 \right) \\
 p_3 &= \left(-\sqrt{3}(3s+r)/4, -3(s-r)/4 \right) \\
 p_4 &= \left(-\sqrt{3}r/2, -3s/2 \right) \\
 p_5 &= \left(\sqrt{3}(3s-r)/4, -3(s+r)/4 \right) \\
 p_6 &= \left(\sqrt{3}(3s+r)/4, 3(s-r)/4 \right), \tag{2.13}
 \end{aligned}$$

con $r = 2x + y$ y $s = y$, donde x, y son números naturales, $y \geq 1$, $x \geq 2$ y $x > y$.

Como ejemplos, las figuras 2.14 a 2.18 muestran los patrones hexagonales Bravais-Moiré de rotaciones conmensurables asociadas a los pares $(r, s); [x, y]$: $(5, 1); [2, 1], (8, 2); [3, 2], (7, 1); [3, 1], (11, 3); [4, 3]$ y $(10, 2); [4, 2]$.

Las figuras 2.14 y 2.18 explican que sólo coprimos x y y ($y \geq 1$, $x \geq 2$ y $x > y$) producen diferentes patrones de Moiré; siguiendo el ejemplo, es claro que los patrones de Moiré asociados a $(r = 5, s = 1)$ o $[x = 2, y = 1]$ son los mismos que $(5w, w)$ o $[2w, w]$, para cada número natural w .

Para la simetría revelada en (2.12), hay seis dominos naturales para acoplar los centros de B_{norot} con un centro de B_{rot} bajo rotación. Recordando que nosotros necesitamos simplemente enfocarnos en p_1 , porque los restantes $p_i, i = 2, \dots, 6$ en $(i - 1)\pi/3$ rotaciones de p_1 ; habiamos probado que el

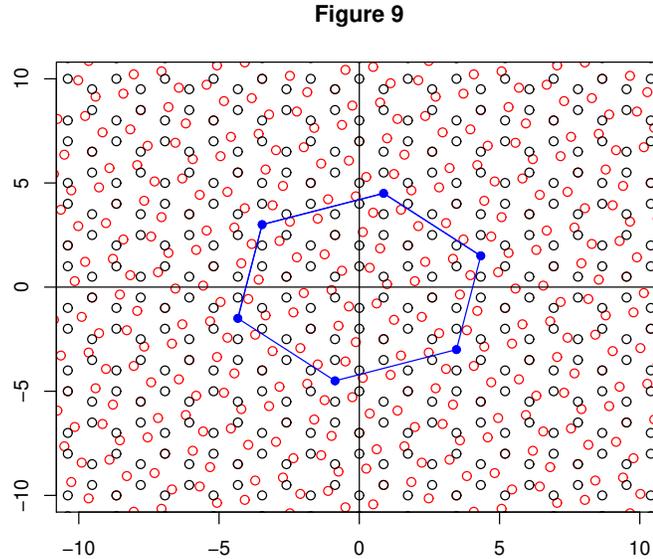


Figura 2.14: Patrones hexagonales Bravais-Moiré de rotaciones conmensurables asociadas a los pares $(r = 5, s = 1)$ o $(x = 2, y = 1)$.

dominio de p_1 es el primer 12–ante ($0 < \theta < \pi/6$); en general el dominio de $p_i, i = 1, \dots, 6$ es el $(2i - 1)$ -esimo 12–ante.

La tabla 2.3 da una lista de los primeros pares r y s , y la figura 2.19 muestra que los puntos asociados a los hexágonos primitivos en el correspondiente dominio.

Con la misma filosofía de la red cuadrada Bravais-Moiré, definimos todos los posibles centros de la red hexagonal, los cuales pueden ser coincidentes en ambas B_{norot} y B_{rot} bajo conmensurabilidad θ ; cada posible par $r = 2x + y, s = y$ (para coprimos x y $y, y \geq 1, x \geq 2, x > y$) definen un

Figure 10

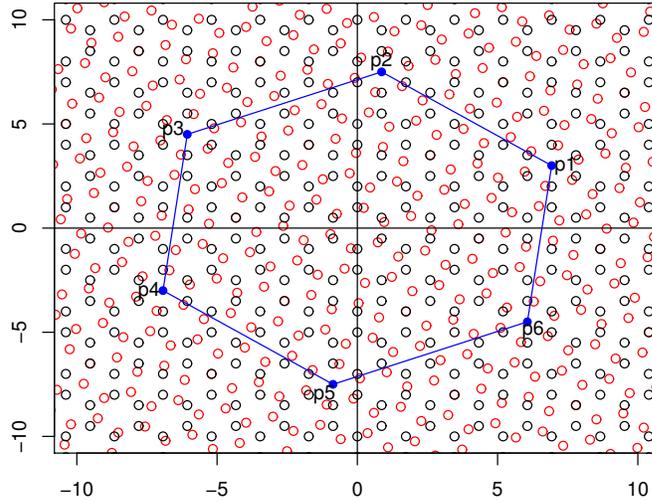


Figura 2.15: Patrones hexagonales Bravais-Moiré de rotaciones conmensurables asociadas a los pares $(r = 8, s = 2)$ o $(x = 3, y = 2)$.

único hexágono primitivo con vértices $p_i, i = 1, \dots, 6$; con seis de los doce 12-antes de la red completa B_{norot} han cumplido, aspecto que demuestra que los ángulos conmensurables serían restringidos a $0 < \theta < \frac{\pi}{3}$.

Dado que $p_1 = (\sqrt{3}r/2, 3s/2)$ es el centro de B_{norot} , en el primer 12-ante, el cual coincide con un centro de B_{rot} , simplemente necesitamos encontrar el punto original en el sistema de referencia de B_{norot} el cual se ha convertido en p_1 después de la rotación en B_{rot} . Como antes, la solución es muy simple y se encuentra en los restantes seis doceantes complementarios (2, 4, 6, 8, 10, 12) para los dominios (1, 3, 5, 7, 9, 11) de p_1, \dots, p_6 , respectivamente, ver figura

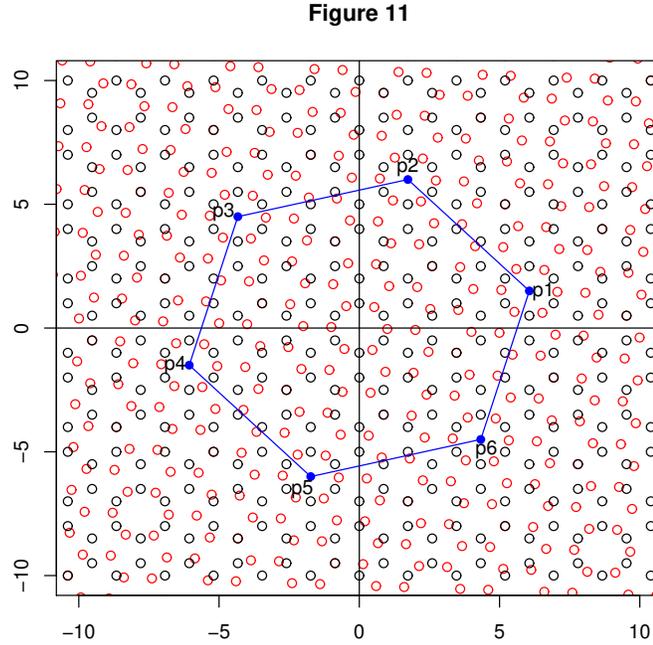


Figura 2.16: Patrones hexagonales Bravais-Moiré de rotaciones conmensurables asociadas a los pares $(r = 7, s = 1)$ o $(x = 3, y = 1)$.

2.19.

Cuando, $0 < \theta < \frac{\pi}{3}$, implica que $0 < \frac{\theta}{2} < \frac{\pi}{6}$ y $0 < \frac{\pi}{6} - \frac{\theta}{2} < \frac{\pi}{6}$, así que una rotación de $\frac{\pi}{6}$ en el sentido de las manecillas del reloj del vector posición de p_1 yacen siempre en el doceavo 12-ante, porque, si $r = 2x + y, s = y, x$ y y coprimos, $y \geq 1, x \geq 2, x > y$, y $\mathbf{q}_{r,s,1}$ es el indicado vector rotado, entonces

Figure 12

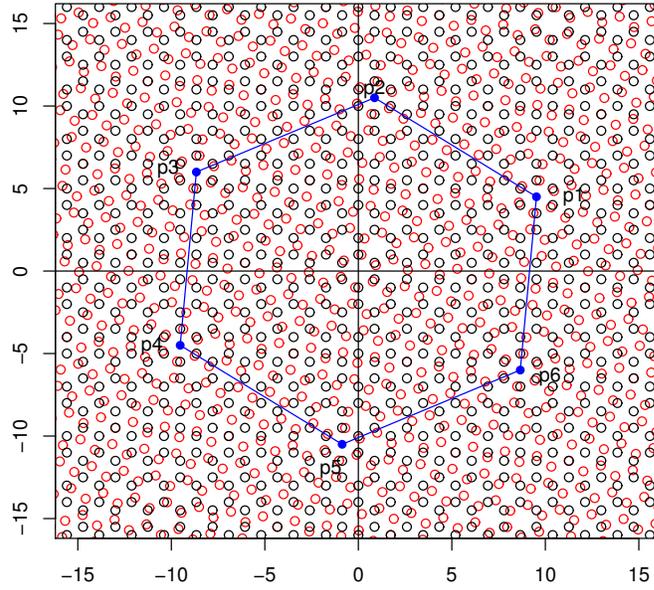


Figura 2.17: Patrones hexagonales Bravais-Moiré de rotaciones conmensurables asociadas a los pares $(r = 11, s = 3)$ o $(x = 4, y = 3)$.

$$\begin{aligned}
 \mathbf{q}_{r,s,1} &= \mathbf{R}(\pi/6) \mathbf{p}_{r,s,1} \\
 &= \begin{pmatrix} 3(r+s)/4 \\ \sqrt{3}(3s-r)/4 \end{pmatrix}. \tag{2.14}
 \end{aligned}$$

Probamos ahora que $\mathbf{q}_{r,s,1}$ pertenece al doceavo 12-ante. Sea β la dirección del vector respecto a $x > 0$. De (2.14), $\tan \beta = \frac{3s-r}{\sqrt{3}(r+s)} = \frac{y-x}{\sqrt{3}(x+y)}$, y

Figure 13

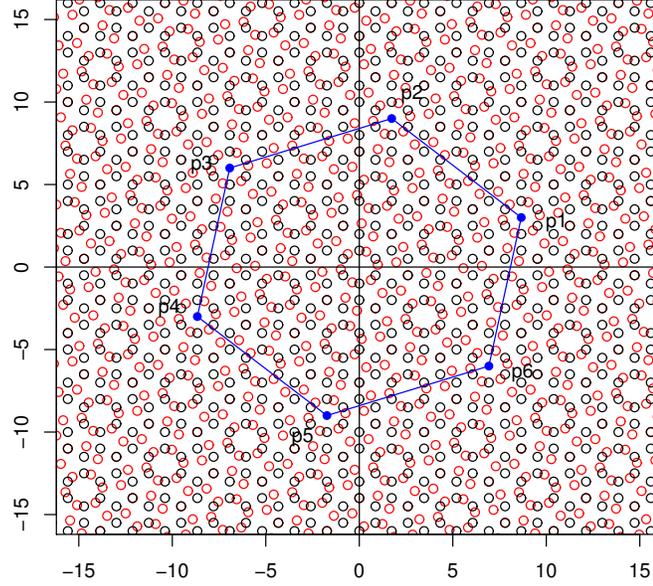


Figura 2.18: Patrones hexagonales Bravais-Moiré de rotaciones conmensurables asociadas a los pares $(r = 10, s = 2)$ o $(x = 4, y = 2)$.

dado que x y y son coprimos tales que, $y \geq 1$, $x \geq 2$, $x > y$, obtenemos que $-\frac{1}{\sqrt{3}} < \tan \beta < 0$.

Un ángulo extremo es obtenido tomando $y = 1$, así que para $x \rightarrow \infty$ tenemos que $\tan \beta \rightarrow -1\sqrt{3}$; mientras que $y = x - 1$ y $x \rightarrow \infty$, tenemos que $\tan \beta \rightarrow 0$, entonces reuniendo los aspectos anteriores, tenemos que $11\pi/6 < \beta < 2\pi$, como se requería.

Usando el mismo argumento para la red cuadrada Bravais-Moiré; tenemos las desigualdades $0 < \frac{\theta}{2} < \frac{\pi}{6}$ y $0 < \frac{\pi}{6} - \frac{\theta}{2} < \frac{\pi}{6}$, y la forma inducida en la que

CAPÍTULO 2. PATRONES DE MOIRÉ EN REDES DE BRAVAIS

Tabla 2.4: Primeros pares de coprimos r y s para los vértices primitivos del súper hexágono Bravais Moiré ángulo conmensurable ($0^\circ < \theta < 60^\circ$).

r	5	8	7	11	9	14	13	12	11	17	13	20	19	18
s	1	2	1	3	1	4	3	2	1	5	1	6	5	4
θ	21.8	13.2	32.2	9.4	38.2	7.3	16.4	27.8	42.1	6.0	44.8	5.1	11.0	17.9
r	17	16	15	23	21	19	17	26	25	23	22	20	19	
s	3	2	1	7	5	3	1	8	7	5	4	2	1	
θ	26.0	35.6	46.8	4.4	15.2	29.4	48.4	3.9	8.3	18.7	25.0	40.3	49.6	

B_{rot} fue encontrada por la rotación $\theta = 2\frac{\theta}{2}$, el ángulo $\frac{\pi}{6} - \frac{\theta}{2}$ es determinado por $\mathbf{p}_{r,s,1}$ y $x > 0$, mientras tanto, $\frac{\theta}{2}$ es determinado por $\mathbf{q}_{r,s,1}$ y $x > 0$, ver figura 2.19; eso significa que $\tan \frac{\theta}{2} = \frac{3s-r}{\sqrt{3}(r+s)} = \frac{y-x}{\sqrt{3}(x+y)}$, y usando $\cos \theta = \frac{1-\tan^2 \frac{\theta}{2}}{1+\tan^2 \frac{\theta}{2}}$, tenemos que el ángulo conmensurable $0 < \theta < \frac{\pi}{3}$ esta dado por:

$$\theta = \cos^{-1} \left(\frac{r^2 + 6rs - 3s^2}{2(3s^2 + r^2)} \right), r = 2x + y, s = y, x, y \text{ coprimos, } x > 1, y > 0, x > y. \quad (2.15)$$

ver tabla 2.3. Siguiendo la misma metodología de la sección 2.2, podemos dar dos derivaciones más de 2.15. La primera prueba explora la fuerte simetría de los patrones de Moiré ver figura 2.19. En este caso, es claro que el segundo 12-ante de la red Bravais B_{norot} es una reflexión sobre la línea $y = \tan(\frac{\pi}{6})x$, del primer 12-ante de B_{norot} . Entonces la conmensurabilidad $0 < \theta < \frac{\pi}{3}$ exige que el vector posición del centro $p_1 = (\sqrt{3}r/2, 3s/2)$, en el primer 12-ante, es la reflexión, sobre $y = \frac{1}{\sqrt{3}}x$, del vector posición del centro w_1 , el cual pertenece al segundo 12-ante. Es fácil ver que $w_1 = (\sqrt{3}(3s+r)/4, 3(r-s)/4)$. Ahora nos preguntamos por θ tal que p_1 rotado en el sentido contrario de las manecillas del reloj, de tal manera que el coincide con su reflexión w_1 .

Figure 14

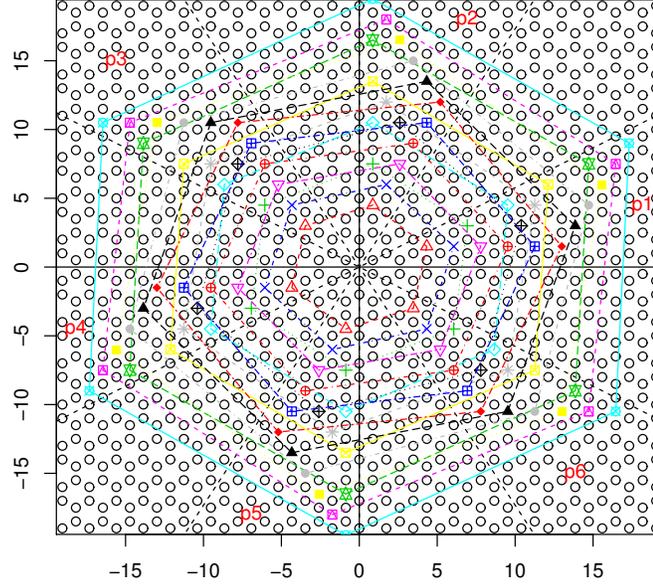


Figura 2.19: 12-antes 1, 3, 5, 7, 11 como dominios de los vértices primitivos de los patrones Bravais Moiré del súper hexágono, para $x = 2, 3, \dots, 7$ y $y = 1, 2, \dots, 6$ con centros indexados por $r = 2x + y$ y $s = y$.

Así que para todos los coprimos $r > 1$, $s > 0$, $r > s$, sea $\alpha_i > 0$, $\alpha_f > 0$ las direcciones de los vectores posición determinados por p_1 y w_1 , respectivamente; entonces $\theta_i < \theta < \theta_f$, y $\cos \theta = \cos(\theta_f - \theta_i) = \cos \theta_f \cos \theta_i + \sin \theta_f \sin \theta_i =$

$$\frac{4}{3(3s^2+r^2)} \left[\frac{\sqrt{3}(3s+r)}{4} \frac{\sqrt{3}r}{2} + \frac{3(r-s)}{4} \frac{3s}{2} \right] = \frac{-3s^2+6rs+r^2}{2(3s^2+r^2)}, \text{ como se requería.}$$

2.3.1. Número de puntos en la súper celda hexagonal.

Terminaremos la caracterización de la red hexagonal Bravais-Moiré con el número de puntos en cada súper celda primitiva hexagonal. Por la simetría de los patrones de Moiré bajo conmensurabilidad, es claro que hay una pequeña celda primitiva mas pequeña que el súper cuadrado; podemos graficar el súper hexágono primitivo en tres paralelogramos iguales y tomar uno de ellos para para replicar la red completa; pero esconde la construcción natural de los patrones del hexágono y algunas cuestiones como el número de puntos obtenidos artificialmente, porque en este punto podemos ver que hay dos tipos de súper hexágonos y cada uno tiene diferente número de puntos.

Comenzamos con el súper hexágono de la celda primitiva con vértices $p_i, i = 1, \dots, 6$, dados en (2.13). El área del súper hexágono es $\frac{3^{5/2}}{8}(3s^2 + r^2) = \frac{3^{5/2}}{2}(y^2 + xy + x^2)$, donde $r = 2x + y$, $s = y$, x, y números naturales coprimos, $y \geq 1$, $x \geq 2$ y $x > y$, como dijimos antes. El área de la base de la celda cuadrada en la red Bravais es $\frac{3^{3/2}}{2}$ (ver (2.10)), cuando la primitiva hexagonal contiene exactamente $\frac{3}{4}(3s^2 + r^2) = 3(y^2 + xy + x^2)$ celdas cuadradas de puntos de la red Bravais. En la red cuadrada Bravais B_{norot} (o B_{rot}), el patrón súper cuadrado periódico contiene un número entero T_s de la base de la celda cuadrada. Y dado que sus centros no pertenecen a la red, el número de puntos dentro del súper cuadrado es sólo T_s . En la red hexagonal Bravais tenemos las mismas condiciones. B_{norot} (o B_{rot}) contienen un número entero de hexágonos $T_h = 3(y^2 + xy + x^2)$ o celdas hexagonales de la base, y también sus centros no pertenecen a la red, por lo que no es

necesario considerarlos en el conteo. Pero debemos incrementar dos puntos en la base de la celda respecto a la base estándar de la celda base, entonces el número de puntos dentro del súper hexágono es $2T_h$. Como antes debemos considerar dos posibles conjuntos de puntos en el área confinada por los hexágonos: Tipo I. Todos los puntos están dentro del hexágono o tipo II. También hay puntos en los lados del hexágono (si restringimos los coprimos $x, y, y \geq 1, x \geq 2$ y $x > y$, habrá exactamente puntos en los bordes, porque la nueva celda base con dos puntos adicionales respecto a la base cuadrada. Por simetría los dos puntos adicionales en cada lado del súper hexágono, lo dividen en tres partes iguales. Nuevamente nos centraremos en uno de los Bravais del sistema, y entonces multiplicamos el resultado por dos. Las figuras 2.20 y 2.21 muestran el Bravais en dos direcciones, respectivamente, y para todos los posibles pares de coprimos x, y en el rango $x = 2, 3, \dots, 7$ y $y = 1, \dots, 6$. El primer tipo es ilustrado por el $[x, y]:(r = 2x + y, s = y)$ pares $[2, 1] : (5, 1), [3, 2] : (8, 2), [3, 1] : (7, 1), [4, 3] : (11, 3), [5, 4] : (14, 4), [5, 3] : (13, 3), [5, 1] : (11, 1), [6, 5] : (17, 5), [6, 1] : (13, 1), [7, 6] : (20, 6), [7, 5] : (19, 5), [7, 3] : (17, 3), [7, 2] : (16, 2)$. Los pares restantes $[4, 1] : (9, 1), [5, 2] : (12, 2), [7, 4] : (18, 4), [7, 1] : (15, 1)$ pertenecen al segundo tipo. Como en la red cuadrada, el conjunto del tipo II, suma la mitad de los puntos en los lados, porque los otros seis puntos pertenecen a la vecindad del súper hexágono Elegimos, por ejemplo, ambos puntos de trisección de los segmentos p_1p_2, p_2p_3 y p_3p_4 ; ver línea sólida y negra de la trisección en la figura 2.21.

Analíticamente, sea $p_{12,1}$ y $p_{12,2}$ los puntos de trisección del segmento

Figure 31

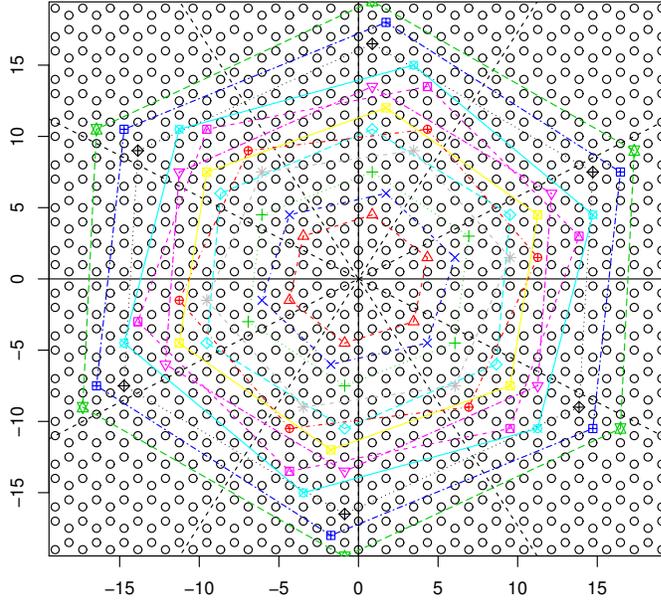


Figura 2.20: Súper celda primitiva hexagonal tipo I, conteniendo solo puntos internos. Ejemplo para los pares $(r = 2x + y, s = y), (5, 1), (8, 2), (7, 1), (11, 3), (14, 4), (13, 3), (11, 1), (17, 5), (13, 1), (20, 6), (19, 5), (17, 3), (16, 2)$.

p_1p_2 , listado en el sentido contrario a las agujas del reloj, de p_1 a p_2 . De manera similar definimos $p_{23,1}$ y $p_{23,2}$ en el segmento p_2p_3 ; y $p_{34,1}$ y $p_{34,2}$ en el segmento p_3p_4 . Nos centramos en $p_{12,1}$ y $p_{12,2}$, porque los restantes puntos de trisección son fácilmente obtenidos por un método de rotación recurrentemente $\frac{\pi}{3}$ en sentido antihorario de los mismos. De (2.13): $p_{12,1} = \left(\frac{5r-3s}{4\sqrt{3}}, \frac{r+5s}{4}\right) = \left(\frac{5x+y}{2\sqrt{3}}, \frac{x+3y}{2}\right)$, y $p_{12,2} = \left(\frac{2r-3s}{2\sqrt{3}}, \frac{r+2s}{2}\right) = \left(\frac{4x-y}{2\sqrt{3}}, \frac{2x+3y}{2}\right)$.

Una vez que p_1 es fijado en el primer 12-ante, es fácil verificar si el co-

Figure 32

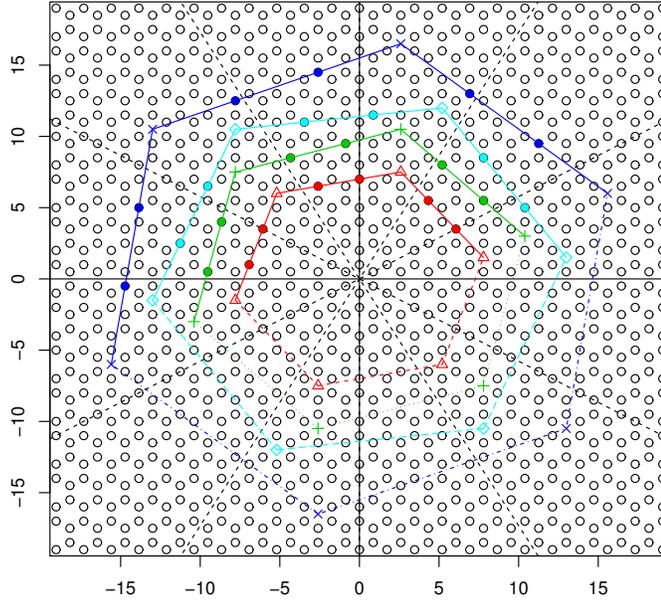


Figura 2.21: Súper celda primitiva hexagonal tipo II, conteniendo seis puntos de trisección adiconales en los lados p_1p_2 , p_2p_3 y p_3p_4 . Ejemplo para los pares $(r = 2x + y, s = y)$ $(9, 1), (12, 2), (18, 4), (15, 1)$.

respondiente súper hexágono pertenece al tipo I o II. Esto es suficiente comprobar las ecuaciones diofánticas $p_{12,i} = h_{i,r',s'}, i = 1, \dots, 6$; donde $h_{i,r',s'}$ son los puntos de la celda primitiva dada por (2.11) pero indexada por otros pares de enteros r', s' , que son las soluciones requeridas. Una vez la ecuación es satisfecha por $p_{12,1}$, los puntos $p_{12,2}$ pueden ser encontrados.

En resumen, el número de puntos N de la súper celda hexagonal Bravais-

CAPÍTULO 2. PATRONES DE MOIRÉ EN REDES DE BRAVAIS

Tabla 2.5: Número de puntos de la súper celda hexagonal Bravais-Moiré, para los primeros pares de coprimos x y y , $y \geq 1$, $x \geq 2$ y $x > y$, con $r = 2x + y$, $s = y$.

x	2	3	3	4	4	5	5	5	5
y	1	2	1	3	1	4	3	2	1
r	5	8	7	11	9	14	13	12	11
s	1	2	1	3	1	4	3	2	1
N	84	228	156	444	264	732	588	480	372
x	6	6	7	7	7	7	7	7	7
y	5	1	6	5	4	3	2	1	1
r	17	13	20	19	18	17	16	15	15
s	5	1	6	5	4	3	2	1	1
N	1092	516	1524	1308	1128	948	804	696	696

Moiré de tipo I, están dados por

$$N = 12(y^2 + xy + x^2), \quad x, y \text{ coprimos, with } y \geq 1, x \geq 2 \text{ and } x > y. \quad (2.16)$$

Mientras tanto, el número de puntos N de la súper celda hexagonal Bravais-Moiré de tipo II, está dada por

$$N = 12(y^2 + xy + x^2) + 12, \quad \text{if } p_{12,1} = h_{i,r',s'}, i = 1, \dots, 6, \quad (2.17)$$

para un par de enteros $r' = 2m' + n'$, $s' = n'$ con m', n' coprimos positivos.

Algunos ejemplos están dados en la tabla 2.4.1

2.4. Red Bravais-Moiré cuadrada centrada

En esta sección se muestra la forma de calcular los vectores primitivos para una celda cuadrada centrada Bravais Moiré, así como el ángulo de conmensurabilidad haciendo uso de las ecuaciones diofánticas y el número de puntos o átomos en la celda primitiva unitaria para este tipo de patrones.

La construcción de ésta red Bravais-Moiré es esencialmente la misma del caso no centrado. Comenzamos con la misma red $k\frac{\sqrt{2}}{2}Z \times k\frac{\sqrt{2}}{2}Z$, pero no realizamos ninguna traslación. Llamaremos la red no rotada denotada por B_{norot} . Como antes es la misma constante introducida y establecida como $k = 1$, para simplificar.

La segunda diferencia aparece en los vectores primitivos que expanden la red, simplemente duplica la base cuadrada de la red, a saber:

$$\begin{aligned}\mathbf{u}_1 &= 2\sqrt{2} \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix} \\ \mathbf{u}_2 &= 2\sqrt{2} \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix}\end{aligned}\tag{2.18}$$

Los aspectos restantes se construyen directamente. Por ejemplo, cualquier centro de la celda cuadrada de la red puede ser representado por el vector de posición

$$\mathbf{c}_{r,s} = r\mathbf{u}_1 + s\mathbf{u}_2,$$

CAPÍTULO 2. PATRONES DE MOIRÉ EN REDES DE BRAVAIS

con $r, s \in \mathbb{Z}$.

En física, B_{norot} puede ser visto como una red cuadrada centrada Bravais. La figura 2.22 muestra la red B_{norot} para $r, s = -4, -3, \dots, 3, 4$, el centro $c_{2,1}$ y los vectores primitivos.

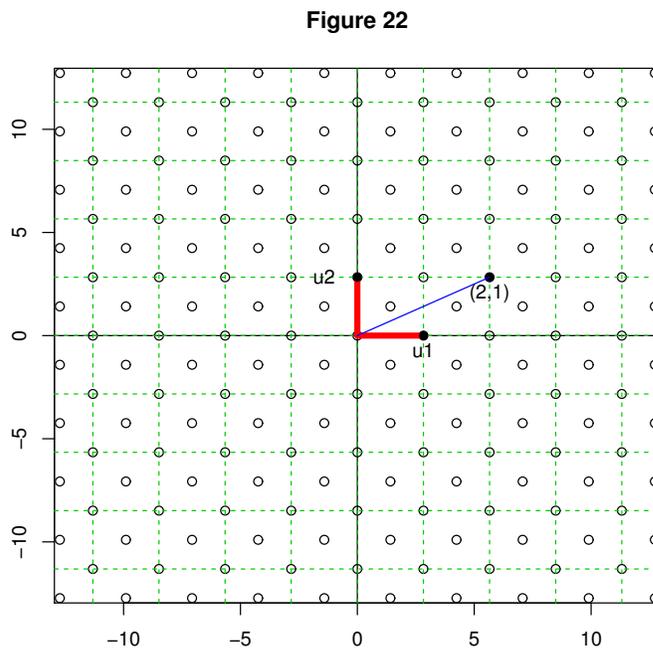


Figura 2.22: Red B_{norot} para $r, s = -4, -3, \dots, 3, 4$, vectores primitivos $\mathbf{u}_1, \mathbf{u}_2$ y el centro $\mathbf{c}_{r,s} = r\mathbf{u}_1 + s\mathbf{u}_2$, for $r = 2, s = 1$.

Así, para cada centro, el vector posición de los cuatro puntos en la celda cuadrada centrada de la red están dados por: $\mathbf{c}_{r,s} + \sqrt{2} \begin{pmatrix} \pm 1 \\ \pm 1 \end{pmatrix}$ y $\mathbf{c}_{r,s} +$

$$\sqrt{2} \begin{pmatrix} \pm 1 \\ \mp 1 \end{pmatrix}.$$

Observe que el centro del sistema de referencia se obtiene cuando $r = s = 0$

Una vez más, los patrones de Moiré llegan cuando una segunda red de Bravais B_{rot} , inicialmente coincidente con B_{norot} , es rotada, alrededor del mismo centro de referencia, por un ángulo θ . La rotación θ se define como un ángulo conmensurable si el vector posición $\mathbf{c}_{r,s}$, para un par de enteros r y s de B_{norot} coincide con el vector posición $\mathbf{c}_{r',s'}$, para un par de enteros r' y s' de B_{rot} . Como era de esperar, los patrones resultantes asociados a la rotación conmensurable de ambas redes, forman matrices súper cuadradas periódicas de puntos centrados en un punto de la red, y es replicado por una súper celda cuadrada con vectores posición

$$\begin{aligned} \mathbf{p}_{r,s,1} &= \mathbf{c}_{r,s} \\ \mathbf{p}_{r,s,2} &= \mathbf{R}(-\pi/2) \mathbf{p}_{r,s,1} \\ \mathbf{p}_{r,s,3} &= \mathbf{R}(-\pi) \mathbf{p}_{r,s,1} \\ \mathbf{p}_{r,s,4} &= \mathbf{R}(-3\pi/2) \mathbf{p}_{r,s,1}, \end{aligned} \tag{2.19}$$

para el mismo par adecuado de enteros, (r, s) en el primer octante, explicado en la red cuadrada no centrada. En términos del sistema de referencia no

rotado, los vértices primitivos están situados en:

$$\begin{aligned}
 p_1 &= (2\sqrt{2}r, 2\sqrt{2}s) \\
 p_2 &= (-2\sqrt{2}s, 2\sqrt{2}r) \\
 p_3 &= (-2\sqrt{2}r, -2\sqrt{2}s) \\
 p_4 &= (2\sqrt{2}s, -2\sqrt{2}r).
 \end{aligned} \tag{2.20}$$

Por ejemplo, las figuras 2.23 a 2.27 muestran los patrones cuadrados centrados Bravais-Moiré de rotación conmensurable asociados a los r, s pares: $(2, 1), (3, 2), (3, 1), (4, 3)$ y $(4, 2)$.

Como en el caso anterior, la figura 2.27 verifica que sólo los enteros coprimos r y s producen diferentes patrones de Moiré, en este caso, está claro que el patrón de Moiré asociado a $(2, 1)$ es el mismo que $(2w, w)$, para todo número natural w .

Siguiendo exactamente el mismo análisis dado en el caso cuadrado no centrado, hay cuatro dominios naturales para alcanzar la conmensurabilidad, es decir, para hacer coincidir un centro de B_{norot} con un centro de B_{rot} después de la rotación. Podemos deducir que el dominio de los vértices primitivos $p_i, i = 1, 2, 3, 4$ son el 1-er, 3-er, 5° y 7° octante respectivamente.

Nuevamente debemos notar que todos los vértices primitivos se dan sólo en términos de los coprimos $s > 0, r > 1, r > s$; esos enteros r, s están en el primer octante, limitado por los rayos $x > 0$ y $x > y$.

Aquí la tabla 2.2 también es válida para el caso no centrado. Proporciona

Figure 23

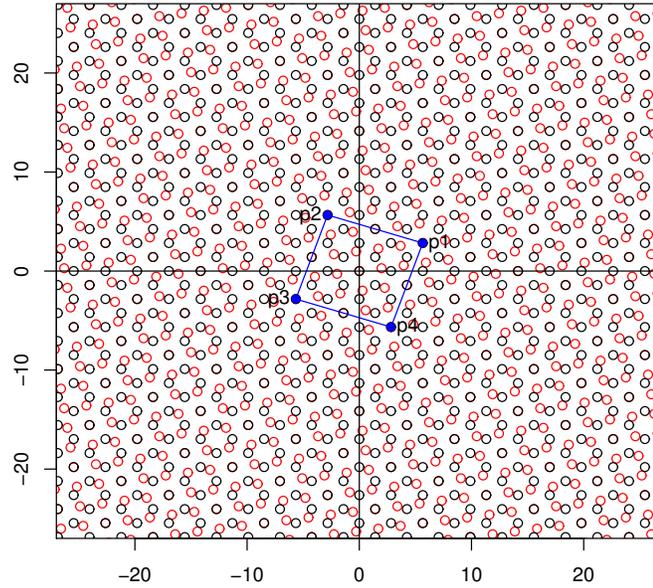


Figura 2.23: Patrones Bravais-Moiré cuadrados centrados de rotación conmensurable asociados con los pares $(2, 1)$.

una lista de los primeros pares r y s , y finalmente, el diagrama correspondiente de la figura 2.7 se muestra en la figura 2.28, también representa los puntos asociados de los cuadrados primitivos centrados en los dominios correspondientes.

Finalmente, mediante una copia literal de las derivaciones proporcionadas en la sección 2.2, obtenemos el mismo ángulo de conmensurabilidad $0 < \theta < \frac{\pi}{2}$ de (2.21):

Figure 24

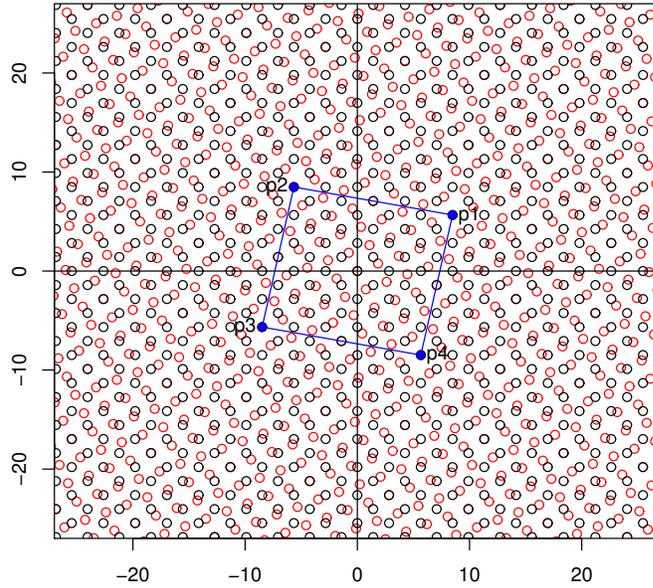


Figura 2.24: Patrones Bravais-Moiré cuadrados centrados de rotación conmensurable asociados con los pares (3, 2).

$$\theta = \cos^{-1} \left(\frac{2rs}{r^2 + s^2} \right), r, s \text{ coprimos, } r > 1, s > 0, r > s, \quad (2.21)$$

ver Tabla 2.2.

Figure 25

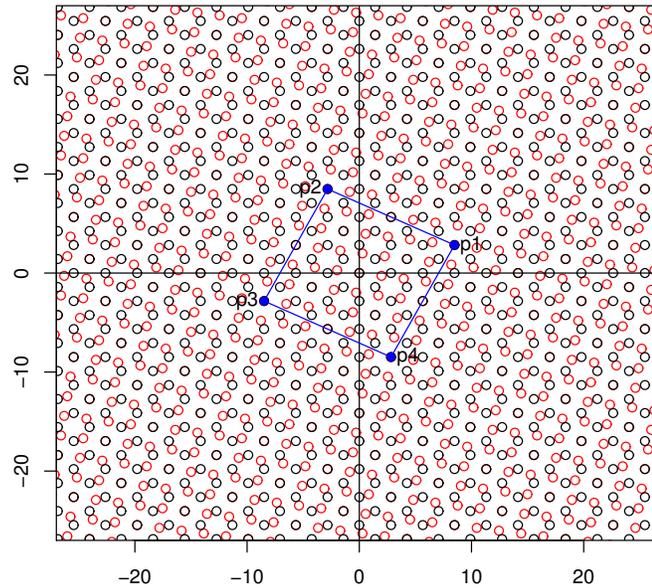


Figura 2.25: Patrones Bravais-Moiré cuadrados centrados de rotación conmensurable asociados con los pares $(3, 1)$.

2.4.1. Número de puntos en la celda súper cuadrada centrada.

Como de costumbre, terminamos la caracterización de esta red Bravais-Moiré encontrando el número de puntos en cada súper celda primitiva cuadrada centrada. Una vez más, la simetría de los patrones de Moiré bajo conmensurabilidad, proporciona un primitivo más pequeño que el súper cuadrado; podríamos dividir el cuadrado primitivo en dos triángulos iguales y

Figure 26

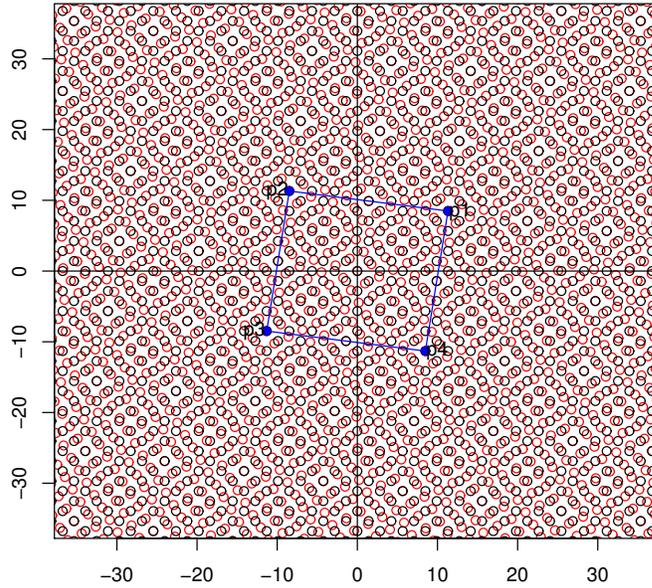


Figura 2.26: Patrones Bravais-Moiré cuadrados centrados de rotación conmensurable asociados con los pares $(4, 3)$.

tomar uno de ellos para replicar la red completa; pero esconde la naturaleza de construcción natural de los patrones de Moiré.

Comience con la celda primitiva súper cuadrada con vértices $p_i, i = 1, 2, 3, 4$, dada por (2.20). El área del cuadrado es $16(r^2 + s^2)$ y el área de la celda cuadrada base de puntos en la red Bravais es 8 (ver (2.18)), entonces, el cuadrado primitivo contiene exactamente $2(r^2 + s^2)$ celdas cuadradas de puntos de la red de Bravais. Como es de esperar ésta es la misma proporción de áreas obtenidas en la red Bravais no centrada; pero el número de puntos

Figure 27

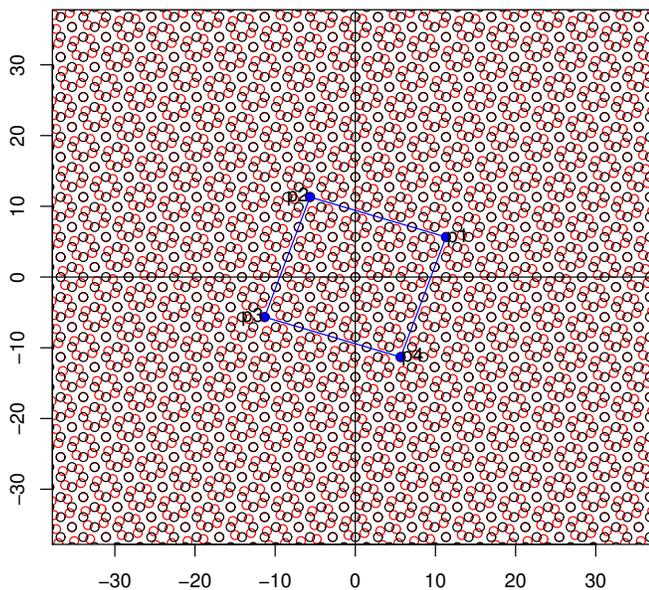


Figura 2.27: Patrones Bravais-Moiré cuadrados centrados de rotación conmensurable asociados con los pares $(4, 2)$.

confinados por él es diferente, porque los vértices de la celda base corresponden a los puntos de la red. Simplemente duplica los puntos en la red súper cuadrada primitiva centrada. Por simetría, debemos contar sólo un vértice del súper cuadrado y dos puntos medios de dos lados del súper cuadrado. La figura 2.29 muestra el Bravais no rotado para todos los posibles pares de coprimos en el rango $r = 2, 3, \dots, 7$ y $s = 1, \dots, 6$.

Para los tres puntos de la frontera hemos elegido, por ejemplo, el vértice p_1 y el punto medio de los segmentos p_1p_2 y p_1p_4 , ver la línea continua

Figure 28

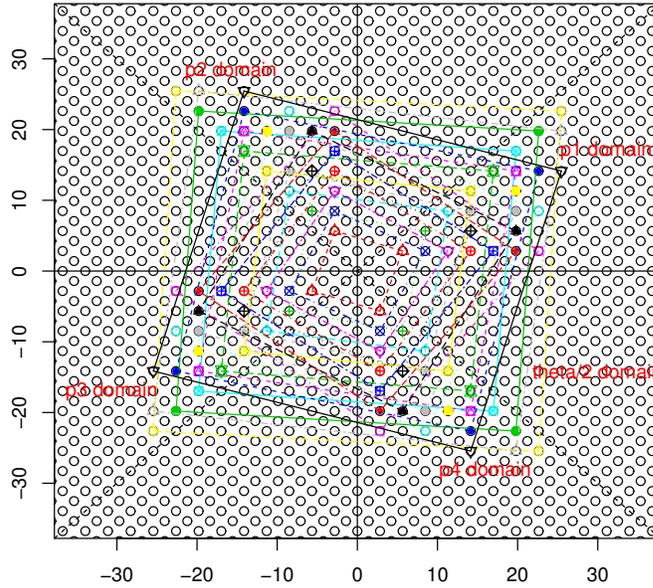


Figura 2.28: Octantes 1, 3, 5, 7 como dominio de los vértices primitivos de los patrones Bravais Moiré del súper cuadrado centrado, para $r = 2, 3, \dots, 9$ y $s = 1, 2, \dots, 8$.

y los puntos medios en negrita en la figura 2.29. Tenga en cuenta que los cuatro puntos centrales mencionados se encuentran en los octantes 2, 4, 6, 8, respectivamente, ver de nuevo la figura 2.29.

Analíticamente, si p_{12} y p_{14} son los correspondientes puntos medios, entonces el vector de posición de p_{14} es sólo $\pi/2$ girado en el sentido de las agujas del reloj del vector posición p_{12} . Entonces sólo tenemos que estudiar uno de ellos. De (2.20): $p_{12} = \left(\frac{r-s}{\sqrt{2}}, \frac{r+s}{\sqrt{2}}\right)$, que pertenece al segundo octante. Por

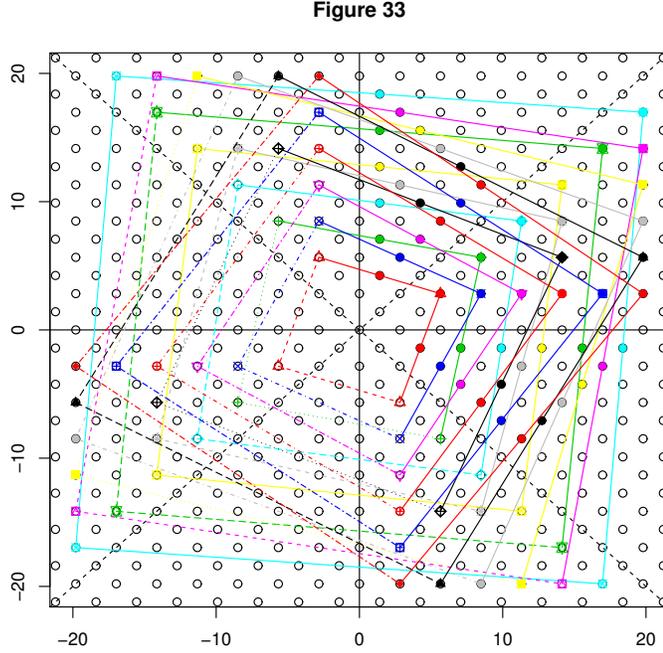


Figura 2.29: Súper celda primitiva cuadrada centrada. Ejemplo para coprimos en el dominio $r = 2, 3, \dots, 7$ y $s = 1, \dots, 6$.

(2.18), las celdas en el súper cuadrado deben satisfacer las relaciones diofánticas $\frac{r-s}{\sqrt{2}} = m\sqrt{2}$ (2.20). El área del cuadrado es $16(r^2 + s^2)$ y $\frac{r+s}{\sqrt{2}} = n\sqrt{2}$, para m, n coprimos, $m > 0, n > 2, m < n$. Esto implica que $r = m + n, s = n - m$, y notando que m, n son coprimos, $m > 0, n > 2, m < n$, tenemos que r, s son coprimos y $r > 1, s > 0, r > s$, que es el dominio completo para p_1 en el primer octante, entonces hemos probado que hay sólo una clase de conjunto de puntos confinados por el súper cuadrado centrado. Resumiendo esto tenemos que el número de puntos N del súper cuadrado centrado Bravais-Moiré está

(2.20).

Tabla 2.6: Número de puntos de la súper celda cuadrada Bravais-Moiré, para los primeros pares de coprimos r y s , $s > 0, r > 1, r > s$.

r	2	3	3	4	4	5	5	5	5
s	1	2	1	3	1	4	3	2	1
N	40	104	80	200	136	328	272	232	208

r	6	6	7	7	7	7	7	7
s	5	1	6	5	4	3	2	1
N	488	296	680	592	520	464	424	400

dado por

$$N = 8(r^2 + s^2), \quad \text{for coprimos } r, s, r > 1, s > 0, r > s. \quad (2.22)$$

Algunos ejemplos se dan en la tabla 2.4.1

2.4.2. Conclusiones.

A lo largo de este capítulo se estudiaron técnicas para encontrar celdas unitarias de sistemas planos de bicapas de dos redes de puntos rotadas entre sí. A través de diversas técnicas matemática en el caso de celdas de Bravais cuadradas y hexagonales, se mostró que es posible encontrar una solución analítica que determine: el ángulo de rotación, el número de puntos en la celda y los vectores de esta. Estas soluciones analíticas quedan determinadas únicamente por un par de números coprimos y por la base de la celda unitaria escogida, la cual puede ser escalada para obtener de esta forma una solución general.

Es importante resaltar que encontrar el ángulo de conmensurabilidad des-

2.4. RED BRAVAIS-MOIRÉ CUADRADA CENTRADA

de diferentes enfoques matemático, tiene aplicación para celdas Bravais bidimensionales cuadrada y hexagonal. Es más estas soluciones pueden ser generalizadas para todas las redes de Bravais bidimensionales. El aporte de este método radica en que tiene gran potencial de aplicación en redes cristalográficas diferentes, tal y como se muestra en el caso del pentagrafeno.

CAPÍTULO 3

Teoría de Formas para obtener celdas cuasicomensurables

En este capítulo se desarrollan las nociones básicas de la Teoría de Formas, dando cada una de las definiciones necesarias para trabajar en el espacio de formas y definir el concepto de distancia de Riemman. Para finalizar se muestra como calcular la distancia de Riemman para el caso de un patrón hexagonal, el cual constituye la base para la obtención de las celdas para ángulos no conmensurables.

3.1. Introducción a la Teoría de Formas

Los objetos están en todas partes, naturales y hechos por el hombre. Los avances en tecnología han llevado a la recolección de información geométrica y el estudio de la forma de los objetos está incrementando su importancia. El análisis de formas es de gran interés en una gran variedad de disciplinas.

Algunas aplicaciones específicas se dan en la biología, medicina, análisis de imágenes, arqueología, geografía, geología, agricultura y genética. La palabra forma es usada comúnmente en el lenguaje diario, usualmente refiriéndose a la apariencia de un objeto. [20]

3.1.1. Definiciones

3.1.1 *Forma* Es toda la información geométrica que resulta cuando los efectos de traslación, rotación y escala son filtrados de un objeto.

La forma de un objeto es invariante bajo transformaciones euclidianas similares de traslación, escala y rotación. Por ejemplo, la forma de un cráneo humano consiste en todas las propiedades geométricas del cráneo que son invariantes cuando este es trasladado, rotado y escalado en un sistema arbitrario de coordenadas. Dos objetos tienen la misma forma si ellos pueden ser trasladados, re escalados y rotados cada uno tal que coincidan exactamente, es decir, si los objetos son similares.

En la práctica interesa comparar objetos con diferentes formas y se requiere una manera de medir su forma, alguna noción de distancia entre formas y métodos del análisis estadístico de formas.

3.1.2 (Tamaño y forma) *Es toda la información geométrica que queda cuando los efectos de rotación y traslación se retiran de un objeto.*

CAPÍTULO 3. TEORÍA DE FORMAS PARA OBTENER CELDAS CUASICOMENSURABLES

Dos objetos tienen el mismo tamaño y forma si pueden ser rotados y trasladados entre sí de tal manera que coincidan exactamente.

La forma se describe mediante la localización de un número finito de puntos en cada muestra que se denominan landmarks o puntos de referencia.

3.1.3 (Landamark) *Es un punto de correspondencia en cada objeto tal que coincide entre y dentro de la población. Existen tres tipos básicos de landmarks, anatómicos, matemáticos y pseudo landmarks.*

3.1.4 (Label) *Es un nombre o número asociado con un Landmark e identifica que pares de landmarks corresponden cuando se comparan dos objetos. Tales landmarks son llamados etiquetados.*

Ya se ha dicho que la forma de un objeto está dada por la información geométrica que resulta cuando se filtra traslación, rotación y escala. La rotación de una configuración está dada por la post-multiplicación de la matriz de configuración X por una matriz de rotación Γ . Para estudiar los aspectos geométricos de la forma se describen los siguientes conceptos

3.1.5 (Espacio de formas) *Una matriz de rotación $m \times m$ satisface $\Gamma^T \Gamma = \Gamma \Gamma^T = I_m$ y $|\Gamma| = +1$. El conjunto de todas las matrices de rotación es conocido como el grupo ortogonal especial $(SO)_m$.*

3.1.6 (Preforma) *La preforma de una matriz de configuración está dada por $Z = \frac{X_H}{\|X_H\|} = \frac{HX}{\|HX\|}$ La cual es invariante bajo traslación y escala de la configuración original.*

3.1. INTRODUCCIÓN A LA TEORÍA DE FORMAS

Se obtiene una traslación mediante la adición de un m -vector constante a las coordenadas de cada punto. Un escalamiento isotrópico se obtiene al multiplicar X por un número positivo.

Se requiere un concepto de distancia entre dos puntos para definir totalmente el espacio métrico no euclidiano de la forma. Se consideran dos matrices de configuración con k puntos en m dimensiones X_1 y X_2 con preformas Z_1 y Z_2 . Se minimiza sobre rotación y escala para encontrar la distancia euclidiana más cercana entre Z_1 y Z_2 .

3.1.7 (Distancia Procrustes Total d_F) *La distancia Procrustes total entre X_1 y X_2 es :*

$$d_F(X_1, X_2) = \inf_{re(SO)_m, \beta \in \mathbb{R}} \|Z_2 - \beta Z_1 \Gamma\| \quad (3.1)$$

$$\text{donde } Z_r = \frac{HX_r}{\|HX_r\|}, \quad r = 1, 2 \quad (3.2)$$

Se pueden sugerir distancias alternativas:

3.1.8 (Distancia Procrustes Total d_P) *Se obtiene haciendo coincidir Z_1 y Z_2 de X_1 y X_2 lo más estrechamente bajo rotación pero no escala, así*

$$d_P(X_1, X_2) = \inf_{re(SO)_m} \|Z_2 - Z_1 \Gamma\| \quad (3.3)$$

$$\text{donde } Z_j = \frac{HX_j}{\|HX_j\|}, \quad j = 1, 2 \quad (3.4)$$

3.1.9 (Distancia Procrustes $\rho(X_1, X_2)$) Es la distancia más cercana entre los círculos Z_1 y Z_2 en la esfera de preformas donde $Z_j = \frac{HX_j}{\|HX_j\|}$. Desde la trigonometría se puede ver que la distancia Procrustes es:

$$\rho(X_1, X_2) = 2 \arcsin \left(\frac{d_P(X_1, X_2)}{2} \right) = \arcsin \left(\sum_{i=1}^m \lambda_i \right)$$

La relación entre d_F , d_P y ρ se resume en la siguiente tabla:

Distancia	Notación	Formula	Rango
Distancia Procrustes Total	d_F	$\left\{ 1 - \left(\sum_{i=1}^m \lambda_i \right)^2 \right\}^{1/2}$	$0 \leq d_F \leq 1$
Distancia Procrustes Parcial	d_P	$\sqrt{2} \left(1 - \sum_{i=1}^m \lambda_i \right)^{1/2}$	$0 \leq d_P \leq \sqrt{2}$
Distancia Procrustes	ρ	$\arccos \left(\sum_{i=1}^m \lambda_i \right)$	$0 \leq d_F \leq 1$

Tabla 3.1: Distancias Procrustes en el espacio de formas

3.2. Patrones de Moiré entre dos Capas de Grafeno: Caso no conmensurable

Se considera la familia de ángulos conmensurables entre dos capas de grafeno definida por

$$\cos(\theta) = \frac{m^2 + 4mn + n^2}{2(m^2 + mn + n^2)}$$

donde m y n son enteros positivos, sin pérdida de generalidad se puede elegir. Si bien es racional, es fácil ver que es irracional para valores enteros de m

3.2. PATRONES DE MOIRÉ ENTRE DOS CAPAS DE GRAFENO: CASO NO CONMENSURABLE

y n . Familias más generales de ángulos, derivadas por [10], y de interés en otros contextos, como cubrimientos racionales de esferas en m -dimensiones, tienen la notable particularidad que para valores enteros de sus parámetros, díganse u y v , ambas funciones coseno y sinusoidales son de valores racionales. Otros recubrimientos permiten valores reales para u y v , resultando:

$$\cos(\varphi) = \frac{v(v - 2u)}{v^2 - 2uv + 2u^2}$$

con $0 < \varphi < 60^\circ$. Reparametrizando tenemos que sí y sólo sí:

$$f = \frac{(\sqrt{3} - 1)m^2 + 2mn - (\sqrt{3} + 1)n^2}{2(m^2 + 4mn + n^2)}$$

Para otros valores de f , los ángulos φ no son conmensurables, pero ciertamente pueden usarse para acotar superior e inferiormente, con la precisión que se desee, cualquier ángulo conmensurable θ . Esto permite estudiar transiciones de un ángulo conmensurable a otro y observar además su influencia en la periodicidad de la súper celda unitaria usual. Para realizar las comparaciones entre transiciones se necesita además establecer un criterio analítico-numérico que permita parametrizar las diferencias.

Una de tantas teorías apropiadas puede ser la llamada shape theory; en un reporte técnico anterior de F. Caro-Lopera [14] se demostró que usando la distancia de Riemann se obtiene que la periodicidad entre dos capas de grafeno rotadas un ángulo conmensurable se da cada n hexágonos ($m > n$), en una

de las dos capas. Usando este principio, se puede parametrizar la diferencia transicional de un ángulo conmensurable a cualquier otro mayor o menor.

3.2.1. Metodología

Como ya se dijo, para obtener una estructura periódica en una nano estructura plana, una celda unitaria de la capa superior rotada debe encajar en una celda de la capa inferior que no está rotada. Sólo hay ciertos ángulos que cumplen esas condiciones de conmensurabilidad y determinan las propiedades físicas de las nanoestructuras planas. Pero para estudiar las transiciones vía ángulos no conmensurables (entre dos ángulos conmensurables) se requiere del uso de otras teorías que muestren la cuasi periodicidad necesaria para hacer los análisis que se realizan con ángulos conmensurables y medir las propiedades físicas bajo estos ángulos.

Para encontrar la celda mínima, se denomina una forma inicial en dos capas superpuestas, es decir se define un patrón llamado "template", conformado por las posiciones de los doce átomos formados en el patrón de Moiré, situado en la posición $(0, 0)$ del plano. La geometría del hexágono permite buscar la periodicidad en un sentido del plano, haciendo uso de la distancia Procustes, determinado:

- Las coordenadas del template(matriz de tamaño $(6, 2)$, en adelante \mathbf{T}
- Las coordenadas del objeto a comparar (matriz de tamaño $(6, 2)$), en adelante \mathbf{G}

3.2. PATRONES DE MOIRÉ ENTRE DOS CAPAS DE GRAFENO: CASO NO CONMENSURABLE

- Eliminar la traslación mediante la helmertización del template y el objeto, multiplicando cada uno por la submatriz de Helmert con $k = 6$:

$$\begin{pmatrix} -1/\sqrt{2} & 1/\sqrt{2} & 0 & 0 & 0 & 0 \\ -1/\sqrt{6} & -1\sqrt{6} & 2\sqrt{6} & 0 & 0 & 0 \\ -1/\sqrt{12} & -1\sqrt{12} & -1\sqrt{12} & 3\sqrt{12} & 0 & 0 \\ -1/\sqrt{20} & -1/\sqrt{20} & -1/\sqrt{20} & -1/\sqrt{20} & 4/\sqrt{20} & 0 \\ -1\sqrt{30} & -1\sqrt{30} & -1\sqrt{30} & -1\sqrt{30} & -1\sqrt{30} & 5\sqrt{30} \end{pmatrix}$$

El concepto de Helmertización hace referencia, como ya se dijo, a la eliminación de la traslación de la configuración original., para ello se requiere definir la sub matriz Helmert, la cual es usada para dicho fin.

La submatriz Helmert H es la $(k - 1) \times k$ matriz Helmert sin la primera fila. La matriz Helmert completa H_F , la cual es usada comunmente en estadística, es una matriz cuadrada $k \times k$ ortogonal con elementos de la primera fila iguales a $\frac{1}{\sqrt{k}}$, y las restantes filas son ortogonales a la primera fila. Retiramos la primera fila para que la transformación HX no dependa de la localización de la configuración original.

Template Helmertizado **HT** Objeto Helmertizado **HG**

- Remover la escala, encontrando las preformas Z_1 y Z_2

$$\text{donde } Z_1 = \frac{HT}{\|HT\|},$$

CAPÍTULO 3. TEORÍA DE FORMAS PARA OBTENER CELDAS CUASICOMENSURABLES

$$\text{donde } \|HT\| = \sqrt{\text{Traza}[(HT)^T * (HT)]}$$

$$\text{entonces } Z_1 = \frac{HT}{\sqrt{\text{Traza}[(HT)^T * (HT)]}},$$

De igual forma se tiene que

$$\text{donde } Z_2 = \frac{HG}{\|HG\|},$$

$$\text{donde } \|HG\| = \sqrt{\text{Traza}[(HG)^T * (HG)]}$$

$$\text{entonces } Z_2 = \frac{HG}{\sqrt{\text{Traza}[(HG)^T * (HG)]}},$$

La distancia entre los dos objetos es la distancia total Procrustes definida por la raíz cuadrada de los autovalores de la matriz de comparación dada por:

3.2. PATRONES DE MOIRÉ ENTRE DOS CAPAS DE GRAFENO: CASO NO CONMENSURABLE

$$S = Z_1^T Z_2 Z_2^T Z_1$$

definiendo

$$r = \sqrt{\text{Autovalores}(S)}$$

Para determinar si ambos objetos, template \mathbf{T} y objeto \mathbf{G} , tienen la misma forma, se calcula la distancia de Riemman, que está dada por

$$\text{Riemman} = \text{arcos}(\text{sum}(r))$$

Si la distancia es cero, ambos objetos, \mathbf{T} y \mathbf{G} , tienen la misma forma.

3.2.2. Resultados

Como se dijo en la sección anterior, la Teoría de Formas proporciona una familia de ángulos cuasiconmensurables, calculados entre dos ángulos conmensurables haciendo uso del concepto de distancia. Una vez calculada la distancia de Riemman, cuyo resultado sea cero, proporcionan el número de hexágonos distantes entre el template y el objeto, los cuales constiyuyen el tamaño de la celda primitiva. En la 3.2 se presentan los ángulos conmensurables 0.380 rad y 0.230 rad, y los ángulos no conmensurables entre ellos, así como el número de hexágonos que los separan.

Para hacer un análisis de la metodología propuesta se estudiarán ángulos no conmensurables entre los dos primeros ángulos conmensurables definidos por la familia de ángulos de la ecuación 3.2, es decir para los pares de coprimos (n, m) $(2, 1)$ y $(3, 2)$.

En este caso, para cada ángulo no conmensurable entre los primeros dos conmensurables mencionados se presentan cuasiperiodicidades generando una

CAPÍTULO 3. TEORÍA DE FORMAS PARA OBTENER CELDAS CUASICOMENSURABLES

Tabla 3.2: Angulos no conmensurables entre dos angulos conmensurables y distancia en número de hexagonos.

Ángulo (rad)	Número de Hexágonos
0.380	7
0.368	29
0.355	15
0.343	36
0.330	8
0.318	22
0.305	23
0.293	24
0.280	116
0.268	154
0.255	96
0.242	18
0.230	19

supercelda. La distancia de Riemman proporciona el número de hexagonos a los que se encuentra el template en una dirección seleccionada (en este caso en la dirección Y). Como ejemplo, en la tabla 3.2, se muestran los resultados obtenidos para algunos los ángulos no conmensurables.

Es interesante anotar que además de ello se presentan otras distancias que muestran ciertas patrones de periodicidad en puntos donde la distancia de Riemann no es cero. Las siguientes figuras muestran el comportamiento de dichas distancias en once ángulos no conmensurables que van desde el mayor (0.380 rad) hasta el menor (0.230 rad), donde se evidencia una cuasiperiodicidad en diferentes puntos.

Se observa que en los ángulos conmensurables, las distancias de Riemman

3.2. PATRONES DE MOIRÉ ENTRE DOS CAPAS DE GRAFENO: CASO NO CONMENSURABLE

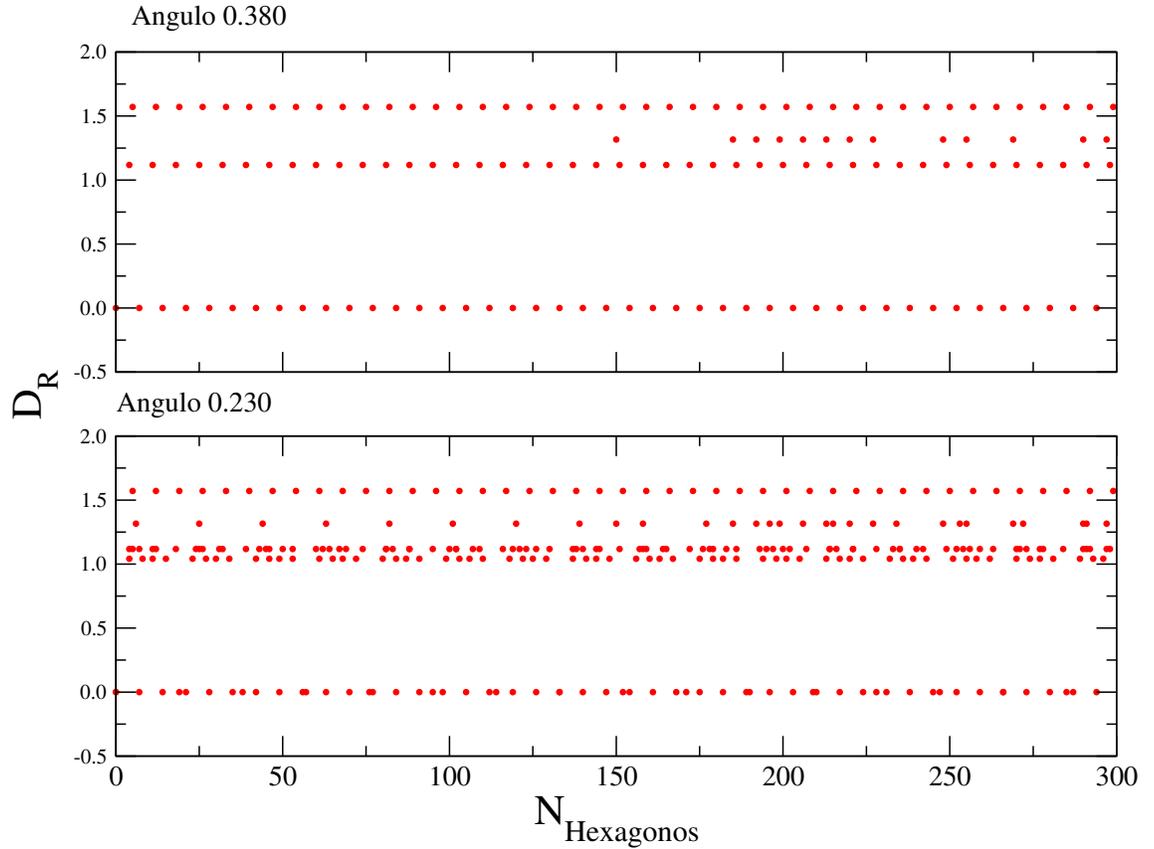


Figura 3.1: Distancias de Riemman calculadas en angulos commensurables (0.380 rad y 0.230 rad) para calcular la supercelda - distancias en cero implican periodicidad

cuyo resultado es cero, presentan una periodicidad evidente. De la misma manera se encuentran distancias que, aunque no son cero, dan cuenta de periodicidades en esos valores.

Se destaca además en los ángulos no commensurables, que aunque no hay una periodicidad, se ve como hay una repetición de las distancias, generando repeticiones del template y por lo tanto la celda primitiva es de mayor

CAPÍTULO 3. TEORÍA DE FORMAS PARA OBTENER CELDAS CUASICOMENSURABLES

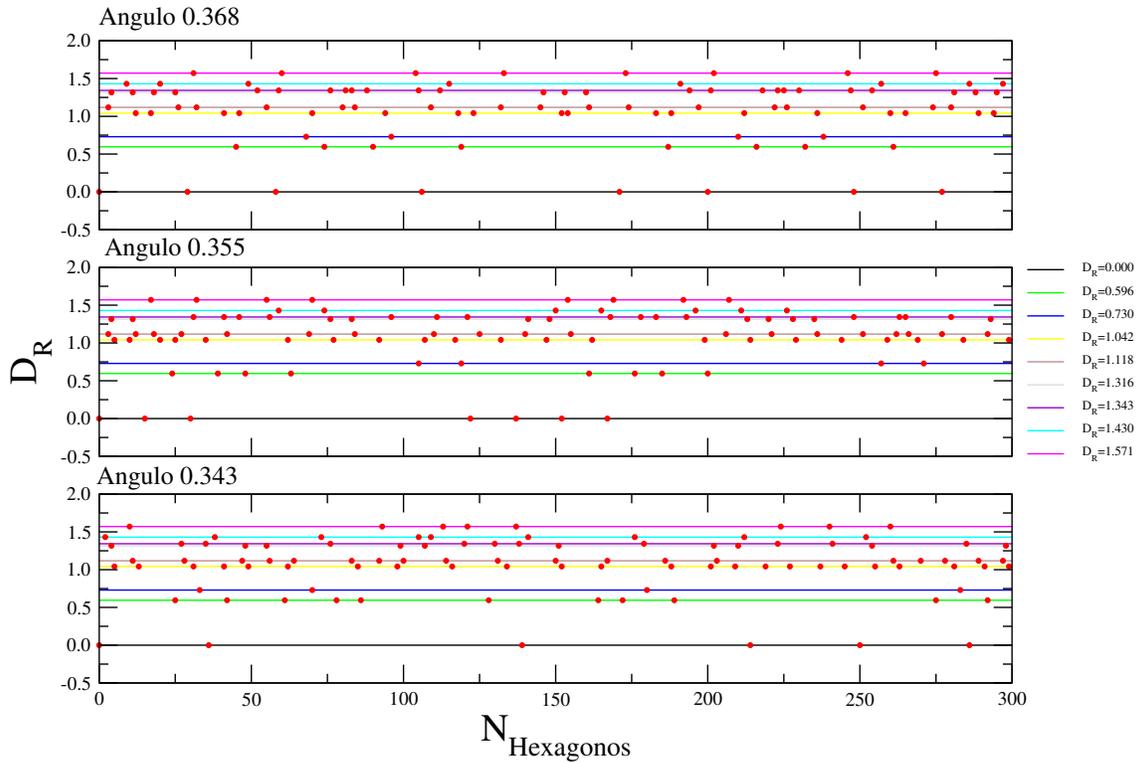


Figura 3.2: Distancias de Riemman en ángulos no conmensurables (0.368 rad, 0,355 rad y 0.343 rad)

tamaño.

Para hacer un análisis de las transiciones geométricas generadas entre dos ángulos conmensurables en las figuras 3.6 y 3.7 se muestran los patrones de Moiré y las respectivas transiciones.

En las figuras 3.6 y 3.7 se observa el cambio de los patrones de Moiré, desde el ángulo de mayor tamaño (0.380 rad) hasta el más pequeño (0.230 rad). En el primer ángulo el patrón está formado por una serie de anillos que se van desvaneciendo en los ángulos no conmensurables hasta llegar al

3.2. PATRONES DE MOIRÉ ENTRE DOS CAPAS DE GRAFENO: CASO NO CONMENSURABLE

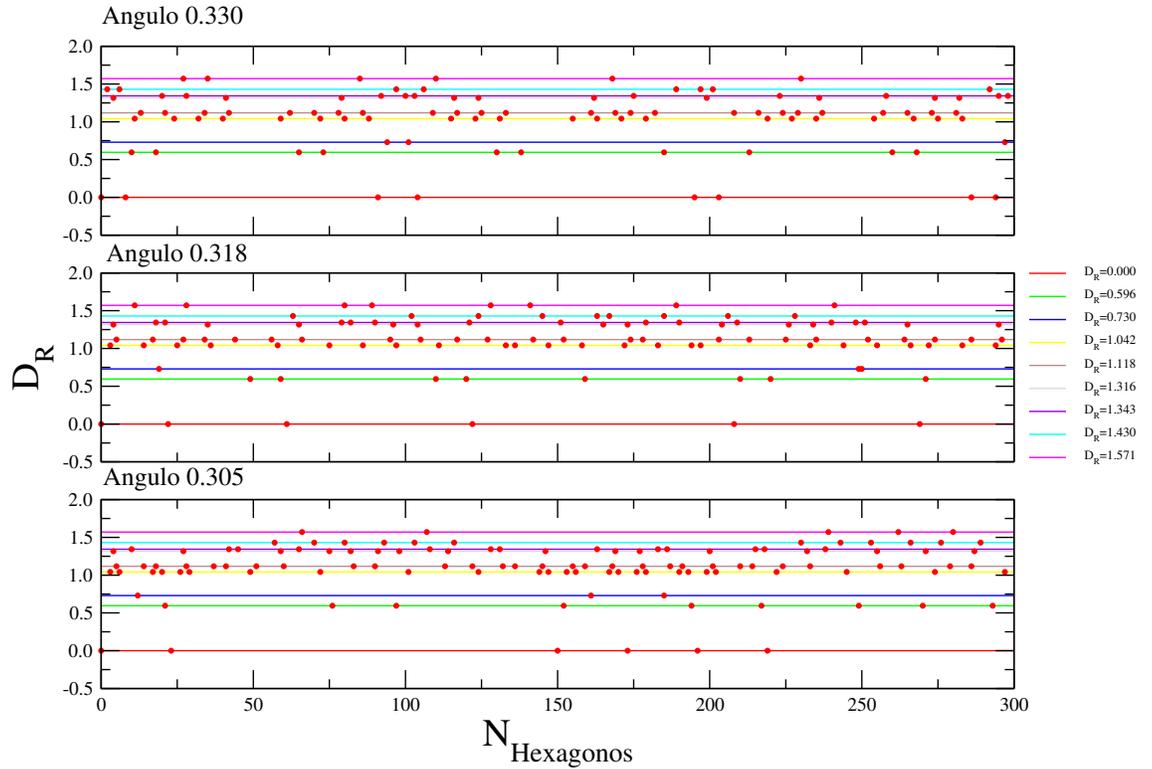


Figura 3.3: Distancias de Riemman en ángulos no conmensurables (0.330 rad, 0.318 rad y 0.305 rad)

ángulo conmensurable más pequeño donde el patrón vuelve a esatr formado por la serie de anillos.

También es importante anotar que en los ángulos conmensurables los patrones de Moiré son únicos, mientras que en los no conmensurables son múltiples pero en algunos casos mostrando cierta periodicidad.

Estos resultados muestran que es posible generar celdas cuasi periódicas para ángulos no conmensurables empleando la teoría de formas, sin embargo estas celdas no son únicas y depende de la selección empírica de la dirección

CAPÍTULO 3. TEORÍA DE FORMAS PARA OBTENER CELDAS CUASICOMENSURABLES

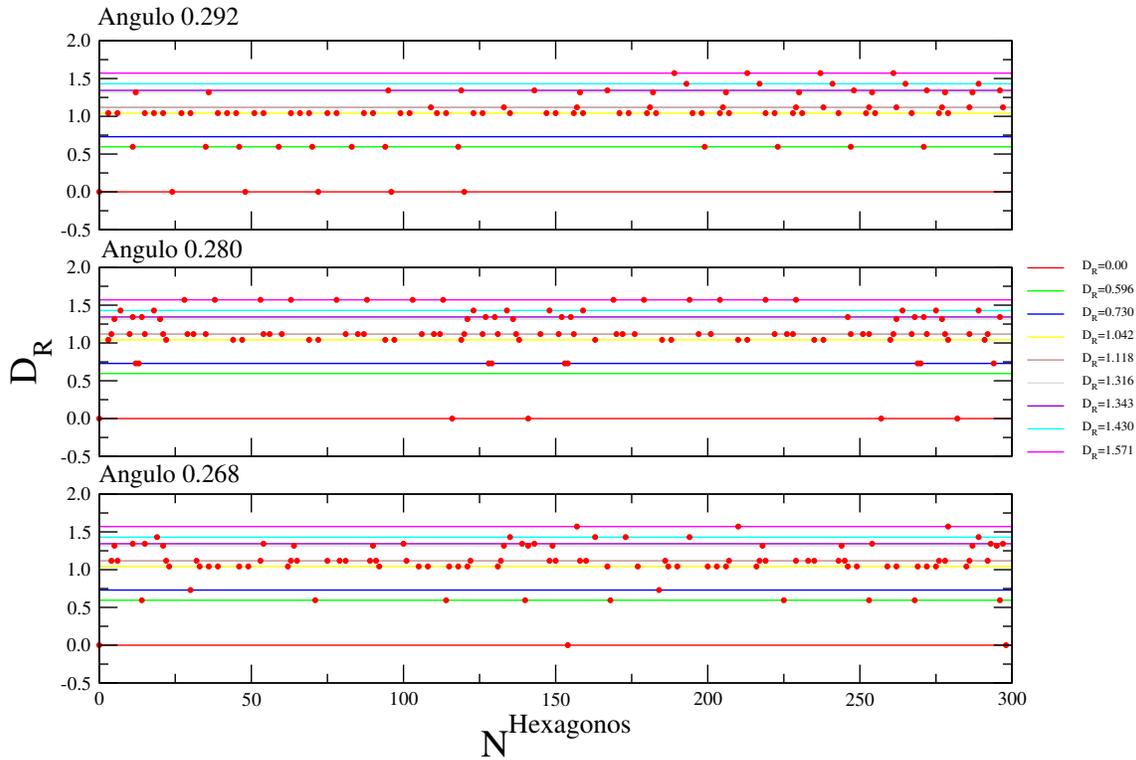


Figura 3.4: Distancias de Riemman en angulos no commensurables (0.292 rad, 0.280 rad y 0.268 rad)

de búsqueda.

3.2.3. Conclusiones

Desde el punto de vista físico los ángulos no commensurables son de gran importancia para determinar el comportamiento del sistema bajo rotaciones, en este trabajo se aplicó la Teoría de Formas empleando el concepto de distancia de Riemman, para encontrar celdas cuasiconmensurables. Como ejemplo se estudiaron las bicapas de grafeno, encontrando que es posible

3.2. PATRONES DE MOIRÉ ENTRE DOS CAPAS DE GRAFENO: CASO NO CONMENSURABLE

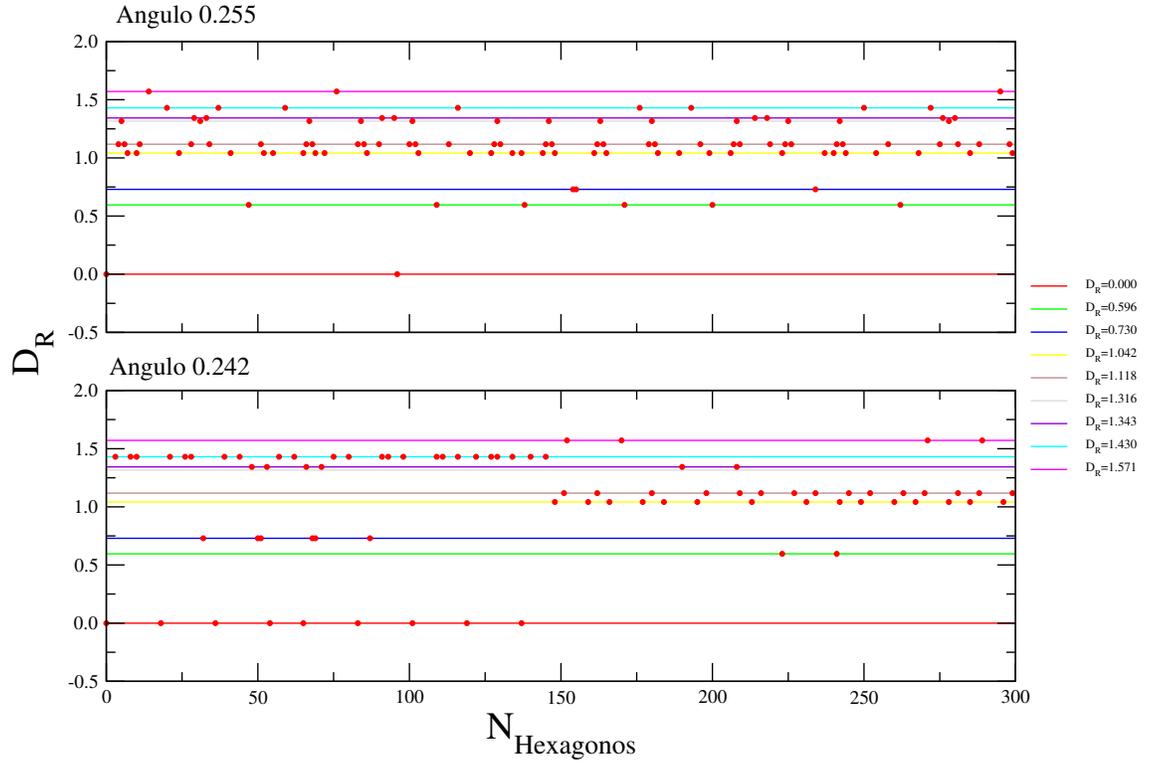


Figura 3.5: Distancias de Riemman en angulos no conmensurables (0.255 rad y 0.242 rad)

hallar para un mismo ángulo de rotación múltiples celdas cuasiperiodicas que dependen de la dirección de búsqueda.

Este método consiste en determinar las celdas unitarias del sistema rotado en el ángulo conmensurable por medio de la solución de ecuaciones diofánticas. Pero no sólo se encuentra esta alternativa de solución para ángulos conmensurables, la Teoría de Formas proporciona además una familia de ángulos cusiconmensurables usando el concepto de distancia.

El cálculo de estas celdas primitivas y el número de átomos en ellas para

CAPÍTULO 3. TEORÍA DE FORMAS PARA OBTENER CELDAS CUASICOMENSURABLES

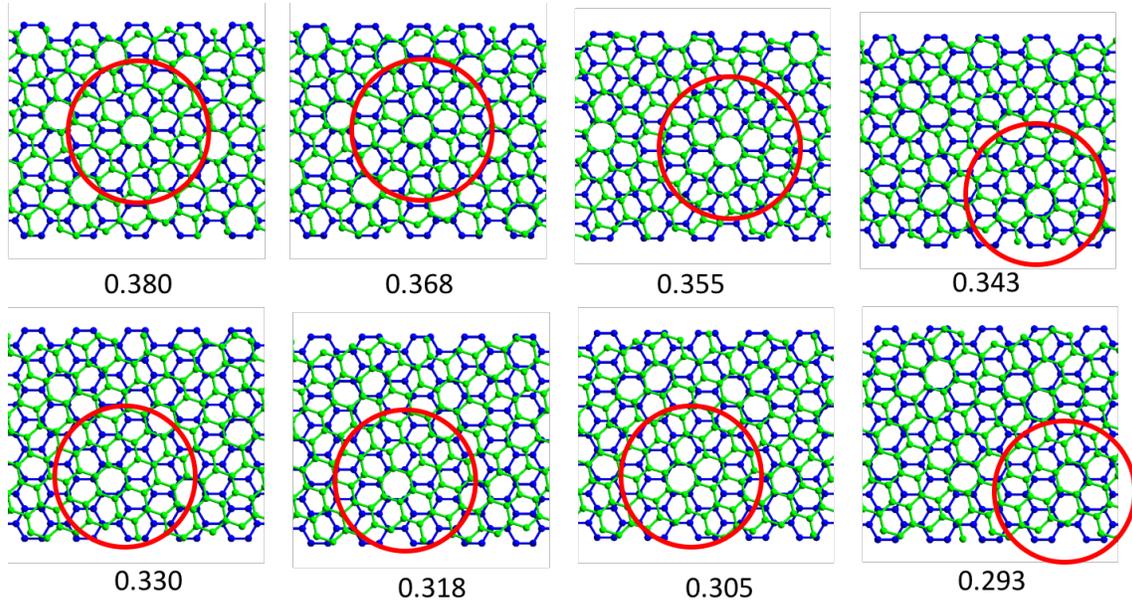


Figura 3.6: Patrones de Moiré - Ángulos no commensurables entre dos commensurables

las diferentes redes, permitirán el cálculo de las propiedades físico químicas de materiales bidimensionales haciendo uso de métodos como cálculos de primeros principios, basados en la teoría del funcional densidad (DFT) o el modelo de enlace fuerte.

3.2. PATRONES DE MOIRÉ ENTRE DOS CAPAS DE GRAFENO:
CASO NO COMMENSURABLE

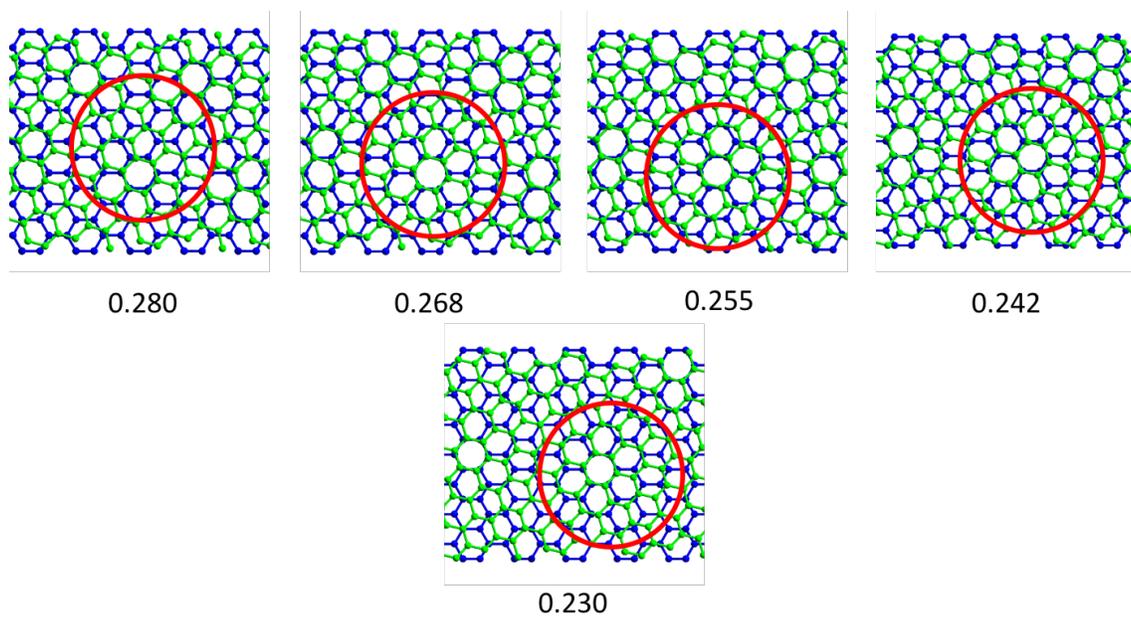


Figura 3.7: Patrones de Moiré - Ángulos no commensurables entre dos commensurables

Perspectivas

Como se indica al principio de este trabajo, las propiedades físico-químicas de materiales bidimensionales han sido ampliamente estudiadas y modificadas dopando, induciendo defectos o generando diferentes tipos de apilamiento con monocapas bidimensionales.

Este trabajo proporciona una solución analítica para el cálculo de celdas primitivas, consistente en modelos matemáticos para la representación de celdas para sistemas bicapas bidimensionales rotadas entre sí. El primer modelo es abordado con la solución de ecuaciones diofánticas, ternas pitagóricas, reflexión o simetrías y genera una metodología simple para el cálculo del ángulo de rotación conmensurable. La utilidad de este modelo radica en su aplicación en todas las redes bidimensionales Bravais, quedando abierto el camino para la exploración en la red oblicua y la red triangular y aplicaciones en materiales como el fosforeno. Además se puede aplicar para bicapas de diferente

3.2. PATRONES DE MOIRÉ ENTRE DOS CAPAS DE GRAFENO: CASO NO CONMENSURABLE

material.

De igual manera, el segundo modelo, la Teoría de Formas, proporciona una familia de ángulos cuasiconmensurables, que aunque fue aplicado para el grafeno, puede continuarse el estudio de su aplicación en otro tipo de materiales.

Las posibilidades no se limitan a los materiales aquí propuestos, queda además una gran posibilidad de continuar en las redes Bravais tridimensionales.

Bibliografía

- [1] Kostya S Novoselov, Andre K Geim, Sergei V Morozov, D Jiang, Y. Zhang, Sergey V Dubonos, Irina V Grigorieva, and Alexandr A Firsov. Electric field effect in atomically thin carbon films. *science*, 306(5696):666–669, 2004.
- [2] Sheneve Z Butler, Shawna M Hollen, Linyou Cao, Yi Cui, Jay A Gupta, Humberto R Gutierrez, Tony F Heinz, Seung Sae Hong, Jiaxing Huang, Ariel F Ismach, et al. Progress, challenges, and opportunities in two-dimensional materials beyond graphene. *ACS nano*, 7(4):2898–2926, 2013.
- [3] Dan Li and Richard B Kaner. Graphene-based materials. *Nat Nanotechnol*, 3:101, 2008.

- [4] Pilkyung Moon and Mikito Koshino. Optical absorption in twisted bilayer graphene. *Physical Review B*, 87(20):205404, 2013.
- [5] Mikito Koshino. Interlayer interaction in general incommensurate atomic layers. *New Journal of Physics*, 17(1):015014, 2015.
- [6] Andre K Geim and Irina V Grigorieva. Van der waals heterostructures. *Nature*, 499(7459):419–425, 2013.
- [7] Ankur Gupta, Tamilselvan Sakthivel, and Sudipta Seal. Recent development in 2d materials beyond graphene. *Progress in Materials Science*, 73:44–126, 2015.
- [8] Stephen Carr, Daniel Massatt, Shiang Fang, Paul Cazeaux, Mitchell Luskin, and Efthimios Kaxiras. Twistronics: Manipulating the electronic properties of two-dimensional layered structures through their twist angle. *arXiv preprint arXiv:1611.00649*, 2016.
- [9] JM Campanera, G Savini, Irene Suarez-Martinez, and MI Heggie. Density functional calculations on the intricacies of moiré patterns on graphite. *Physical Review B*, 75(23):235449, 2007.
- [10] S Shallcross, S Sharma, and Oleg A Pankratov. Quantum interference at the twist boundary in graphene. *Physical review letters*, 101(5):056803, 2008.

BIBLIOGRAFÍA

- [11] S Shallcross, S Sharma, E Kandelaki, and OA Pankratov. Electronic structure of turbostratic graphene. *Physical Review B*, 81(16):165105, 2010.
- [12] G Trambly de Laissardiere, Didier Mayou, and Laurence Magaud. Localization of dirac electrons in rotated graphene bilayers. *Nano letters*, 10(3):804–808, 2010.
- [13] E Suárez Morell, JD Correa, P Vargas, M Pacheco, and Z Barticevic. Flat bands in slightly twisted bilayer graphene: Tight-binding calculations. *Physical Review B*, 82(12):121407, 2010.
- [14] JD Correa and E Cisternas. Ab initio calculations on twisted graphene/hbn: Electronic structure and stm image simulation. *Solid State Communications*, 241:1–6, 2016.
- [15] DA Ospina, CA Duque, JD Correa, and Eric Suárez Morell. Twisted bilayer blue phosphorene: A direct band gap semiconductor. *Superlattices and Microstructures*, 97:562–568, 2016.
- [16] Steven W Cranford. When is 6 less than 5? penta-to hexa-graphene transition. *Carbon*, 96:421–428, 2016.
- [17] T Stauber, JI Beltrán, and J Schliemann. Tight-binding approach to penta-graphene. *Scientific reports*, 6, 2016.

-
- [18] Menghao Wu, Huahua Fu, Ling Zhou, Kailun Yao, and Xiao Cheng Zeng. Nine new phosphorene polymorphs with non-honeycomb structures: a much extended family. *Nano letters*, 15(5):3557–3562, 2015.
- [19] Ian L Dryden and Kanti V Mardia. *Statistical Shape Analysis: With Applications in R*. John Wiley & Sons, 2016.
- [20] DG Kendall D Barden TK Carne and H Le. *Shape and Shape Theory*. Chichester, UK: John Wiley and Sons, Inc, 1999.
- [21] Victor Mukhamedovich Abazov, B Abbott, Bannanje Sripath Acharya, M Adams, Todd Adams, Guennadi D Alexeev, G Alkhazov, A Alton, G Alverson, Gilvan Augusto Alves, et al. Measurement of the anomalous like-sign dimuon charge asymmetry with 9 fb⁻¹ of p p collisions. *Physical Review D*, 84(5):052007, 2011.
- [22] Wei-Song Lin and Chun-Hsiung Fang. Synthesized affine invariant function for 2d shape recognition. *Pattern Recognition*, 40(7):1921–1928, 2007.
- [23] MA Fortes. N-dimensional coincidence-site-lattice theory. *Acta Crystallographica Section A: Foundations of Crystallography*, 39(3):351–357, 1983.
- [24] S Shallcross, S Sharma, E Kandelaki, and OA Pankratov. Publisher’s note: Electronic structure of turbostratic graphene [phys. rev. b 81, 165105 (2010)]. *Physical Review B*, 81(23):239904, 2010.

BIBLIOGRAFÍA

- [25] Francisco J Caro-Lopera. A family of formulae for pi. *Far East Journal of Mathematical Sciences*, 64(2):157–181, 2012.
- [26] Shunhong Zhang, Jian Zhou, Qian Wang, Xiaoshuang Chen, Yoshiyuki Kawazoe, and Puru Jena. Penta-graphene: A new carbon allotrope. *Proceedings of the National Academy of Sciences*, 112(8):2372–2377, 2015.
- [27] Wen Xu, Gang Zhang, and Baowen Li. Thermal conductivity of penta-graphene from molecular dynamics study. *The Journal of chemical physics*, 143(15):154703, 2015.
- [28] Xiaoyin Li, Shunhong Zhang, Fancy Qian Wang, Yaguang Guo, Jie Liu, and Qian Wang. Tuning the electronic and mechanical properties of penta-graphene via hydrogenation and fluorination. *Physical Chemistry Chemical Physics*, 18(21):14191–14197, 2016.