



BENEMÉRITA UNIVERSIDAD
AUTÓNOMA DE PUEBLA

FACULTAD DE CIENCIAS FÍSICO
MATEMÁTICAS

SUPERCONDUCTIVIDAD
EN EL GRAFENO
BICAPA ROTADO
DESCRITO POR EL
MODELO DE HUBBARD

T E S I S

QUE PARA OBTENER EL TÍTULO DE:
LICENCIADO EN FÍSICA APLICADA

P R E S E N T A:
MARIJOSSE MARTÍNEZ FERNÁNDEZ



TESIS ASESORADA POR:

LIC. ROBERTO CÉSAR XICOTÉNCATL ROBLES
DR. MILLER TOLEDO SOLANO

07/2025

*Dedicado a
Mathias
Por su incondicionalidad*

Agradecimientos

A quienes me ayudaron a realizar este logro. A mis padres y mi familia.
A todos los profesores y amigos que me guiaron en mis años universitarios.
A mi querido Axel por todo.

Resumen

El presente trabajo de tesis aborda el fenómeno de la superconductividad no convencional en el grafeno bicapa rotado (TBG) desde una perspectiva teórica y computacional. A partir del modelo de Bistritzer-MacDonald se analiza la estructura electrónica del sistema en el régimen del llamado “ángulo mágico”, donde emergen bandas planas que suprimen la energía cinética y potencian los efectos de interacción electrónica.

Con base en esta descripción, se construye un modelo de Hubbard efectivo sobre la red de Moiré, formulado a partir de funciones de Wannier localizadas, las cuales se obtienen mediante una aproximación de tipo *Tight-Binding*. Este enfoque permite estudiar de manera eficiente los efectos de correlación electrónica y la posible aparición de estados superconductores fuertemente ligados en redes cuasiperiódicas.

Se emplearon herramientas del formalismo cuántico, como la segunda cuantización y la función de Green, para investigar propiedades claves del sistema. Se calcularon, entre otros resultados, la longitud de coherencia de los pares de Cooper (a partir del decaimiento exponencial de la función de Green anómala) y la temperatura crítica T_c en función del ángulo de torsión y del parámetro de interacción U . El valor máximo obtenido fue $T_c = 41.31$ K en $\theta = 1.102^\circ$, en proximidad al ángulo mágico.

Además, se analizaron fenómenos de localización electrónica mediante simulaciones de la densidad local de estados (LDOS), visualizados por medio de mapas de calor bidimensionales, mapas de contorno rellenos y representaciones tridimensionales, en los que se observó una concentración marcada de carga en las regiones de apilamiento tipo AA.

Finalmente, se consideró el papel de la primera zona de Brillouin como referencia fundamental en la interpretación de los modos electrónicos en el espacio recíproco, lo cual resulta crucial para el análisis de simetrías y puntos críticos en la estructura de bandas.

En conjunto, esta tesis proporciona un marco sólido para el estudio de la superconductividad en materiales bidimensionales con bandas planas, destacando el potencial del modelo de Hubbard efectivo y del modelo *Tight-Binding* para describir sistemas altamente correlacionados como el TBG.

Abstract

This thesis addresses the phenomenon of unconventional superconductivity in twisted bilayer graphene (TBG) from a theoretical and computational perspective. Based on the Bistritzer–MacDonald model, the electronic structure of the system is analyzed in the regime of the so-called “magic angle,” where flat electronic bands emerge, suppressing kinetic energy and enhancing electron-electron interactions.

Building upon this framework, an effective Hubbard model is constructed on the Moiré lattice, formulated using localized Wannier functions derived through a *Tight-Binding* approximation. This approach enables the efficient study of correlation effects and the possible emergence of strongly bound superconducting states in quasicrystalline systems.

Quantum formalism tools such as second quantization and Green’s functions were employed to investigate key physical properties of the system. Among other results, the coherence length of Cooper pairs was calculated from the exponential decay of the anomalous Green’s function, and the critical temperature T_c was evaluated as a function of the twist angle and the interaction parameter U . The maximum value obtained was $T_c = 41.31$ K at $\theta = 1.102^\circ$, close to the magic angle.

In addition, electronic localization phenomena were analyzed through simulations of the local density of states (LDOS), visualized via 2D heatmaps, filled contour plots, and 3D representations, revealing a marked charge concentration in AA-stacked regions.

Finally, the role of the first Brillouin zone was considered as a fundamental reference for interpreting electronic modes in reciprocal space, which is crucial for the analysis of symmetries and critical points in the band structure.

Overall, this thesis provides a solid framework for the study of superconductivity in two-dimensional materials with flat bands, highlighting the potential of the effective Hubbard model and the *Tight-Binding* approach to describe highly correlated systems such as TBG.

Introducción

El descubrimiento de la superconductividad en el grafeno bicapa rotado (Twisted Bilayer Graphene, TBG) ha abierto una nueva etapa en la física de la materia condensada, al revelar que materiales bidimensionales con interacciones electrónicas fuertemente correlacionadas pueden presentar estados superconductores no convencionales. Este fenómeno se manifiesta de forma particularmente notable cuando dos capas de grafeno se apilan con un pequeño ángulo de rotación relativo, cercano al llamado “ángulo mágico” ($\theta \approx 1.1^\circ$), generando un patrón de Moiré que da lugar a bandas electrónicas planas y una alta densidad de estados cerca del nivel de Fermi.

La presencia de estas bandas planas suprime la energía cinética de los electrones, intensificando los efectos de interacción y permitiendo el surgimiento de fases cuánticas emergentes, como el aislamiento de Mott y la superconductividad. Comprender la naturaleza de estos estados requiere el uso de modelos efectivos que capturen tanto la estructura electrónica como las interacciones locales. Entre ellos, el modelo de Hubbard (en su versión efectiva construida a partir de funciones de Wannier localizadas sobre la red de Moiré) se ha consolidado como una herramienta teórica poderosa para describir los efectos de correlación en sistemas con grados de libertad reducidos y bandas estrechas, como el TBG.

En esta tesis se estudia la superconductividad en el grafeno bicapa rotado utilizando una aproximación basada en el modelo de Hubbard efectivo, construido a partir del modelo de Bistritzer-MacDonald y desarrollado sobre una base de funciones de Wannier derivadas mediante una aproximación tipo *Tight-Binding*. Esta formulación se complementa con herramientas del formalismo cuántico como la segunda cuantización y la función de Green. Asimismo, se considera el papel de la primera zona de Brillouin como marco

de referencia para el análisis de la estructura de bandas y la localización de los modos electrónicos relevantes.

Se analiza cómo la geometría de la superred de Moiré, el acoplamiento inter-capa, la densidad local de estados y el parámetro de interacción U influyen en la aparición de fases superconductoras no convencionales, así como en la longitud de coherencia del sistema. Los resultados incluyen la estimación de la temperatura crítica T_c , la obtención de mapas de localización electrónica, y el cálculo de la función de Green anómala, utilizando simulaciones computacionales desarrolladas en `Python`.

La tesis se organiza en cinco capítulos. El primero presenta las propiedades estructurales y electrónicas del grafeno monocapa y bicapa, destacando la formación del patrón de Moiré y sus consecuencias físicas. El segundo introduce el formalismo cuántico necesario, incluyendo el teorema de Bloch, las funciones de Wannier, la zona de Brillouin y la segunda cuantización. El tercer capítulo desarrolla el modelo de Hubbard y su aplicación al grafeno bicapa rotado, abordando el modelo de Bistritzer-MacDonald, la aproximación de baja energía y el modelo *Tight-Binding*. El cuarto capítulo presenta los métodos computacionales utilizados para calcular magnitudes físicas relevantes como la temperatura crítica, la longitud de coherencia y la densidad local de estados. Finalmente, el quinto capítulo expone las conclusiones del estudio.

Adicionalmente, se incluyen apéndices con el formalismo de Nambu y los códigos utilizados en las simulaciones, lo que permite reproducir y extender los resultados obtenidos.

Este trabajo pretende contribuir a la comprensión de los mecanismos de emparejamiento electrónico en materiales con bandas planas, así como al desarrollo de modelos efectivos para describir la superconductividad en sistemas fuertemente correlacionados, con especial énfasis en enfoques no convencionales aplicados a materiales bidimensionales como el TBG.

Objetivos de la Investigación

Objetivo general

Estudiar la aparición de superconductividad no convencional en el grafeno bicapa rotado (TBG) mediante un enfoque teórico-computacional, utilizando modelos efectivos como el de Hubbard sobre la red de Moiré y herramientas como la función de Green y la segunda cuantización.

Objetivos específicos

1. Analizar la estructura electrónica del TBG en el régimen de ángulo mágico a partir del modelo de Bistritzer-MacDonald y su formulación de baja energía.
2. Aplicar el modelo de Hubbard efectivo basado en funciones de Wannier localizadas y aproximaciones tipo *Tight-Binding* para describir las interacciones electrónicas en la red de Moiré.
3. Implementar simulaciones computacionales que permitan calcular la longitud de coherencia y la temperatura crítica T_c como función del ángulo de torsión y del parámetro de interacción U .
4. Explorar fenómenos de localización electrónica mediante la densidad local de estados (LDOS) y mapas espaciales derivados de la función de Green anómala.

Índice general

Agradecimientos	III
Resumen	IV
Abstract	VI
Introducción	VIII
Objetivos de la Investigación	X
1. Grafeno	1
1.1. Propiedades	4
1.2. Relevancia	5
1.3. Geometría de Red Monocapa	7
1.4. Geometría de Red Bicapa	10
1.4.1. Comportamiento Electrónico	16
2. Formalismo Cuántico	21
2.1. Teorema de Bloch	22
2.2. Funciones de Wannier	23
2.3. Principio de Exclusión de Pauli	26
2.4. Segunda Cuantización	29
3. Modelo de Hubbard	33
3.1. Hamiltoniano de Hubbard	35
3.1.1. Límites Físicos	36
3.2. Hamiltoniano Bistritzer-MacDonald	38
3.3. Acoplamiento Inter-Capa	39
3.4. Aproximación Baja Energía	40

3.5. Modelo <i>Tight-Binding</i>	45
3.5.1. Generalización para TBG	46
3.5.2. Relación con Funciones de Wannier	46
3.6. Función de Green	49
3.6.1. Conexión con <i>Tight-Binding</i>	50
3.6.2. Densidad de Estados	51
3.6.3. Conductividad Eléctrica	51
3.6.4. Aplicación a TBG	52
3.6.5. Longitud de Coherencia	55
4. Enfoque Computacional	59
4.1. Longitud de Coherencia	60
4.2. Cálculo de T_c	63
4.3. Localización Electrónica	67
4.3.1. Funciones de Onda	68
4.3.2. Descripción Localizada de Funciones de Wannier	69
4.3.3. LDOS y Función de Green	71
5. Conclusiones	73
A. Formalismo de Nambu	76
B. Código para el Ajuste de la Función de Green Anómala	78
C. Códigos de Simulación para la Estimación de T_c y $\rho(E)$	80
C.1. Simulación de la Densidad de Estados $\rho(E)$	81
C.2. Estimación de $T_c(\theta)$ en Función del Ángulo de Torsión	82
C.3. Cálculo de T_c a partir de la Densidad de Estados y el Acoplamiento U	84
D. Códigos para Simulaciones de Localización Electrónica	86
D.1. Simulación de la Densidad de Probabilidad $P(\vec{r})$	86
D.1.1. Visualización Bidimensional de la Localización Electrónica	87
D.1.2. Visualización Tridimensional de la Localización Electrónica	88
D.2. Simulación de Función de Wannier Localizada	89
D.2.1. Visualización Bidimensional de la Función de Wannier Localizada	90

Índice general
Índice general

D.2.2. Visualización Tridimensional de la Función de Wannier Localizada	91
D.3. Simulación de LDOS mediante Función de Green	93
D.3.1. Visualización Bidimensional de la LDOS	93
D.3.2. Visualización Tridimensional de la LDOS	95
Bibliografía	97

Capítulo 1

Grafeno

En este capítulo se abordarán las características de la red monocapa, estableciendo con ello las bases teóricas necesarias para comprender el sistema físico que se estudiará a lo largo de esta tesis: el grafeno bicapa rotado (TBG, Twisted Bilayer Graphene), destacando el papel crucial del ángulo de rotación entre capas en la formación del patrón de Moiré. Este patrón da lugar a nuevas simetrías y periodicidades, cuya comprensión es esencial para el desarrollo de los modelos efectivos utilizados en el estudio del TBG.

Se presentan los conceptos fundamentales que permiten describir su estructura y comportamiento electrónico, comenzando por una introducción al grafeno como material bidimensional, su red cristalina y las propiedades asociadas a su estructura de bandas.

En la naturaleza encontramos al carbono en distintas estructuras atómicas denominadas alótropos, tales como los representados en la Figura 1.1:

- a) Diamante (estructura tridimensional fuerte).
- b) Grafito (capas apiladas de grafeno con enlaces débiles entre ellas).
- c) Grafeno (una sola capa de átomos de carbono en forma de panal).
- d) Fullerenos (moléculas esféricas, como el C_{60}).
- e) Nanotubos de carbono (tubos cilíndricos de grafeno enrollado).

Aunque todos son carbono, sus estructuras atómicas cambian, lo que modifica sus propiedades físicas y químicas.

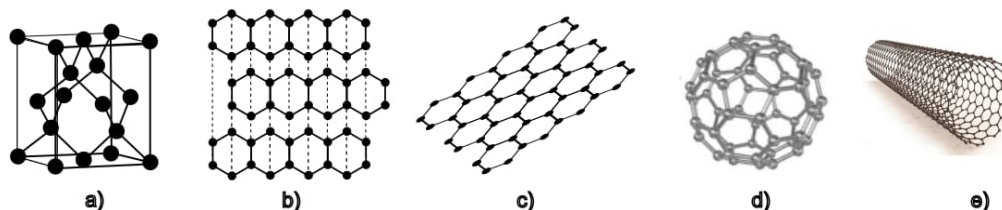


Figura 1.1: Alótropos del carbono. Figura elaborada por el autor con base en conceptos de [1].

El grafeno se distingue por su estructura bidimensional compuesta por átomos de carbono dispuestos en una red hexagonal de apariencia sencilla, pero de una complejidad fascinante. Desde que fue aislado experimentalmente a comienzos del siglo XXI, este alótropo¹ del carbono, con un espesor de apenas un átomo, ha despertado un interés sin precedentes en la comunidad científica.

Sus propiedades (que abarcan desde una resistencia mecánica asombrosa hasta una conductividad eléctrica sobresaliente y una capacidad térmica notable) lo han convertido en un objeto de estudio que trasciende los confines de la investigación básica para proyectarse hacia aplicaciones tecnológicas revolucionarias. Entre los fenómenos más sorprendentes que han emergido de este material destaca la superconductividad, un estado en el que la resistencia eléctrica desaparece por completo, observable de manera particularmente notable en el grafeno bicapa rotado (Twisted Bilayer Graphene, TBG), una configuración en la que dos capas de grafeno se superponen con un ángulo de rotación cuidadosamente definido.

El grafeno se define como una lámina de átomos de carbono organizados en una red hexagonal bidimensional, donde cada átomo está unido a tres vecinos mediante enlaces covalentes formados por orbitales híbridos sp^2 . La distancia entre átomos adyacentes es de aproximadamente 0.142 nm, y

¹Un alótropo es una variante estructural o diferente forma, en que un elemento químico puro, puede organizar sus átomos en el espacio, dando lugar a estructuras con propiedades físicas o químicas distintas.

Capítulo 1. Grafeno

la constante de red de esta estructura hexagonal mide $a = 0.246$ nm. Con un espesor de apenas 0.34 nm, equivalente al tamaño de un átomo de carbono, el grafeno es un material verdaderamente bidimensional que combina simplicidad estructural con propiedades físicas extraordinarias. En el ámbito electrónico, su comportamiento está gobernado por una relación de dispersión lineal en los puntos K y K' de la zona de Brillouin, conocidos como conos de Dirac, representados en la Figura 1.2 y expresado matemáticamente como:

$$E = \hbar v_F |\mathbf{k}| \quad (1.1)$$

donde:

- \hbar es la constante de Planck reducida,
- $v_F \approx 10^6$ m/s representa la velocidad de Fermi (una magnitud comparable a una fracción de la velocidad de la luz),
- y \mathbf{k} es el vector de onda.

Esta ecuación describe cómo los electrones en el grafeno actúan como fermiones de Dirac sin masa, moviéndose con una dinámica relativista que lo distingue de otros materiales. Como resultado, el grafeno se clasifica como un semimetal, con una densidad de estados que se anula en el nivel de Fermi cuando no está dopado, lo que significa que en su estado puro no conduce electricidad a menos que se introduzcan portadores de carga.

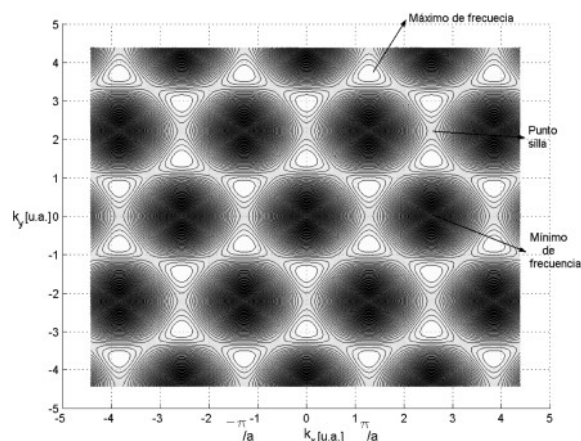


Figura 1.2: Representación esquemática de la red hexagonal del grafeno monocapa, acompañada de un diagrama de la zona de Brillouin con los conos de Dirac destacados. Tomado de [10].

Esta estructura electrónica explica su alta conductividad: al dopar el material con electrones o huecos, ya sea por medios químicos o eléctricos, los portadores de carga alcanzan una movilidad que puede superar los $200,000 \text{ cm}^2/\text{Vs}$ en muestras de alta pureza. Esta propiedad se debe a la mínima dispersión de los electrones por defectos o impurezas y a la naturaleza cuántica de su transporte, lo que lo hace ideal para aplicaciones electrónicas. De igual forma, la red hexagonal confiere al grafeno una simetría que influye en su interacción con la luz y su respuesta mecánica, aspectos que adquieren una dimensión aún más rica en el contexto del grafeno bicapa rotado.

1.1. Propiedades

Las propiedades del grafeno son la base de su importancia y se derivan directamente de su estructura atómica y electrónica. A continuación, se detallan las más relevantes, su conexión con el grafeno bicapa rotado (TBG) y se muestran gráficos comparativos en la Figura 1.3:

1. **Conductividad Eléctrica:** La dinámica de los electrones en los conos de Dirac permite una conductividad excepcional cuando se introducen portadores de carga. En condiciones ideales, la movilidad electrónica supera valores típicos de otros materiales, lo que lo hace ideal para aplicaciones en electrónica de alta velocidad. En el grafeno bicapa rotado (TBG), esta propiedad se lleva al extremo con la aparición de la superconductividad, un estado en el que la resistencia eléctrica desaparece por completo.
2. **Resistencia Mecánica:** El grafeno posee un módulo de Young de aproximadamente 1 TPa y una resistencia a la tracción de 130 GPa, superando al acero en órdenes de magnitud. Esta fortaleza permite que las bicapas rotadas resistan las tensiones mecánicas y térmicas de experimentos a bajas temperaturas.
3. **Flexibilidad y Ligereza:** Con una densidad de apenas $0.77 \text{ mg}/\text{m}^2$ y una estructura bidimensional, el grafeno es extremadamente ligero y flexible, lo que facilita su manipulación en configuraciones como el grafeno bicapa rotado (TBG), donde el ajuste preciso del ángulo de rotación es esencial.

- Propiedades Ópticas: El grafeno absorbe el 2.3% de la luz visible, una constante determinada por la estructura fina ($\alpha = e^2/\hbar c$), lo que lo hace casi transparente. En el TBG, las bandas electrónicas planas alteran esta interacción, afectando su respuesta óptica de maneras que aún se están investigando.

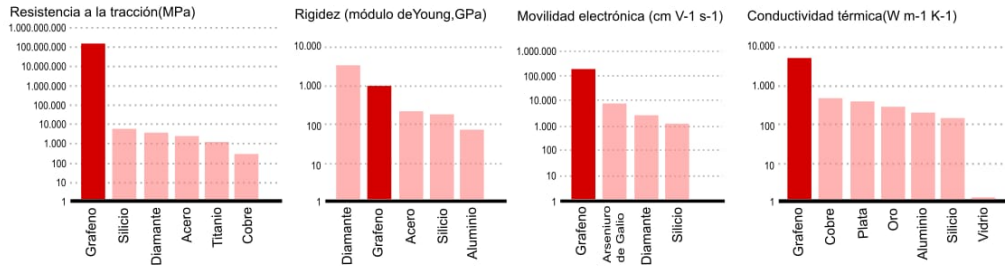


Figura 1.3: Gráfico comparativo que muestra la resistencia mecánica del grafeno frente a materiales tradicionales como el acero o el diamante. Tomado de [11].

Estas propiedades se transforman en el grafeno bicapa rotado (TBG) debido al patrón de Moiré generado por la rotación entre capas, cuya longitud de onda se calcula como:

$$L_m \approx \frac{a}{\theta} \quad (1.2)$$

Para un ángulo de $\theta = 1.1^\circ$, esto resulta en una escala de $L_m \approx 12.8$ nm, como se detalla en la Sección 1.4; un efecto que introduce una superred con regiones de apilamiento distintivas (AA, AB, BA) que modulan las interacciones electrónicas.

1.2. Relevancia

Las propiedades del grafeno lo hacen candidato para numerosas aplicaciones. En electrónica, su conductividad y tamaño atómico lo posicionan como un material para transistores de alta velocidad y pantallas flexibles. En el ámbito de la energía, su ligereza y resistencia lo convierten en un componente prometedor para baterías y supercapacitores. En biomedicina, su biocompatibilidad y capacidad de formar sensores lo hacen útil para diagnósticos médicos. Sin embargo, la superconductividad en el grafeno bicapa

rotado (TBG) eleva estas posibilidades, sugiriendo futuros usos en líneas de transmisión sin pérdidas energéticas o dispositivos cuánticos avanzados.

El descubrimiento de la superconductividad en el grafeno bicapa rotado en 2018 marcó un hito en la física de la materia condensada. Este fenómeno ocurre cuando dos capas de grafeno se apilan con un ángulo de rotación cercano a 1.1° , conocido como el “ángulo mágico”, y se dopan con electrones o huecos mediante un voltaje de puerta para ajustar la densidad de portadores n .

En estas condiciones, el material alcanza una temperatura crítica de $T_c \approx 1.7\text{ K}$, por debajo de la cual la resistencia eléctrica desaparece. Este estado se manifiesta en regiones específicas del diagrama de fases, conocidas como “domos superconductores”, representados en la Figura 1.4, que dependen del llenado de las bandas planas, definido como $\nu = n/n_s$, donde n_s es la densidad de estados asociada a la superred Moiré.

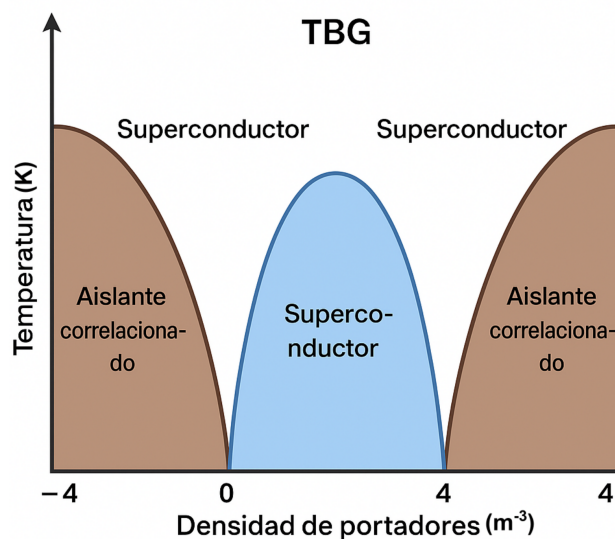


Figura 1.4: Diagrama de fases del grafeno bicapa rotado (TBG) que muestra los domos superconductores y las regiones aislantes correlacionadas, con ejes de densidad de portadores y temperatura. Figura elaborada por el autor con base en conceptos de [13] y [23].

1.3. Geometría de Red Monocapa

Antes de abordar la física específica del grafeno bicapa rotado (TBG), es útil repasar brevemente las propiedades estructurales del grafeno monocapa, ya que constituyen la base del comportamiento emergente en el sistema rotado.

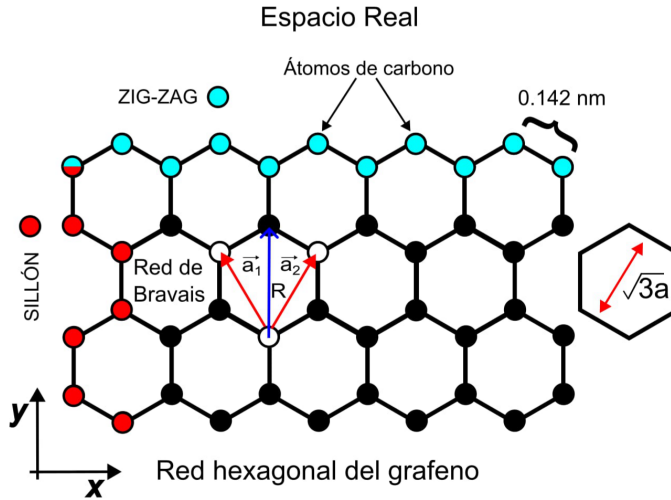


Figura 1.5: Estructura de la red periódica hexagonal bidimensional del grafeno, mostrando los dos tipos principales de bordes: zig-zag (resaltados en cian) y sillón (resaltados en rojo). Cada vértice representa un átomo de carbono, con una distancia de enlace típica de 0.142 nm. Representando los vectores \vec{a}_1 y \vec{a}_2 Se incluye el sistema de coordenadas cartesiano $x-y$ para referencia. Adaptado por el autor de [12] y [14].

El grafeno monocapa es una red bidimensional de átomos de carbono organizados en una estructura hexagonal, como se observa en la Figura 1.5, con dos sitios atómicos que no son equivalentes entre sí por simetría dentro de la celda unitaria, correspondientes a las subredes (*sublattices*) A y B. Su red de Bravais real es triangular, y su red recíproca también es hexagonal. Los puntos de la red de Bravais están dados por las posiciones:

$$\vec{R} = n_1 \vec{a}_1 + n_2 \vec{a}_2, \quad n_1, n_2 \in \mathbb{Z} \quad (1.3)$$

donde \vec{a}_1 y \vec{a}_2 son los vectores base que se definen como:

$$\vec{a}_1 = a \left(\frac{1}{2}, \frac{\sqrt{3}}{2} \right), \quad \vec{a}_2 = a \left(-\frac{1}{2}, \frac{\sqrt{3}}{2} \right), \quad (1.4)$$

y $a \simeq 2.46 \text{Å}$ es el parámetro de red, relacionado a la distancia carbono-carbono, d , por $a = \sqrt{3}d$. El área de la celda unitaria es:

$$A_{cu} = |\vec{a}_1 \times \vec{a}_2| = \frac{\sqrt{3}}{2} a^2. \quad (1.5)$$

Debido a la red en el espacio real se define el conjunto de puntos G tales que $e^{i\vec{R} \cdot \vec{G}} = 1$. Estos puntos forman la red recíproca y se pueden escribir en términos de los vectores base del espacio recíproco:

$$\vec{G} = m_1 \vec{b}_1 + m_2 \vec{b}_2 \quad m_1, m_2 \in \mathbb{Z} \quad (1.6)$$

donde los vectores \vec{b}_1 y \vec{b}_2 por definición:

$$\vec{a}_i \cdot \vec{b}_j = 2\pi \delta_{i,j}. \quad (1.7)$$

De modo que \vec{b}_1 y \vec{b}_2 (representados en la Figura 1.6) se expresan como:

$$\vec{b}_1 = \frac{4\pi}{3d} \left(\frac{\sqrt{3}}{2}, \frac{1}{2} \right), \quad \vec{b}_2 = \frac{4\pi}{3d} \left(-\frac{\sqrt{3}}{2}, \frac{1}{2} \right). \quad (1.8)$$

La dispersión electrónica cerca de los puntos K y K' de la zona de Brillouin forma conos de Dirac, con una estructura de bandas lineal que da lugar a cuasipartículas tipo Dirac. Aunque el grafeno monocapa es un sistema altamente móvil, no presenta superconductividad intrínseca, salvo en presencia de dopaje, proximidad con superconductores o tensiones inducidas artificialmente. Al rotar una capa de grafeno sobre otra, se genera un patrón interferencial periódico conocido como red de Moiré, que impone una nueva modulación espacial y modifica profundamente el comportamiento electrónico del sistema, la comparación entre ambos se aborda en la Tabla 1.1.

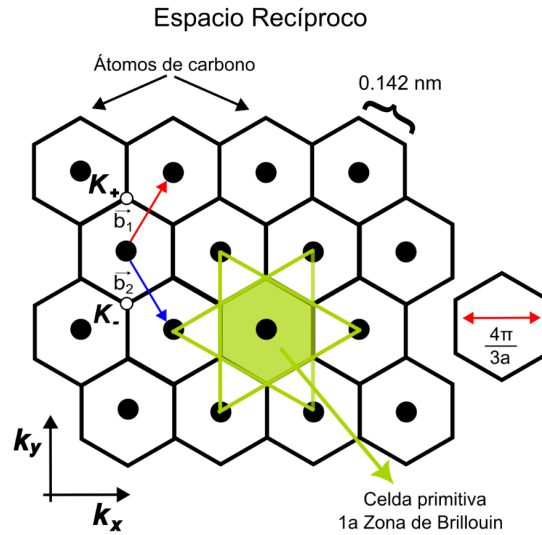


Figura 1.6: Red periódica del grafeno monocapa en el espacio recíproco, mostrando los vectores \vec{b}_1 y \vec{b}_2 . Tomado de [14].

Tipo de red	Grafeno monocapa	Grafeno bicapa rotado (TBG)
Red real	Triangular (hexagonal)	Superred de Moiré (trigonal en ángulos pequeños)
Red recíproca	Hexagonal	Red recíproca reducida por la periodicidad Moiré
Zona de Brillouin	Hexágono con puntos K/K'	Zona de Brillouin de Moiré (más pequeña)
Dispersión electrónica	Cónica (Dirac)	Bandas planas (cerca del ángulo mágico)

Tabla 1.1: Comparación de redes en grafeno monocapa y grafeno bicapa rotado (TBG).

1.4. Geometría de Red Bicapa

Tras haber analizado el comportamiento electrónico del grafeno monocapa, donde las excitaciones cercanas al nivel de Fermi se describen mediante fermiones tipo Dirac con una estructura de banda lineal, damos ahora un paso hacia un sistema más complejo y fascinante: el grafeno bicapa rotado (Twisted Bilayer Graphene, TBG).

Este sistema consiste en dos capas de grafeno apiladas con un pequeño ángulo de rotación relativo, lo que da lugar a un patrón de Moiré (ver la Figura 1.7) que modifica profundamente las propiedades electrónicas del material. Particularmente, cuando el ángulo de rotación se encuentra cerca de un valor crítico ($\theta = 1.1^\circ$, conocido como “ángulo mágico”), emergen bandas planas en la estructura electrónica. Estas bandas suprimen la energía cinética de los electrones, realizando los efectos de interacción y permitiendo la aparición de fenómenos cuánticos colectivos como el aislamiento de Mott (estado en el que, debido a fuertes interacciones electrónicas, un material que debería conducir electricidad según la teoría de bandas se comporta como un aislante) y la superconductividad no convencional.

Esta rotación rompe la simetría translacional entre las capas y da lugar a un nuevo patrón de interferencia conocido como patrón de Moiré. Este patrón forma una superestructura periódica mayor que la celda unitaria del grafeno. La geometría resultante ya no está descrita simplemente por las redes individuales de cada capa, sino por una superred de Moiré cuyo período espacial crece inversamente con θ . La red original tiene una periodicidad ~ 0.246 nm, mientras que la red de Moiré puede tener una periodicidad de hasta 10 a 15 nm cuando el ángulo es $\theta = 1.1^\circ$.

Esta red introduce una nueva periodicidad efectiva, que no corresponde a posiciones atómicas reales, pero sí modula el acoplamiento entre capas y afecta fuertemente la estructura electrónica. Cada capa de grafeno posee una red de Bravais triangular con vectores base vistos en la Ecuación (1.4):

$$\vec{a}_1 = a \left(\frac{1}{2}, \frac{\sqrt{3}}{2} \right), \quad \vec{a}_2 = a \left(-\frac{1}{2}, \frac{\sqrt{3}}{2} \right),$$

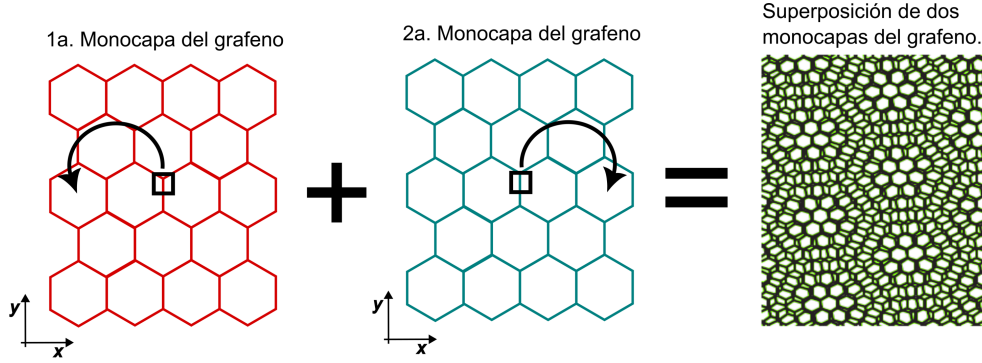


Figura 1.7: Esquema de la formación del patrón de Moiré en el grafeno bicapa rotado. La superposición de dos monocapas de grafeno con un pequeño ángulo relativo de rotación da lugar a una red periódica de interferencia conocida como patrón de Moiré. Este patrón modifica el potencial efectivo visto por los electrones, conduciendo al surgimiento de bandas electrónicas planas para un ángulo de 1.1° . Las flechas indican el sentido de rotación de cada capa. Adaptado de [15].

donde $a \approx 2.46\text{\AA}$ es la constante de red del grafeno, correspondiente a la distancia entre átomos vecinos en la red bidimensional de carbono. Esta magnitud se obtiene a partir de la geometría hexagonal del grafeno: aunque la distancia entre átomos de carbono directamente enlazados es de aproximadamente $a \approx 1.42\text{\AA}$ (visto en la Figura 1.5), los vectores de red primitivos conectan átomos en diferentes subredes, y su módulo resulta ser $a = \sqrt{3} \cdot 1.42\text{\AA} \approx 2.46\text{\AA}$. Al rotar la segunda capa respecto a la primera por un ángulo θ en sentido antihorario alrededor de un punto común (típicamente un sitio A), sus vectores de red se transforman mediante una matriz de rotación:

$$\vec{a}_i^{(2)} = R(\theta)\vec{a}_i^{(1)}, \quad (1.9)$$

donde:

$$R(\theta) = \begin{pmatrix} \cos \theta & -\sin \theta \\ \sin \theta & \cos \theta \end{pmatrix}. \quad (1.10)$$

La interferencia entre las dos redes rotadas produce una modulación espacial a gran escala, cuya periodicidad efectiva se conoce como longitud de Moiré L_m , que se puede aproximar, para ángulos pequeños $\theta \ll 1$, el módulo

de estos vectores escala (como se vio brevemente en la Ecuación (1.2)) como:

$$L_m = \frac{a}{2 \sin(\theta/2)} \approx \frac{a}{\theta}. \quad (1.11)$$

Esta longitud caracteriza el tamaño de la nueva celda unitaria Moiré, que contiene miles de átomos de carbono para ángulos cercanos al ángulo mágico $\theta = 1.1^\circ$. Esta relación indica que la longitud de la celda de Moiré crece rápidamente a medida que el ángulo disminuye.

Para ilustrar la escala física de esta celda, consideramos el valor $a = 0.246 \text{ nm}$ y un ángulo de torsión $\theta = 1.1^\circ \approx 0.0192 \text{ rad}$. Sustituyendo en la expresión anterior, se obtiene una longitud de Moiré aproximada de:

$$L_m \approx \frac{0.246 \text{ nm}}{0.0192} \approx 12.8 \text{ nm}.$$

El área correspondiente de una celda hexagonal es entonces:

$$A_m = \frac{\sqrt{3}}{2} L_m^2 \approx \frac{\sqrt{3}}{2} (12.8 \text{ nm})^2 \approx 141.7 \text{ nm}^2. \quad (1.12)$$

Esta escala es fundamental para cuantificar la densidad electrónica en simulaciones, así como para establecer el vínculo entre la geometría real del sistema y los modelos efectivos en el espacio recíproco.

Este notable aumento de la celda unitaria también implica una reducción proporcional en el tamaño de la zona de Brillouin asociada al patrón de Moiré, lo cual favorece la aparición de bandas electrónicas aplanadas y altamente correlacionadas. Así, la geometría Moiré no sólo modifica el aspecto estructural del sistema, sino que también establece el marco para la aparición de fenómenos electrónicos emergentes como la superconductividad y los aislantes correlacionados (tipo Mott).

Cuando el ángulo θ cumple ciertas condiciones de commensurabilidad entre las dos redes, se puede definir una superred periódica con una celda unitaria bien definida. Estas celdas pueden ser descritas por vectores representados en la Figura 1.8 de la forma:

$$\vec{T}_1 = m\vec{a}_1 + n\vec{a}_2, \quad \vec{T}_2 = -n\vec{a}_1 + (m+n)\vec{a}_2, \quad (1.13)$$

donde m y n son enteros que determinan la geometría de la superred conmensurable. A partir de estos, se puede calcular el ángulo de rotación correspondiente mediante:

$$\cos \theta = \frac{3m^2 + 3mn + n^2/2}{3m^2 + 3mn + n^2}. \quad (1.14)$$

A partir de esta relación, se puede seleccionar un par de enteros (m, n) que produzcan un ángulo de torsión deseado. Por ejemplo, el par $(m, n) = (31, 30)$ genera un ángulo $\theta \approx 1.1^\circ$, correspondiente al llamado ángulo mágico. Con estos valores, el número total de átomos contenidos en una celda de Moiré se estima mediante:

$$N = 4(m^2 + mn + n^2) = 4(31^2 + 31 \cdot 30 + 30^2) = 11\,164. \quad (1.15)$$

Como cada átomo de carbono contribuye con un electrón π , relevante para la conducción, se estima que una celda de Moiré en este régimen contiene aproximadamente 22 328 electrones.

Este crecimiento en la escala espacial de la celda unitaria no solo tiene implicaciones en la formulación de modelos efectivos, como el de Bistritzer–MacDonald, sino que también permite comprender la magnitud de recursos computacionales que serían necesarios para modelar el sistema de manera explícita. En esta tesis, se ha empleado una malla discreta de $N \times N$ puntos con $N = 300$, cubriendo un dominio bidimensional $[-3, 3]^2$, lo cual permite representar adecuadamente la distribución espacial de los orbitales localizados. Sin embargo, en los modelos efectivos centrados en las bandas planas, el número de grados de libertad electrónicos se reduce drásticamente (típicamente a dos o cuatro por celda de Moiré), lo que permite capturar los efectos de correlación dominantes sin necesidad de simular todos los electrones de manera directa.

La estructura de Moiré generada actúa como una nueva red de Bravais sobre la cual se forma una mini-zona de Brillouin (mBZ), más pequeña que la del grafeno monocapa. Esta mBZ determina la dispersión electrónica efectiva del sistema. Debido al gran tamaño de la celda de Moiré, para $\theta = 1.1^\circ$, los electrones se “ralentizan” y las bandas electrónicas se aplanan cerca del nivel de Fermi, lo que implica que la energía cinética de los electrones se suprime, y los efectos de correlación electrónica (habitualmente despreciables en sistemas no interactuantes) se vuelven dominantes.

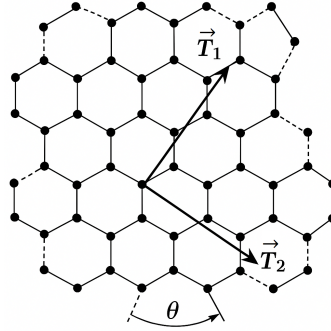


Figura 1.8: Representación esquemática de una superred de Moiré conmensurable, generada por la rotación entre dos redes hexagonales de grafeno. Los vectores \vec{T}_1 y \vec{T}_2 , definidos como combinaciones lineales enteras de los vectores de red originales \vec{a}_1 y \vec{a}_2 , determinan la celda unitaria de la superred. Figura elaborada por el autor con base en [16].

Estas bandas tienen una muy baja dispersión y generan una alta densidad de estados, lo que amplifica las interacciones electrón-electrón. Al estar tan cerca del nivel de Fermi, las interacciones electrón-electrón pueden dar lugar a: estados aislantes correlacionados (tipo Mott), pares de Cooper con simetrías no triviales (como *d-wave* o *p-wave*), estados topológicos superconductores, si la simetría del Moiré lo permite.

La estructura geométrica completa del grafeno bicapa rotado (TBG) en régimen de ángulo pequeño incluye tres regiones locales de apilamiento:

- **AA:** donde los átomos de ambas capas están directamente uno sobre otro; estas regiones presentan una elevada densidad electrónica y favorecen la formación de bandas planas, condiciones necesarias para el surgimiento de pares de Cooper.
- **AB (o Bernal):** donde un átomo de una capa se ubica en el centro de un hexágono de la otra; no concentran carga ni favorecen la aparición de bandas planas.
- **BA:** similar al AB pero con las capas invertidas.

Estas regiones, representadas en la Figura 1.9, se distribuyen periódicamente en el patrón de Moiré y juegan un rol fundamental en el acoplamiento inter-capa (ver Sección 3.3). La modulación espacial de estos dominios induce

una red de potenciales periódicos que afectan a los electrones de forma no trivial, dando lugar a bandas electrónicas altamente modificadas.

La geometría del grafeno bicapa rotado (TBG) no sólo implica una superposición estructural de capas rotadas, sino que define una plataforma única donde la interferencia entre redes produce nuevas escalas de longitud, simetrías y propiedades emergentes. Esta estructura es la base de todos los fenómenos cuánticos exóticos observados experimentalmente, incluyendo superconductividad, aislamiento de Mott (aislamiento por interacciones electrónicas que impiden la conducción pese a una banda parcialmente llena), y fases topológicas correlacionadas.

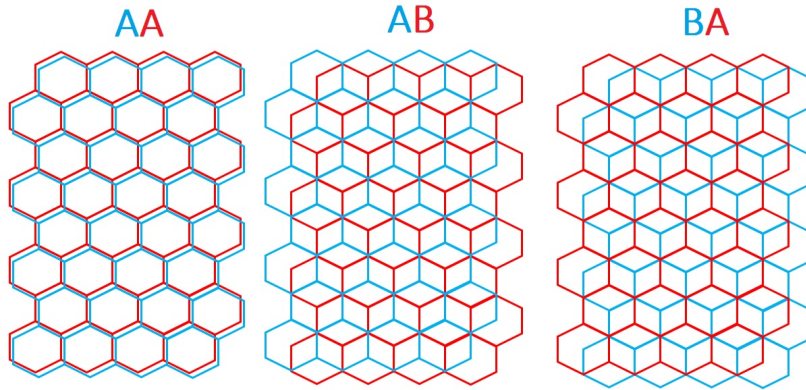


Figura 1.9: Estructura geométrica del grafeno bicapa rotado, mostrando la distribución de carga en las regiones AA, AB y BA, fundamentales para la formación de bandas planas en el TBG. Figura elaborada por el autor con base en [15].

Desde el punto de vista estructural, es importante señalar que, aunque la rotación introduce una pérdida de simetría traslacional exacta, en los ángulos conmensurables se recupera una periodicidad efectiva a gran escala. El número de átomos por celda unitaria de Moiré puede llegar a ser del orden de varios miles, lo cual representa un desafío para los métodos *ab initio*², y motiva el desarrollo de modelos efectivos de baja energía, como el de Bistritzer-MacDonald.

²En física, *ab initio* se refiere a cálculos o métodos que se basan en principios fundamentales, sin utilizar modelos o parámetros experimentales.

Complementando la comparación abordada en la Sección 1.3, entre el grafeno monocapa y el grafeno bicapa rotado (TBG), se presenta la siguiente Tabla 1.2:

Característica	Grafeno Monocapa	Grafeno Bicapa Rotado (TBG)
Periodicidad	~ 0.246 nm	$\sim 10 - 15$ nm (dependiendo del ángulo)
Bandas cercanas a Fermi	Dispersivas (Dirac)	Bandas Planas (a $\theta \approx 0.8^\circ - 1.3^\circ$) [15]
Interacciones electrónicas	Débiles	Fuertes (correlaciones dominan)
Superconductividad	No observada (excepto inducida)	Presente (a baja temperatura)
Modelo efectivo	Dirac + <i>Tight-Binding</i>	Modelo de Bistritzer-MacDonald

Tabla 1.2: Resumen comparativo del grafeno monocapa vs. bicapa rotado (TBG)/Moiré.

1.4.1. Comportamiento Electrónico

La clave de este comportamiento radica en las bandas electrónicas planas que emergen en el ángulo mágico. Estas bandas, cuya anchura se reduce a aproximadamente 10 meV frente a los cientos de meV del grafeno monocapa, son el resultado de la interferencia del patrón de Moiré, descrita por el Hamiltoniano efectivo propuesto por Bistritzer y MacDonald:

$$H = \begin{pmatrix} v_F \vec{k} \cdot \vec{\sigma} & T(\vec{r}) \\ T^\dagger(\vec{r}) & v_F \vec{k} \cdot \vec{\sigma} \end{pmatrix} \quad (1.16)$$

En este Hamiltoniano 4x4 (o 2x2 de bloques) representa dos capas de grafeno monocapa donde:

- v_f es la velocidad de Fermi del grafeno ($\sim 10^6$ m/s),
- \vec{k} es el momento relativo al punto de Dirac ($\vec{k} = \vec{q}_j - \vec{K}$, con \vec{K} un punto de la zona de Brillouin y \vec{q}_j con $j = 1, 2, 3$ son vectores de momento que definen el desfase entre las capas en el espacio recíproco),

- $\vec{\sigma}$ es el vector de las matrices de Pauli,
- $v_f \vec{k} \cdot \vec{\sigma}$ representa el Hamiltoniano de Dirac de una sola capa de grafeno en el régimen de baja energía, cerca de los puntos K o K' ,
- $T(\vec{r})$ es el término de acoplamiento que varía espacialmente con la superred. Representa el acoplamiento electrónico entre capas, el cual depende de la posición \vec{r} debido a la modulación espacial inducida por la rotación entre las capas (patrón de moiré).
- $T^\dagger(\vec{r})$ es el conjugado hermítico del acoplamiento $T(\vec{r})$, garantiza que el Hamiltoniano total sea hermítico³.

Este Hamiltoniano describe el comportamiento electrónico de los electrones en el grafeno bicapa rotado, incorporando tanto el movimiento dentro de cada capa (los términos diagonales) como el acoplamiento entre capas (los términos fuera de la diagonal). La presencia de $T(\vec{r})$ da lugar a bandas planas a ciertos ángulos de rotación (como el ángulo mágico) y el aplanamiento de las bandas disminuye la energía cinética de los electrones, amplificando las interacciones entre ellos y creando las condiciones para fenómenos colectivos como la superconductividad.

A diferencia de los superconductores tradicionales, donde los pares de Cooper se forman mediante vibraciones de la red (fonones) según la teoría BCS, en el grafeno bicapa rotado (TBG) el mecanismo parece ser no convencional, posiblemente mediado por las propias interacciones electrón-electrón. La temperatura crítica T_c depende de factores como la densidad de portadores y la separación entre capas ζ , y algunos modelos empíricos sugieren una relación de la forma:

$$k_B T_c = \frac{\beta}{\ell \zeta} \quad (1.17)$$

donde k_B es la constante de Boltzmann, β es una constante ajustada experimentalmente, y ℓ está relacionado con la escala del patrón de Moiré. En configuraciones optimizadas, como un ángulo de 1.05° o el uso de sustratos específicos como nitruro de boro hexagonal, la T_c ha alcanzado valores cercanos a 1.94 K, e incluso se han reportado incrementos hasta 3 K bajo presión

³Un operador hermítico es aquel cuyos valores propios son reales, por lo que puede representar un observable físico como la energía.

controlada.

El grafeno bicapa rotado (TBG) también exhibe estados aislantes correlacionados, como los aislantes de Mott (donde las interacciones electrónicas impiden la conducción a pesar de la ocupación parcial de bandas.), que aparecen en llenados enteros de las bandas planas ($\nu = \pm 2, \pm 4$). Estos estados se describen mediante el modelo de Hubbard:

$$H = -t \sum_{\langle i,j \rangle, \sigma} (c_{i\sigma}^\dagger c_{j\sigma} + h.c.) + U \sum_i n_{i\uparrow} n_{i\downarrow} \quad (1.18)$$

donde t representa la energía de salto entre sitios vecinos, U es la repulsión de Coulomb local, y c^\dagger, c son operadores de creación y aniquilación de electrones. Cuando la interacción repulsiva U supera ampliamente a t , los electrones se localizan, formando un estado aislante que, al doparse ligeramente, puede transicionar a un estado superconductor (ver la Figura 1.10). Esta coexistencia de fases aislantes y conductoras evoca paralelismos con los superconductores de alta temperatura, como los cupratos, aunque el grafeno bicapa rotado (TBG) opera en un régimen de temperaturas mucho más bajas.

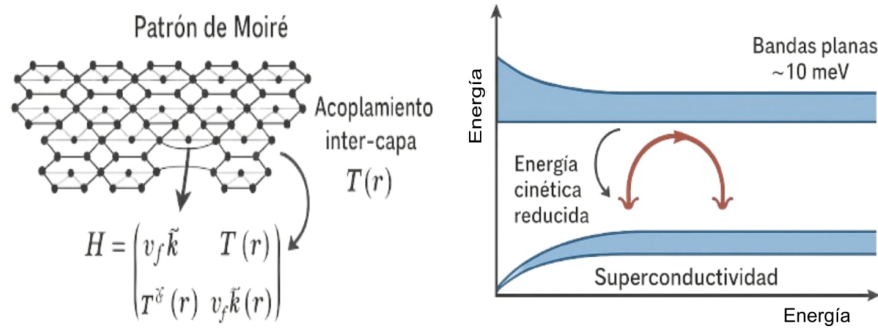


Figura 1.10: Representación esquemática del Hamiltoniano efectivo propuesto por Bistritzer y MacDonald para el grafeno bicapa rotado. La matriz incorpora los términos cinéticos de tipo Dirac $v_F \vec{k} \cdot \vec{\sigma}$ en cada capa y un término de acoplamiento inter-capas $T(\vec{r})$, que varía espacialmente debido a la superred de Moiré. Figura elaborada por el autor con base en conceptos de [13] y [16].

La simetría del patrón de Moiré introduce efectos de orden que pueden estabilizar o desestabilizar los pares de electrones superconductores. Las fluctuaciones térmicas, aunque mínimas a temperaturas cercanas al cero absoluto, también juegan un papel en la ruptura de este estado delicado. Experimentos recientes han demostrado que aplicar deformación mecánica al sistema o ajustar el ángulo de rotación con una precisión de 0.1° modifica tanto la T_c como la robustez de la superconductividad, lo que sugiere que el control preciso de las condiciones experimentales es crucial.

Otro enfoque prometedor ha sido el uso de técnicas avanzadas como la espectroscopia de túnel de barrido (STM), que permite visualizar la estructura electrónica del grafeno bicapa rotado (TBG) con resolución atómica. Estas mediciones revelan cómo la densidad de carga se concentra en las regiones AA del patrón de Moiré (Figura 1.11), proporcionando pistas sobre la formación de pares de Cooper y el origen de la superconductividad. Asimismo, estudios teóricos han propuesto que la inclusión de efectos de screening (apantallamiento) por parte del sustrato o la introducción de campos magnéticos débiles podrían modular las propiedades del sistema, abriendo nuevas líneas de investigación.

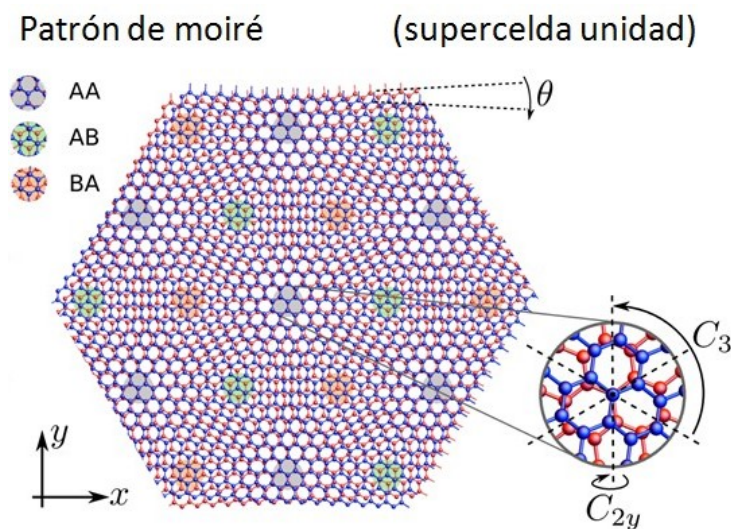


Figura 1.11: Grafeno bicapa rotado (TBG), mostrando la distribución de carga en las regiones AA, AB y BA, del patrón de Moiré. Tomado de [17].

El grafeno bicapa rotado (TBG) no solo ofrece una plataforma para estudiar la física de interacciones fuertes en sistemas bidimensionales, sino que también plantea preguntas fundamentales sobre los límites de la superconductividad en materiales ultradelgados. Desde un punto de vista práctico, si bien las temperaturas críticas actuales son demasiado bajas para aplicaciones comerciales directas, el entendimiento de estos mecanismos podría inspirar el diseño de nuevos materiales superconductores con T_c más altas. Además, la posibilidad de integrar el grafeno bicapa rotado (TBG) en dispositivos cuánticos, como qubits para computación o sensores de alta sensibilidad, añade una proyección tecnológica a su relevancia científica.

Capítulo 2

Formalismo Cuántico

El estudio de sistemas electrónicos en materiales como el grafeno y el grafeno bicapa rotado (TBG) requiere un tratamiento cuántico riguroso que permita capturar tanto la naturaleza ondulatoria de los electrones como su comportamiento colectivo en presencia de interacciones. Este capítulo introduce las herramientas fundamentales del formalismo cuántico que sustentan la descripción de estados electrónicos en sólidos, particularmente en sistemas periódicos y cuasiperiódicos.

Comenzamos con el **teorema de Bloch**, que establece la estructura general de las funciones de onda en potenciales periódicos, base esencial para entender la formación de bandas de energía. A continuación, se presentan las **funciones de Wannier**, que permiten reformular esta descripción en términos de funciones localizadas en el espacio real, útiles para construir modelos efectivos como el *Tight-Binding* o el modelo de Hubbard.

Seguidamente, abordamos el **principio de exclusión de Pauli**, un principio fundamental que restringe la ocupación electrónica y determina la estructura de los niveles en sistemas de muchos cuerpos. Finalmente, se introduce el formalismo de la **segunda cuantización**, que proporciona el lenguaje algebraico y operacional necesario para tratar de forma compacta y sistemática los sistemas cuánticos con múltiples partículas indistinguibles, facilitando la construcción de Hamiltoniano efectivo y la incorporación de interacciones electrónicas.

2.1. Teorema de Bloch

La física de la materia condensada estudia las propiedades de los materiales sólidos a nivel microscópico, y uno de los pilares fundamentales de esta disciplina es el teorema de Bloch. Este teorema fue propuesto por Felix Bloch en 1928.

Antes de sumergirnos en la formulación y aplicación de este teorema, es crucial comprender algunos conceptos clave que lo preceden. En primer lugar, consideremos la ecuación de Schrödinger, un resultado esencial dentro de la mecánica cuántica, que describe la evolución temporal de una función de onda para un sistema físico dado. Para un electrón en un potencial periódico, esta ecuación toma la forma:

$$H\psi(\vec{r}) = E\psi(\vec{r}), \quad (2.1)$$

donde H es el operador Hamiltoniano que representa la energía total del sistema, $\psi(\vec{r})$ es la función de onda del electrón y E es la energía del electrón.

Un aspecto crucial en la física de la materia condensada es la periodicidad del potencial cristalino, que da lugar a la formación de bandas de energía en lugar de niveles discretos. La resolución directa de la ecuación de Schrödinger para un potencial periódico es computacionalmente desafiante debido a la complejidad de la interacción entre los electrones y los átomos en un sólido.

Para el caso de los cristales, Bloch demostró que las funciones de onda $\psi_n(\vec{k}, \vec{r})$, las cuales son soluciones de la ecuación de Schrödinger con un potencial periódico cuya periodicidad coincide con la de la red cristalina, corresponden a ondas planas moduladas por una función $u_n(\vec{k}, \vec{r})$ donde esta depende del vector de onda \vec{k} y cuenta con la misma periodicidad de la red, es decir,

$$\psi_n(\vec{k}, \vec{r}) = u_n(\vec{k}, \vec{r})e^{i\vec{k}\cdot\vec{r}}, \quad (2.2)$$

Esta forma funcional indica que, aunque los electrones están sujetos a un potencial periódico complejo, sus funciones de onda pueden describirse como una onda plana multiplicada por una función periódica, lo cual implica que su comportamiento puede entenderse, en muchos aspectos, como el de partículas libres, pero con ciertas restricciones impuestas por la simetría de la red cristalina. Aquí, n representa el índice de banda electrónica. Los electrones confinados en un potencial periódico se conocen como electrones de

Capítulo 2. Formalismo Cuántico

2.2. Funciones de Wannier

Bloch a diferencia de los electrones libres. Las funciones de Bloch presentan periodicidad en el espacio recíproco, es decir, se cumple:

$$\psi_n(\vec{k}, \vec{r}) = \psi_n(\vec{k} + \vec{G}, \vec{r}), \quad (2.3)$$

donde \vec{G} representa un vector de la red recíproca. Esta periodicidad implica que la información física de los electrones se encuentra contenida en la primera zona de Brillouin.

Por la equivalencia de \vec{k} con $\vec{k} + \vec{K}_m$, la función $E_n(\vec{k})$ es periódica en el espacio k y es suficiente conocerla en la primera zona de Brillouin. $E_n(\vec{k})$ es la relación de dispersión. Una forma simplificada de obtener $E_n(\vec{k})$ consiste en resolver la ecuación de Schrödinger por medio de la aproximación del electrón casi libre donde se supone que la energía total del electrón es siempre grande en comparación con la energía potencial periódica.

En estas condiciones (del TBG, Twisted Bilayer Graphene) las bandas permisibles serán anchas y las regiones de energía prohibida angostas, esto depende de la intensidad del potencial periódico y su modulación. Los estados electrónicos forman bandas y brechas en el espacio recíproco. Los bordes de las bandas se encuentran en la frontera de la zona de Brillouin (esto puede visualizarse como una ‘plegadura’ de la curva de dispersión libre, donde en cada punto de intersección con la zona de Brillouin se abre una brecha debida a la reflexión Bragg), en estos puntos se cumple la ley de Bragg y como consecuencia la onda se refleja destruyendo la onda que venía con la misma longitud de onda, lo que provoca un estado estacionario.

La teoría de bandas, fundamentada en la simetría traslacional de los cristales, permite comprender cómo los estados electrónicos se organizan en bandas de energía. Este marco teórico sienta las bases para el desarrollo de modelos efectivos que describen la dinámica de los electrones en materiales reales, como los que se abordarán en las secciones posteriores.

2.2. Funciones de Wannier

Introducidas por Gregory Wannier en 1937, estas funciones localizadas (Figura 2.1) se definen como la transformada de Fourier inversa sobre los autoestados de las funciones de Bloch asociadas a una banda n .

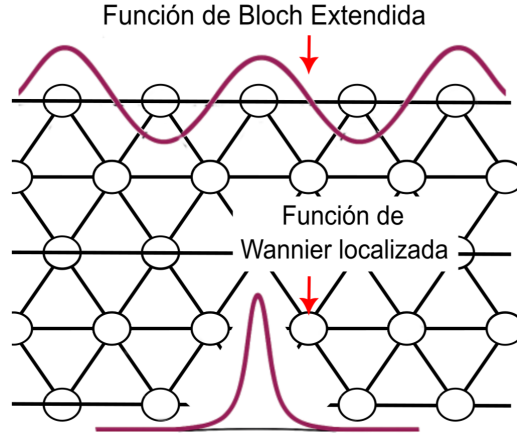


Figura 2.1: Comparación entre una función de Bloch extendida (parte superior) y una función de Wannier localizada (parte inferior). Las funciones de Bloch reflejan la periodicidad del cristal en el espacio \vec{k} , mientras que las funciones de Wannier permiten describir la física local en el espacio real. Figura elaborada por el autor con base en [3].

En sistemas cristalinos, una descripción natural de los estados electrónicos se da en términos de funciones de Bloch, las cuales reflejan la periodicidad del potencial. Sin embargo, para ciertos modelos efectivos (como el modelo de *Tight-Binding* o el modelo de Hubbard) es más conveniente una base de funciones localizadas en el espacio real. Las funciones de Wannier permiten esta transición al proporcionar una representación ortonormal y localizada de los estados electrónicos en una red periódica.

$$w_n(\vec{r} - \vec{R}) = \frac{1}{\sqrt{N}} \sum_{\vec{k}} e^{-i\vec{k} \cdot \vec{R}} \psi_n(\vec{k}, \vec{r}), \quad (2.4)$$

donde:

- $w_n(\vec{r} - \vec{R})$ es la función de Wannier localizada en la celda de red \vec{R} ,
- $\psi_n(\vec{k}, \vec{r})$ es la función de Bloch para la banda n ,
- N es el número total de puntos \vec{k} en la primera zona de Brillouin,
- la suma recorre todos los vectores de onda \vec{k} de la primera zona de Brillouin (en la red recíproca).

Capítulo 2. Formalismo Cuántico

2.2. Funciones de Wannier

Al aplicar esta transformación, se obtienen las funciones de Wannier localizadas en los sitios de la red cristalina, lo que permite una descripción más detallada de los electrones en el material. Recordando que las funciones de Bloch se expresan como:

$$\psi_n(\vec{k}, \vec{r}) = e^{i\vec{k}\cdot\vec{r}} u_n(\vec{k}, \vec{r}), \quad (2.5)$$

la función de Wannier puede expresarse también como:

$$w_n(\vec{r} - \vec{R}) = \frac{1}{\sqrt{N}} \sum_{\vec{k}} e^{i\vec{k}\cdot(\vec{r}-\vec{R})} u_n(\vec{k}, \vec{r}). \quad (2.6)$$

Este cambio de base revela la dualidad entre descripciones extendidas (espacio \vec{k}) y localizadas (espacio real). Mientras que las funciones de Bloch están distribuidas por todo el cristal, las funciones de Wannier están centradas en un sitio \vec{R} y caen rápidamente fuera de su vecindad, siendo ideales para modelar la física local en sólidos.

Las funciones de Wannier tienen varias propiedades clave:

- Son ortonormales:

$$\langle w_n(\vec{r} - \vec{R}) | w_{n'}(\vec{r} - \vec{R}') \rangle = \delta_{n,n'} \delta_{\vec{R},\vec{R}'}. \quad (2.7)$$

- Forman una base completa para una banda o conjunto de bandas.
- Capturan la localización espacial de los electrones, facilitando el análisis de efectos de correlación, interacciones locales y acoplamientos entre sitios vecinos.

Esta representación es especialmente útil para:

- Construir modelos *Tight-Binding* precisos a partir de primeros principios.
- Analizar la localización topológica (funciones de Wannier pueden o no ser localizables en sistemas topológicos).
- Describir con precisión bandas planas en sistemas como el grafeno bicapa rotado.

En el contexto del grafeno y del grafeno bicapa rotado (TBG), las funciones de Wannier han sido fundamentales para derivar un Hamiltoniano efectivo de baja energía, ya que permiten representar los orbitales tipo p_z (π) del carbono en una base localizada, y definir interacciones electrónicas efectivas entre celdas de Moiré. De hecho, muchos modelos de tipo Hubbard generalizado y de superconductividad en bandas planas se construyen sobre esta base.

Así, las funciones de Wannier constituyen una pieza central entre la teoría de bandas y los modelos efectivos de muchos cuerpos que se abordarán en las próximas secciones.

En este trabajo, la función de Wannier ha sido representada numéricamente mediante una envolvente gaussiana centrada en una región tipo AA del patrón de Moiré, modulada por funciones cosenoidales. La forma funcional adoptada en las simulaciones computacionales corresponde a:

$$w(\vec{r}) \approx e^{-\frac{|\vec{r}|^2}{2\sigma^2}} \cos(k_x x) \cos(k_y y),$$

donde $\sigma = 0.4$ (en unidades arbitrarias) representa el ancho de localización espacial de la función, mientras que $k_x = k_y = 5\pi$ introducen una modulación periódica que imita la estructura local de la superred de Moiré. Esta elección refleja adecuadamente la localización espacial de los orbitales relevantes y permite aproximar de forma eficiente los estados electrónicos en el régimen de bandas planas, especialmente en las regiones de apilamiento tipo AA donde se concentra la densidad electrónica.

2.3. Principio de Exclusión de Pauli

El principio de exclusión de Pauli, propuesto por Wolfgang Pauli en 1925, es un postulado fundamental para describir sistemas formados por partículas fermiónicas, como los electrones. Este principio afirma que ningún par de fermiones idénticos puede ocupar simultáneamente el mismo estado cuántico. En otras palabras, dos electrones no pueden tener todos sus números cuánticos iguales (posición, momento, espín, etc.) dentro de un sistema cuántico.

Esta propiedad está directamente relacionada con la naturaleza antisimétrica de la función de onda que describe un sistema de fermiones. Si inter-

Capítulo 2. Formalismo Cuántico

2.3. Principio de Exclusión de Pauli

cambiamos las posiciones de dos electrones en la función de onda total del sistema, esta cambia de signo:

$$\Psi(\vec{r}_1, \vec{r}_2) = -\Psi(\vec{r}_2, \vec{r}_1). \quad (2.8)$$

donde \vec{r}_1 y \vec{r}_2 representan las coordenadas espaciales de los electrones 1 y 2, respectivamente. Esta antisimetría implica que si ambos electrones estuvieran en el mismo estado (es decir, $\vec{r}_1 = \vec{r}_2$), la función de onda se anularía automáticamente:

$$\Psi(\vec{r}, \vec{r}) = -\Psi(\vec{r}, \vec{r}) \Rightarrow \Psi(\vec{r}, \vec{r}) = 0. \quad (2.9)$$

Esto implica que dos electrones idénticos no pueden ocupar simultáneamente el mismo estado cuántico, lo que constituye una manifestación directa del principio de exclusión de Pauli.

Este principio tiene profundas implicaciones en la física del estado sólido, donde los electrones ocupan estados extendidos (como los de Bloch) o localizados (como los de Wannier) dentro de una red cristalina. En modelos efectivos como el modelo de Hubbard, esta restricción se refleja naturalmente al describir la ocupación de los sitios de la red, representado en la Figura 2.2.

Para representar los electrones en una red discreta, se utilizan operadores de creación $c_{i,\sigma}^\dagger$ y aniquilación $c_{i,\sigma}$, que añaden o eliminan un electrón con espín σ en el sitio i . Estos operadores obedecen relaciones de anticomutación típicas de partículas fermiónicas:

$$\{c_{i,\sigma}, c_{j,\sigma'}^\dagger\} = \delta_{ij}\delta_{\sigma\sigma'}, \quad \{c_{i,\sigma}, c_{j,\sigma'}\} = \{c_{i,\sigma}^\dagger, c_{j,\sigma'}^\dagger\} = 0. \quad (2.10)$$

Esto implica que intentar crear dos veces el mismo estado cuántico (por ejemplo, dos electrones con el mismo espín en el mismo sitio), el resultado es cero. Esta anulación refleja matemáticamente la imposibilidad de una doble ocupación idéntica, ver Figura 2.2, en cumplimiento del principio de exclusión de Pauli.

El modelo de Hubbard, que analizaremos más adelante en detalle, permite modelar la interacción entre electrones en una red. Su forma más simple se escribe como:

$$H = -t \sum_{\langle i,j \rangle, \sigma} \left(c_{i,\sigma}^\dagger c_{j,\sigma} + h.c. \right) + U \sum_i n_{i,\uparrow} n_{i,\downarrow}, \quad (2.11)$$

donde:

- t es el parámetro de salto o *hopping* entre sitios vecinos $\langle i, j \rangle$.
- $c_{i,\sigma}^\dagger$ crea un electrón de espín σ en el sitio i .
- $n_{i,\sigma} = c_{i,\sigma}^\dagger c_{i,\sigma}$ es el operador número (que cuenta los electrones con espín σ en el sitio i).
- U es la energía de repulsión cuando un sitio está doblemente ocupado.
- *h.c.* significa *hermitian conjugate*, es decir, el término conjugado hermitico que garantiza que el Hamiltoniano sea un operador hermítico (o autoadjunto), condición necesaria para que represente un observable físico.

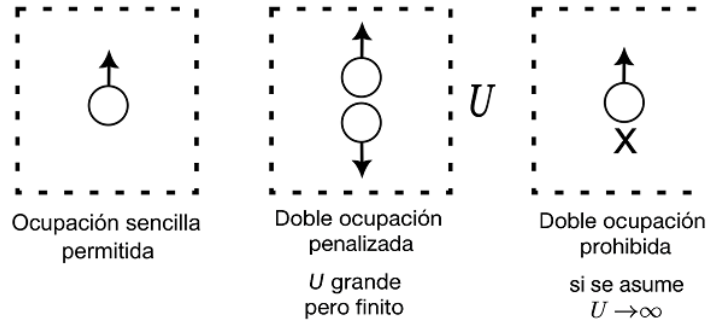


Figura 2.2: Ilustración esquemática de la ocupación de un sitio en una red. (Izquierda) Una sola ocupación permitida por el principio de exclusión de Pauli. (Centro) Doble ocupación con espines opuestos, permitida, pero penalizada por la energía U . (Derecha) Doble ocupación con espines iguales, prohibida por el principio de exclusión. Figura elaborada por el autor con base en [4].

En este Hamiltoniano, el primer término describe el movimiento de los electrones a través de la red, mientras que el segundo penaliza energéticamente la doble ocupación de un mismo sitio (cuando hay un electrón con espín arriba y otro con espín abajo en el mismo i). Esta doble ocupación está permitida formalmente por la mecánica cuántica (ya que los espines son

distintos), pero el término U introduce una energía que desalienta esta configuración. En el régimen $U \gg t$, la energía de repulsión es tan grande que los electrones tienden a distribuirse de forma que evitan la doble ocupación de un mismo sitio, dando lugar a fenómenos de correlación electrónica fuerte, como la formación de aislantes de Mott (aislamiento inducido por correlaciones electrónicas fuertes, incluso con bandas parcialmente ocupadas).

2.4. Segunda Cuantización

En mecánica cuántica, los estados de una partícula se describen comúnmente mediante funciones de onda $\psi(\vec{r})$, que contienen la información probabilística sobre su posición, energía y otras propiedades. Sin embargo, cuando se trata de sistemas con muchos electrones (como sólidos, materiales cuánticos o sistemas fuertemente correlacionados) esta descripción se vuelve insuficiente. Aquí entra en juego la segunda cuantización, un formalismo que permite tratar de forma natural los sistemas donde el número de partículas puede variar y donde las interacciones entre ellas juegan un papel crucial.

La segunda cuantización es un marco matemático donde no se cuantizan las partículas, sino los campos que las describen. Es decir, los objetos fundamentales ya no son funciones de onda individuales, sino operadores que crean o destruyen partículas en determinados estados cuánticos. En sistemas de fermiones, como los electrones en materiales sólidos, este formalismo es clave para describir efectos como la superconductividad y la formación de estados correlacionados.

El concepto de segunda cuantización fue introducido por Paul Dirac en el contexto de la teoría de campos cuánticos, y ha sido fundamental en la formulación de teorías modernas, como la teoría de campos cuánticos, la superconductividad, los condensados de Bose-Einstein, y la teoría de electrones en sólidos. Este enfoque es especialmente potente para estudiar fermiones (como los electrones) que obedecen el principio de exclusión de Pauli. En este formalismo, cada estado cuántico puede estar ocupado por 0 o 1 electrón (en el caso de fermiones), y esto se implementa automáticamente a través de las propiedades algebraicas de los operadores. En este sentido, la segunda cuantización es una herramienta poderosa para describir no solo las partículas, sino también las restricciones impuestas por la estadística cuántica, como la

estadística de Fermi-Dirac.

En la base de la segunda cuantización se encuentran los operadores de:

- Creación $\hat{c}_{\vec{k},\sigma}^\dagger$: crea un electrón con momento \vec{k} y espín σ , como se representa en la Figura 2.3.
- Aniquilación $\hat{c}_{\vec{k},\sigma}$: destruye un electrón con las mismas características (ver Figura 2.3).

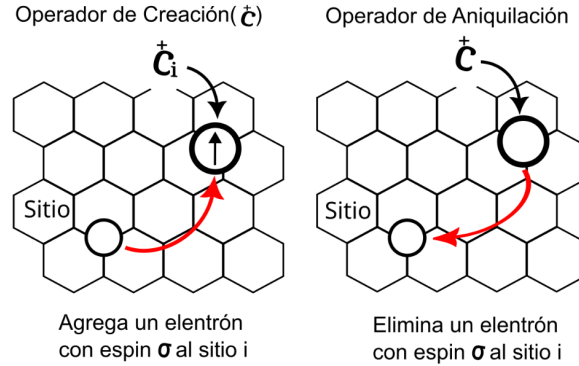


Figura 2.3: Esquema de la acción de los operadores de creación y aniquilación sobre estados ocupados y vacíos. Los operadores actúan sobre el vacío cuántico $|0\rangle$, creando y destruyendo fermiones con momento y espín definidos. Figura elaborada por el autor con base en conceptos de [1] y [3].

Estos operadores obedecen las siguientes **relaciones de anticonmutación** (propias de fermiones):

$$\{\hat{c}_{\vec{k},\sigma}, \hat{c}_{\vec{k}',\sigma'}^\dagger\} = \delta_{\vec{k},\vec{k}'} \delta_{\sigma,\sigma'}; \quad \{\hat{c}_{\vec{k},\sigma}, \hat{c}_{\vec{k}',\sigma'}\} = \{\hat{c}_{\vec{k},\sigma}^\dagger, \hat{c}_{\vec{k}',\sigma'}^\dagger\} = 0, \quad (2.12)$$

donde:

- $\delta_{\vec{k},\vec{k}'}$ es el Delta de Kronecker que vale 1 si $\vec{k} = \vec{k}'$ y 0 si no. Indica que los operadores solo tienen una contribución no nula si se refieren al mismo vector de onda.
- $\delta_{\sigma,\sigma'}$ es el Delta de Kronecker para el espín. También vale 1 solo si $\sigma = \sigma'$. Es decir, los operadores afectan solo a estados idénticos en momento y espín.

- $\{, \}$ denota el anticomutador, definido como:

$$\{A, B\} = AB + BA.$$

Para fermiones, los operadores no conmutan, sino que anticomutan. Esta propiedad es crucial para reflejar el principio de exclusión de Pauli: no puede haber dos fermiones en el mismo estado.

Lo cual nos dice que:

- Si se intenta crear y luego destruir (o viceversa) un electrón en un estado (\vec{k}, σ) , el resultado es 1 si ese estado es el mismo.
- Pero si son estados distintos, el resultado es 0, como corresponde a partículas indistinguibles que obedecen la estadística de Fermi-Dirac.

Estas propiedades aseguran automáticamente que no puede haber más de un electrón con los mismos números cuánticos, implementando el principio de exclusión de Pauli de forma natural. Es por eso que se utilizan anticomutadores en lugar de conmutadores: reflejan que intentar crear dos fermiones en el mismo estado cuántico da como resultado cero, es decir, está prohibido. Esta característica está incorporada directamente en la estructura algebraica de los operadores.

En el contexto del grafeno bicapa rotado, el uso de la segunda cuantización es fundamental. Debido a la rotación relativa entre las capas, se forma una superred de Moiré que modifica profundamente la estructura electrónica, generando bandas planas con alta densidad de estados cerca del nivel de Fermi. En estas condiciones, las interacciones electrón-electrón se vuelven dominantes y requieren un tratamiento cuántico riguroso.

Los electrones en grafeno bicapa rotado (TBG) pueden describirse mediante operadores que incluyen, además del momento \vec{k} y espín σ , los grados de libertad de valle $\tau \in \{+1, -1\}$ correspondientes a los puntos \mathbf{K} y \mathbf{K}' de la zona de Brillouin del grafeno:

$$\hat{c}_{\vec{k}, \sigma, \tau}, \quad \hat{c}_{\vec{k}, \sigma, \tau}^\dagger. \quad (2.13)$$

En este lenguaje, los estados electrónicos se construyen aplicando operadores de creación sobre el vacío cuántico $|0\rangle$, y la evolución del sistema se describe mediante Hamiltonianos escritos en términos de estos operadores.

La segunda cuantización facilita:

- El tratamiento riguroso de sistemas con muchos cuerpos indistinguibles.
- La construcción de modelos efectivos (como el modelo Hubbard generalizado).
- El análisis de fases correlacionadas como el ferromagnetismo, la superconductividad y los aislantes de Mott (estado aislante generado por interacciones de muchos cuerpos en una banda no completamente vacía).

Este formalismo complementa a las funciones de Bloch y Wannier, ya que mientras estas definen la base sobre la cual se construyen los estados cuánticos en una red periódica, la segunda cuantización describe cómo se ocupan dichos estados y cómo interactúan las partículas en ellos. Es una herramienta indispensable para formular teorías como la BCS de la superconductividad o los modelos de interacción tipo Hubbard, y su poder radica en permitir un tratamiento natural y eficiente de sistemas de muchos cuerpos, donde las correlaciones cuánticas y la estadística de Fermi-Dirac son esenciales.

Capítulo 3

Modelo de Hubbard

La comprensión de fenómenos emergentes en materiales fuertemente correlacionados, como la superconductividad no convencional, requiere modelos efectivos que capturen de forma precisa la interacción entre los electrones. Uno de los modelos más importantes en este contexto es el modelo de Hubbard, que permite describir de manera sencilla pero potente los efectos de correlación electrónica en sistemas de baja dimensionalidad o con bandas estrechas.

En particular, el modelo de Hubbard ha sido clave en el estudio de materiales como los óxidos de cobre (cupratos), y más recientemente, en materiales bidimensionales como el grafeno bicapa rotado (TBG), donde emergen bandas planas que amplifican las interacciones electrón-electrón. En estos sistemas, la cinética electrónica se ve fuertemente suprimida y las propiedades electrónicas vienen dominadas por los efectos de interacción.

Las bandas planas inducidas por la superred de Moiré en el grafeno bicapa rotado (TBG) conducen a una alta densidad de estados cerca del nivel de Fermi, facilitando la aparición de estados fuertemente correlacionados como aislantes de Mott (donde las repulsiones electrónicas impiden la conducción pese a la ocupación parcial de la banda) y fases superconductoras. En este contexto, el modelo de Hubbard proporciona un marco simple pero efectivo para explorar la competencia entre la itinerancia de los electrones (término de *hopping*) y su repulsión local (interacción de Coulomb).

Este modelo se basa en dos ingredientes fundamentales:

- Un término cinético, que permite el movimiento (*hopping*) de electrones entre sitios adyacentes de una red,
- Un término de interacción local, que penaliza la doble ocupación de un mismo sitio, con una energía U .

El modelo captura así el equilibrio entre la delocalización cuántica y la repulsión electrónica, dos efectos esenciales en la física de materiales cuánticos.

La importancia del modelo de Hubbard se ve reflejada en su capacidad para describir una amplia gama de fases electrónicas: desde metales correlacionados y aislantes de Mott, hasta superconductividad emergente inducida por correlaciones. Además, su formulación en términos del formalismo de segunda cuantización lo hace compatible con los desarrollos presentados en los capítulos anteriores.

La relevancia del modelo de Hubbard no solo radica en su simplicidad formal, sino en su capacidad para capturar la esencia de los sistemas donde las interacciones electrónicas dominan sobre la energía cinética. En materiales como el grafeno bicapa rotado, donde las bandas planas amplifican los efectos de correlación, este modelo adquiere un papel central para entender la aparición de fases exóticas, como la superconductividad no convencional o los estados aislantes correlacionados.

A lo largo de este capítulo se explorarán las distintas formulaciones del modelo, sus implicaciones físicas y su conexión con las propiedades emergentes observadas en sistemas de baja dimensionalidad, proporcionando un marco fundamental para el análisis de la física del grafeno bicapa rotado (TBG) en el régimen de fuertes correlaciones.

3.1. Hamiltoniano de Hubbard

En el modelo de Hubbard los electrones pueden saltar entre sitios vecinos de una red cristalina, y experimentan una interacción de tipo local cuando coinciden en el mismo sitio. Esta formulación permite abordar fenómenos como la transición de Mott, el magnetismo de origen electrónico y, en ciertos regímenes, la superconductividad no convencional inducida por correlaciones.

El Hamiltoniano de Hubbard estándar se expresa como:

$$H = -t \sum_{\langle i,j \rangle, \sigma} \left(c_{i\sigma}^\dagger c_{j\sigma} + h.c. \right) + U \sum_i n_{i\uparrow} n_{i\downarrow}, \quad (3.1)$$

donde:

- $c_{i\sigma}^\dagger$ es el operador de creación de un electrón con espín σ en el sitio i ;
- $c_{j\sigma}$ es el operador de aniquilación de un electrón con espín σ en el sitio j ;
- $n_{i\sigma} = c_{i\sigma}^\dagger c_{i\sigma}$ es el operador número para contar electrones con espín σ en el sitio i ;
- t es el parámetro de *hopping*, que representa la amplitud de probabilidad para que un electrón se desplace entre sitios vecinos $\langle i, j \rangle$;
- U es la energía de repulsión Coulombiana cuando dos electrones de espín opuesto ocupan el mismo sitio.

El primer término describe la cinética del sistema; permite que los electrones se deslocalicen a través de la red, lo cual favorece un comportamiento metálico. El segundo término penaliza la doble ocupación de un mismo sitio, introduciendo así las correlaciones electrónicas que pueden dar lugar a fases no triviales como aislantes de Mott (aislamiento electrónico originado en efectos de correlación, no explicable por teorías de bandas independientes) o superconductores correlacionados.

Este modelo ha sido ampliamente estudiado tanto en una dimensión como en dimensiones mayores, y no posee solución exacta en su forma general. Sin embargo, ha sido crucial en el entendimiento de fenómenos en materiales reales, incluyendo cupratos, óxidos de transición, y recientemente, el grafeno

bicapa rotado, donde la presencia de bandas planas amplifica los efectos del término de interacción U .

En el contexto del grafeno bicapa rotado (TBG), la aparición de bandas planas cerca del ángulo mágico disminuye drásticamente el ancho de banda efectivo, lo que implica una fuerte supresión del término cinético respecto al término de interacción U . En este régimen, el modelo de Hubbard se vuelve especialmente adecuado para capturar la formación de fases correlacionadas y superconductividad.

Para modelar estos sistemas, es común considerar una red efectiva en el espacio de Moiré, donde el parámetro t puede ser extraído del acoplamiento entre los estados de Wannier y el parámetro U representa la repulsión local entre dos electrones en la misma celda de Moiré.

El estudio del modelo de Hubbard sobre redes con simetrías específicas, como la red triangular o de Kagome (una red bidimensional compuesta por triángulos y hexágonos entrelazados, en la que la geometría impide que se minimicen simultáneamente todas las interacciones entre sitios vecinos), asociada a los patrones de Moiré, permite analizar no solo la competencia entre itinerancia e interacción, sino también los efectos de la geometría en la aparición de fases exóticas.

3.1.1. Límites Físicos

El modelo de Hubbard captura la competencia entre el movimiento de los electrones en una red cristalina y su repulsión cuando comparten un mismo sitio. Esta competencia está gobernada por la relación entre los dos parámetros principales del modelo: la energía de salto t y la energía de interacción local U . Analizar los límites extremos $U \gg t$ y $U \ll t$ permite entender los comportamientos físicos dominantes del sistema.

a) Límite $U \ll t$: Régimen débilmente correlacionado.

Cuando la energía de interacción U es mucho menor que la energía de salto t , los electrones pueden moverse libremente por la red sin una penalización significativa por doble ocupación. En este régimen, el sistema se comporta de manera similar a un metal de electrones libres, donde

Capítulo 3. Modelo de Hubbard

3.1. Hamiltoniano de Hubbard

las correlaciones electrónicas son pequeñas y pueden tratarse como una corrección perturbativa. El modelo de Hubbard se aproxima en este caso a una versión corregida del modelo de *Tight-Binding* independiente.

Este límite es útil para describir materiales metálicos convencionales, donde los efectos de interacción no dominan el comportamiento.

b) Límite $U \gg t$: Régimen fuertemente correlacionado.

Cuando la interacción de Coulomb U es mucho mayor que la energía de salto t , la doble ocupación de un sitio se vuelve con un alto costo energético, por lo cual se suprime la doble ocupación electrónica. Los electrones minimizan la doble ocupación debido a la fuerte repulsión local, favoreciendo configuraciones con un electrón por sitio. Este régimen da lugar a un aislante de Mott (estado de no conducción originado por repulsión de Coulomb, a pesar de una estructura de bandas metálica), donde el sistema no conduce electricidad a pesar de tener una banda parcialmente llena, debido a la repulsión electrónica.

En este límite, el modelo de Hubbard se aproxima por un modelo de Heisenberg efectivo, que describe interacciones espín-espín entre electrones localizados:

$$H_{Heisenberg} = J \sum_{\langle i,j \rangle} \mathbf{S}_i \cdot \mathbf{S}_j, \quad \text{con } J = \frac{4t^2}{U}. \quad (3.2)$$

Aquí, \mathbf{S}_i representa el espín del electrón en el sitio i , y el signo de $J > 0$ favorece el acoplamiento antiferromagnético entre espines vecinos.

En particular, el régimen $U \gg t$, característico del grafeno bicapa rotado (TBG) a ángulo mágico, está asociado a una física dominada por fuertes correlaciones electrónicas. En este sistema, el aplanamiento extremo de las bandas reduce significativamente el parámetro t , incrementando la razón U/t y situando al sistema en un régimen fuertemente correlacionado. Esta condición hace especialmente relevante el uso del modelo de Hubbard, ya que permite capturar la aparición de fases emergentes como estados aislantes correlacionados y la superconductividad no convencional observada experimentalmente en el grafeno bicapa rotado (TBG).

3.2. Hamiltoniano Bistritzer-MacDonald

Una descripción teórica precisa del grafeno bicapa rotado (TBG) requiere capturar los efectos del patrón de Moiré que surge al rotar ligeramente una capa de grafeno sobre otra, conocido como “ángulo mágico” ($\sim 1.1^\circ$), la estructura de bandas del sistema presenta una fuerte renormalización, dando lugar a bandas planas y fenómenos fuertemente correlacionados como la superconductividad y estados aislantes. Para describir el comportamiento electrónico cerca del nivel de Fermi, es esencial emplear un modelo efectivo que conserve la física relevante a bajas energías. En este contexto, el modelo propuesto por Bistritzer y MacDonald ha demostrado ser una herramienta teórica fundamental.

El modelo de Bistritzer-MacDonald parte de una aproximación de baja energía basada en la expansión alrededor de los puntos de Dirac de cada capa, como se observa en la Figura 3.1, teniendo en cuenta el pequeño ángulo de rotación. Cada capa se modela inicialmente como una hoja de grafeno monocapa con Hamiltoniano tipo Dirac, y la rotación introduce un acoplamiento entre las capas que varía espacialmente debido al patrón de Moiré.

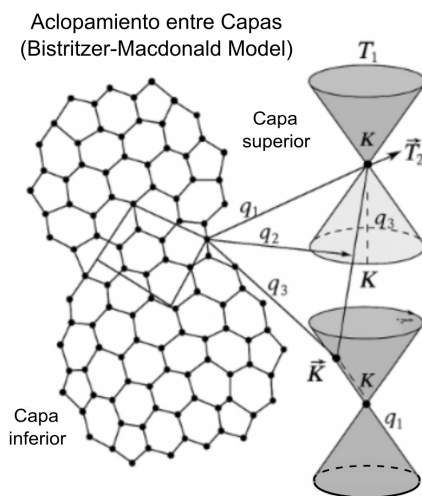


Figura 3.1: Esquema visual del acoplamiento entre capas y los vectores \vec{q}_j . Figura elaborada por el autor con base en conceptos de [16].

Capítulo 3. Modelo de Hubbard

3.3. Acoplamiento Inter-Capa

El Hamiltoniano total se escribe como en la Ecuación (1.16):

$$H = \begin{pmatrix} H_1(\vec{k}) & T(\vec{r}) \\ T^\dagger(\vec{r}) & H_2(\vec{k}) \end{pmatrix} \quad (3.3)$$

donde:

- $H_{1,2}(\vec{k}) = -i\hbar v_F \vec{\sigma} \cdot \left(\vec{k} \mp \frac{\vec{K}_\theta}{2} \right)$ son los Hamiltonianos de Dirac para cada capa (rotados por un ángulo $\pm\theta/2$);
- $\vec{\sigma}$ son las matrices de Pauli que actúan en el espacio de subredes (A y B);
- \vec{K}_θ representa la rotación del punto de Dirac de cada capa;
- $T(\vec{r})$ es el término de acoplamiento inter-capa, que incluye la modulación periódica espacial inducida por la red de Moiré.

3.3. Acoplamiento Inter-Capa

En el grafeno bicapa rotado, los electrones pueden tunelarse de una capa a otra, y este acoplamiento inter-capa es modulado espacialmente por el patrón de Moiré que surge al rotar una capa respecto a la otra. Para describir esta interacción, se introducen términos de *hopping* entre las capas que dependen del desplazamiento relativo entre átomos de ambas capas. El acoplamiento inter-capa se expresa en función de tres vectores de transferencia \vec{q}_j , que conectan los puntos de Dirac de una capa con los de la otra. Bistritzer y MacDonald propusieron un modelo efectivo para este acoplamiento inter-capa, formulado mediante una expansión en modos armónicos (expansión de Fourier), que captura la modulación espacial inducida por el patrón de Moiré. La forma general del término se puede escribir como una matriz de acoplamiento que conecta puntos equivalentes en las capas superior e inferior:

$$H_{inter}(\vec{r}) = \sum_{j=1}^3 T_j e^{i\vec{q}_j \cdot \vec{r}}, \quad (3.4)$$

donde:

- \vec{q}_j son vectores de la red de Moiré que conectan los puntos K de una capa con los K de la otra capa;
- T_j son matrices 2×2 que actúan sobre las subredes A/B describen la amplitud del túnel entre capas;
- \vec{r} es la posición dentro de la supercelda de Moiré.

Las matrices T_j representan la amplitud de túnel entre las capas en distintas configuraciones de apilamiento (AA, AB, BA). Estas matrices capturan el carácter anisotrópico del acoplamiento y son cruciales para reproducir las bandas planas observadas cerca del ángulo mágico. Estas matrices tienen la forma:

$$\begin{aligned}
 T_1 &= w_0\sigma_0 + w_1\sigma_x, & T_2 &= w_0\sigma_0 + w_1\left(-\frac{1}{2}\sigma_x + \frac{\sqrt{3}}{2}\sigma_y\right), \\
 T_3 &= w_0\sigma_0 + w_1\left(-\frac{1}{2}\sigma_x - \frac{\sqrt{3}}{2}\sigma_y\right), & & (3.5)
 \end{aligned}$$

donde:

- w_0 representa el acoplamiento inter-capas en regiones AA (centro de celdas de Moiré);
- w_1 representa el acoplamiento en regiones AB/BA (bordes de las celdas de Moiré);
- σ_0 es la matriz identidad, y $\sigma_{x,y}$ son matrices de Pauli en el espacio de subredes.

Estos términos modulan fuertemente la estructura de bandas del sistema, llevando a la formación de bandas planas en el ángulo mágico.

3.4. Aproximación Baja Energía

El objetivo del modelo es obtener una descripción efectiva del espectro electrónico cerca del nivel de Fermi, donde se localizan las bandas planas. Para ello, se proyecta el Hamiltoniano efectivo de baja energía sobre una base reducida que incluye únicamente los estados cercanos a los puntos de

Capítulo 3. Modelo de Hubbard

3.4. Aproximación Baja Energía

Dirac (valles K y K'), ignorando las contribuciones de bandas más alejadas energéticamente. En muchos casos, el análisis se restringe a un solo valle y un solo espín, lo cual simplifica el tratamiento sin perder generalidad en el régimen de baja energía:

$$H_{eff} = v_F \tau_z (\sigma_x k_x + \sigma_y k_y) + H_{inter}(\vec{r}), \quad (3.6)$$

donde:

- v_F es la velocidad de Fermi del grafeno monocapa;
- τ_z distingue entre los valles K y K' ; las capas, en cambio, se diferencian mediante otros índices, aunque en algunas formulaciones también se emplea un índice análogo para diferenciarlas;
- $\sigma_{x,y}$ son matrices de Pauli que actúan sobre las subredes A y B;
- H_{inter} representa el acoplamiento espacialmente modulado entre capas, derivado del modelo efectivo presentado anteriormente.

Cerca de los puntos de Dirac K y K' , las bandas electrónicas del grafeno monocapa muestran una dispersión lineal. Al aplicar una pequeña rotación entre capas, se generan nuevos puntos de acoplamiento en el espacio recíproco debido al patrón de Moiré, y el modelo efectivo puede construirse considerando sólo estos puntos cercanos al nivel de Fermi (baja energía).

La diagonalización del Hamiltoniano efectivo en un espacio reducido de Bloch, definido por la red de Moiré, permite obtener los diagramas de bandas con resolución fina en los alrededores del punto de cruce de Dirac. Estas bandas presentan una fuerte aplanación cuando el ángulo de rotación se aproxima al valor mágico, lo cual amplifica la densidad de estados y favorece las interacciones electrón-electrón.

En esta aproximación, el Hamiltoniano efectivo del sistema se representa en un espacio ampliado que mezcla los estados de ambos valles y ambas capas. Para el valle K , el Hamiltoniano total es:

$$H = \begin{pmatrix} H_{\theta/2}(-i\nabla) & T(\vec{r}) \\ T^\dagger(\vec{r}) & H_{-\theta/2}(-i\nabla) \end{pmatrix} \quad (3.7)$$

Capítulo 3. Modelo de Hubbard

3.4. Aproximación Baja Energía

- $T(\vec{r})$ es el término de acoplamiento que varía espacialmente con la superred. Representa el acoplamiento electrónico entre capas, el cual depende de la posición \vec{r} debido a la modulación espacial inducida por la rotación entre las capas (patrón de moiré). La distancia entre capas $d \approx 0.335$ nm se mantiene constante, pero la variación relativa de las posiciones atómicas modula el acoplamiento inter-capa a lo largo del plano.
- $T^\dagger(\vec{r})$ es el conjugado hermítico del acoplamiento $T(\vec{r})$, garantiza que el Hamiltoniano total sea hermítico¹.
- El símbolo ∇ representa el operador nabla (gradiente), definido como $\nabla = (\partial_x, \partial_y)$, y aparece aquí como parte del operador momento $-i\nabla$ en unidades naturales ($\hbar = 1$). Este término captura la variación espacial de la función de onda en el plano del grafeno.

$H_{\pm\theta/2}(-i\nabla)$ son Hamiltonianos tipo Dirac rotados para cada capa:

$$H_{\pm\theta/2} = -i\hbar v_F \vec{R}(\pm\theta/2) \cdot \vec{\sigma} \cdot \nabla, \quad (3.8)$$

donde $\vec{\sigma}$ es el vector de las matrices de Pauli, $\vec{R}(\theta)$ es una matriz de rotación, y \hbar representa la constante reducida de Planck². Aunque en la Ecuación (3.7) se utilizó $\hbar = 1$ como convención notacional (unidades naturales), en esta expresión se ha restaurado su valor físico habitual, $\hbar = 6.582 \times 10^{-16}$ eV · s, para conservar la consistencia dimensional del modelo. Este Hamiltoniano, cuya estructura se anticipó en la Ecuación (3.7), describe la dinámica de baja energía en presencia del patrón de Moiré y el acoplamiento inter-capa. Para ciertos ángulos, especialmente el ángulo mágico (1.1°), las velocidades de grupo de los electrones se reducen drásticamente, y emergen bandas cuasi-planas con una densidad de estados elevada. Estas bandas planas intensifican los efectos de correlación electrónica, favoreciendo la aparición de fenómenos como la superconductividad no convencional y los aislantes de Mott, donde la movilidad electrónica queda suprimida por fuertes interacciones locales.

¹Un operador hermítico es aquel cuyos valores propios son reales, por lo que puede representar un observable físico como la energía.

²La constante reducida de Planck, $\hbar = h/2\pi$, fue introducida por Paul Dirac para simplificar las expresiones cuánticas, especialmente en problemas con simetría angular o rotacional.

Capítulo 3. Modelo de Hubbard

3.4. Aproximación Baja Energía

Dado que en este régimen emergen fases superconductoras estrechamente vinculadas a las bandas planas, resulta relevante aclarar qué se entiende en este contexto por superconductividad no convencional. El término **superconductividad no convencional** se emplea para describir el fenómeno observado en el grafeno bicapa rotado (TBG) a ángulos mágicos, cuya naturaleza difiere de la superconductividad descrita por la teoría BCS tradicional. Esta denominación se justifica por varias razones:

- (i) El emparejamiento no parece estar mediado por fonones, como en la superconductividad convencional, sino por mecanismos derivados de fuertes correlaciones electrónicas;
- (ii) Los experimentos muestran que la superconductividad en TBG surge en vecindad de fases aislantes tipo Mott, lo que sugiere una competencia entre ordenamientos electrónicos;
- (iii) La respuesta del sistema a dopaje, presión o campo magnético no reproduce los comportamientos característicos de los superconductores convencionales;
- (iv) Diversos enfoques teóricos y simulaciones numéricas avanzadas (como RG, fRG o DMFT³) predicen la aparición de fases superconductoras con simetrías no triviales, asociadas a las bandas planas y al entrelazamiento de grados de libertad de espín, valle y capa.

Aunque el mecanismo exacto aún es objeto de debate, la evidencia experimental acumulada desde 2018 y el consenso parcial en la literatura respaldan el uso del término **no convencional** como una descripción apropiada del régimen superconductor observado en TBG.

Esta elección del régimen de baja energía se justifica por varias razones fundamentales que permiten entender por qué este enfoque resulta no solo conveniente, sino necesario en el estudio del TBG:

³RG (Renormalization Group), fRG (functional Renormalization Group) y DMFT (Dynamical Mean Field Theory) son técnicas teóricas que permiten estudiar sistemas cuánticos fuertemente correlacionados, especialmente donde las interacciones electrónicas juegan un papel dominante.

- **Bandas planas emergentes:** A bajas energías (cerca del nivel de Fermi), las bandas electrónicas se aplanan, lo que aumenta la densidad de estados y favorece fenómenos colectivos como la superconductividad o los aislantes correlacionados.
- **Simplificación del modelo de Hubbard:** Las contribuciones de bandas alejadas del nivel de Fermi se pueden despreciar, permitiendo una descripción efectiva más simple (por ejemplo, usando solo 2 o 4 bandas activas).
- **Interacciones electrónicas establecidas:** En las bandas planas, la energía cinética se suprime, y por tanto los efectos de interacción electrónica (como la energía U en el modelo de Hubbard) se vuelven dominantes.
- **Cercanía con la física experimental:** La mayoría de los fenómenos observados experimentalmente en TBG (como superconductividad o fases aislantes) ocurren en un rango de energías muy cercano al nivel de Fermi (del orden de unos pocos meV).
- **Validez del modelo de Bistritzer-MacDonald:** Este modelo es una aproximación de baja energía que se construye expandiendo alrededor de los puntos de Dirac y considerando únicamente los acoplos intercapa más relevantes. Su validez se restringe naturalmente a escalas energéticas bajas.
- **Conexión con funciones de Wannier:** Las funciones de Wannier localizadas en la celda de Moiré solo tienen sentido si se consideran bandas bien separadas y aisladas (como las bandas planas a baja energía).
- **Simplificación computacional:** Analizar solo el régimen de baja energía evita tener que diagonalizar toda la estructura de bandas del sistema bicapa, que puede involucrar decenas de miles de grados de libertad por celda.

El modelo de Bistritzer-MacDonald sienta la base para incorporar interacciones electrónicas; al identificar las bandas planas, se puede construir un modelo de Hubbard efectivo sobre la red de Moiré, donde las correlaciones electrónicas juegan un rol central. Este enfoque permite explorar mecanismos

Capítulo 3. Modelo de Hubbard

3.5. Modelo *Tight-Binding*

no convencionales de emparejamiento de Cooper y la fase superconductora.

A partir de las aproximaciones de baja energía y del desarrollo armónico en torno a los puntos de Dirac, el modelo de Bistritzer-MacDonald puede reformularse en el espacio recíproco como un Hamiltoniano efectivo dependiente del vector de onda \vec{k} , usualmente denotado como $\tilde{H}_{BM}(\vec{k})$. Este Hamiltoniano se expresa como una matriz que acopla distintos canales de momento (\vec{k}) en la superred de Moiré.

La diagonalización del Hamiltoniano efectivo $\tilde{H}_{BM}(\vec{k})$ genera múltiples bandas electrónicas en el espacio recíproco de Moiré. Sin embargo, se considera únicamente el subconjunto de bandas planas más cercanas al nivel de Fermi, que son las responsables de los fenómenos emergentes observados experimentalmente. Específicamente, el análisis se enfoca en las dos bandas planas por espín y por valle, lo cual define un subespacio activo de hasta ocho bandas totales. Esta proyección sobre el subespacio de baja energía permite construir modelos efectivos como el de Hubbard o *Tight-Binding* sobre funciones de Wannier localizadas, capturando la física de correlación dominante sin la necesidad de simular todo el espectro electrónico.

3.5. Modelo *Tight-Binding*

El método de *Tight-Binding* (también conocido como modelo de enlace fuerte) es una técnica ampliamente utilizada en la física del estado sólido para estudiar el comportamiento electrónico en sólidos cristalinos. En su forma más básica, considera que los electrones están fuertemente ligados a los sitios atómicos, con la posibilidad de “saltar” hacia sitios vecinos mediante una amplitud de transferencia t .

Este modelo resulta especialmente útil para describir materiales como el grafeno, donde los electrones π provenientes de los orbitales $2p_z$ se propagan a través de una red hexagonal. En el contexto del grafeno bicapa rotado (TBG), este formalismo puede extenderse para incluir el acoplamiento entre capas, la modulación espacial del patrón de Moiré y la aparición de bandas planas.

3.5.1. Generalización para TBG

En sistemas como el grafeno bicapa rotado (TBG), es necesario extender el modelo *Tight-Binding* básico para incluir:

- **Parámetros de salto inter-capa** (t_{\perp}), que dependen del desplazamiento relativo y la distancia entre átomos de distintas capas;
- **Modulación periódica inducida por la red de Moiré**, que introduce una variación espacial en los parámetros de acoplamiento y rompe la traslacionalidad a escala atómica;
- **Descripciones más generales de los orbitales**, en términos de funciones de Wannier extendidas que capturan la naturaleza localizada de los electrones en las bandas planas.

El Hamiltoniano generalizado toma la forma:

$$\hat{H} = \sum_{i,j,\sigma} t_{ij} \hat{c}_{i,\sigma}^{\dagger} \hat{c}_{j,\sigma} + \sum_{\langle i,j \rangle} t_{ij}^{\perp} \hat{c}_i^{(1)\dagger} \hat{c}_j^{(2)} + h.c., \quad (3.9)$$

donde:

- t_{ij} representa el acoplamiento intra-capa;
- t_{ij}^{\perp} es el acoplamiento inter-capa, que depende de la posición relativa y el ángulo de rotación;
- $\hat{c}_i^{(1)\dagger}, \hat{c}_j^{(2)}$ son operadores de creación y destrucción en la capa 1 y 2, respectivamente.

Esta estructura de acoplamiento complejo y espacialmente modulado conduce a la formación de bandas electrónicas fuertemente aplanadas, cuya capacidad energética intensifica los efectos de interacción electrónica.

3.5.2. Relación con Funciones de Wannier

Como se discutió previamente en la Sección 2.1, el teorema de Bloch establece que, en un potencial periódico, las funciones de onda de los electrones pueden expresarse como productos de una parte ondulatoria y una función periódica. Esta representación es clave para derivar funciones de Wannier

Capítulo 3. Modelo de Hubbard

3.5. Modelo *Tight-Binding*

mediante una transformación de Fourier inversa, permitiendo construir una base localizada en el espacio real.

Dado que las bandas planas del grafeno bicapa rotado (TBG) no se extienden como las bandas típicas de un metal, es útil describir los estados electrónicos en términos de funciones de Wannier localizadas. Esto permite una construcción efectiva del Hamiltoniano *Tight-Binding* para estas bandas, en forma de:

$$\hat{H} = \sum_{i,j,\sigma} t_{ij}^{\text{eff}} \hat{w}_{i,\sigma}^\dagger \hat{w}_{j,\sigma}, \quad (3.10)$$

donde:

- $\hat{w}_{i,\sigma}^\dagger$ crea un electrón en la función de Wannier localizada en el sitio i ;
- t_{ij}^{eff} incluye el efecto del acoplamiento no solo entre vecinos más cercanos, sino también a largo alcance debido a la estructura Moiré.

Las funciones de Wannier pueden expresarse como combinaciones lineales de funciones atómicas localizadas en los sitios de la red, lo que refuerza su carácter físico en materiales cristalinos como el grafeno bicapa rotado (TBG). Esta representación se escribe como:

$$w_n(\vec{r} - \vec{R}_m) = \sum_{\vec{R}} \langle \vec{r} - \vec{R}_m | \phi_{n\vec{R}} \rangle c_{n\vec{R}}, \quad (3.11)$$

donde:

- $\phi_{n\vec{R}}$ son los orbitales atómicos localizados en el sitio \vec{R} ;
- $c_{n\vec{R}}$ son los coeficientes de expansión de la función de Wannier en términos de los orbitales atómicos.

Esta forma es especialmente útil cuando se modela la física del grafeno bicapa rotado (TBG) a partir de los orbitales p_z del carbono, permitiendo construir funciones de Wannier que retienen la simetría local y la localización espacial necesarias para un modelo *Tight-Binding* preciso. Las funciones de Wannier cumplen además la relación de completitud:

$$\sum_{n,\vec{R}} |W_{n\vec{R}}\rangle \langle W_{n\vec{R}}| = 1. \quad (3.12)$$

Al insertar estas funciones en el Hamiltoniano de *Tight-Binding*, se obtiene:

$$\hat{H} = \sum_{n,m} \sum_{\vec{R},\vec{R}'} t_{nm}(\vec{R} - \vec{R}') c_{n\vec{R}}^\dagger c_{m\vec{R}'}, \quad (3.13)$$

lo cual permite estudiar de manera más detallada la estructura electrónica del material, tanto en el régimen no interactuante como en presencia de interacciones electrónicas o perturbaciones externas. Esta formulación también constituye la base para la definición de funciones de Green en el marco del modelo *Tight-Binding*, lo cual se explora en la siguiente Sección (3.6.1).

La construcción adecuada de estas funciones es crucial para evitar artefactos topológicos o errores en la simetría del modelo, y constituye la base para la formulación del modelo de Hubbard efectivo.

Una vez construido el Hamiltoniano *Tight-Binding* efectivo, se requiere de técnicas adicionales para analizar fenómenos como:

- El comportamiento espectral del sistema
- Las correlaciones electrónicas y excitaciones colectivas
- El cálculo de la densidad de estados local
- La propagación cuántica de estados electrónicos

Aquí es donde entra el uso de funciones de Green, que permiten estudiar estas propiedades a partir del Hamiltoniano *Tight-Binding*. Su versión retardada y su transformada de Fourier en frecuencia permite identificar resonancias, calcular la densidad de estados local y analizar la propagación en sistemas desordenados o fuertemente correlacionados.

La caída espacial del propagador de Green también permite definir la longitud de coherencia, que es la distancia a la que un electrón mantiene fase coherente durante su propagación. En el grafeno bicapa rotado (TBG), donde la interacción y el confinamiento electrónico son fuertes, esta longitud es clave para describir la superconductividad en el régimen de bandas planas.

En la formulación del modelo *Tight-Binding* adaptado al grafeno bicapa rotado (TBG) proporciona una base sólida para explorar el impacto del acoplamiento inter-capa y la modulación Moiré sobre la estructura electrónica.

Su implementación, junto con funciones de Green y modelo de Hubbard, permite construir un marco teórico robusto para entender fenómenos emergentes como la superconductividad no convencional y los estados correlacionados en el régimen de bandas planas.

Como las funciones de Wannier son construidas a partir de las funciones de Bloch mediante transformaciones de Fourier adecuadas, permiten una representación espacialmente localizada de los estados electrónicos en sólidos periódicos. Esta característica resulta especialmente valiosa en sistemas como el grafeno bicapa rotado (TBG), donde la localización en el espacio real facilita el tratamiento de interacciones electrónicas complejas.

El método de *Tight-Binding*, al incorporar estas funciones como base, proporciona una herramienta versátil y eficiente para modelar la estructura electrónica, el transporte y fenómenos emergentes en materiales cristalinos. Aunque su aplicación requiere ciertas aproximaciones (como la selección de los sitios activos y el rango de los acoplamientos), su capacidad para capturar las propiedades esenciales del sistema lo convierte en una técnica fundamental en la física del estado sólido.

La relación entre el teorema de Bloch, las funciones de Wannier y el modelo *Tight-Binding* establece un marco teórico coherente que sustenta gran parte del análisis electrónico en materiales con orden periódico. Su adecuada formulación e interpretación son clave para avanzar en la comprensión de fenómenos como la superconductividad, el aislamiento correlacionado y la ingeniería de bandas en sistemas Moiré como el grafeno bicapa rotado.

3.6. Función de Green

La función de Green es una herramienta fundamental en la física de la materia condensada y la teoría de campos cuánticos, ampliamente utilizada para describir la propagación y evolución temporal de partículas cuánticas en medios periódicos interactuantes y/o periódicos. En el contexto del modelo de *Tight-Binding*, la función de Green permite estudiar la dinámica electrónica en redes cristalinas, proporcionando acceso a propiedades clave como la densidad de estados, la respuesta al transporte y los efectos de correlación. Su implementación resulta especialmente útil para analizar la propagación

de electrones en materiales como el grafeno bicapa rotado, donde las interacciones electrónicas y la modulación espacial desempeñan un papel central.

En su forma más simple, la función de Green *retarded* (retardada) dependiente de energía se define como el operador resolvente inverso del Hamiltoniano:

$$G(E) = (E\mathbb{I} - \hat{H})^{-1}, \quad (3.14)$$

donde:

- E es la energía compleja del sistema (con un pequeño término imaginario para garantizar la causalidad);
- \mathbb{I} es la identidad;
- \hat{H} es el Hamiltoniano del sistema, que en este caso adoptará la forma del Hamiltoniano de *Tight-Binding*.

Esta función encapsula la información sobre la evolución del sistema ante perturbaciones, permitiendo estudiar cómo un electrón se propaga desde un sitio dado hacia otro.

3.6.1. Conexión con *Tight-Binding*

En el modelo de *Tight-Binding*, el Hamiltoniano puede escribirse en términos de funciones de Wannier $|W_i\rangle$, localizadas en cada sitio i de la red. Su forma general es:

$$\hat{H} = \sum_{i,j} t_{ij} c_i^\dagger c_j, \quad (3.15)$$

donde:

- t_{ij} son los elementos de acoplamiento (integrales de salto) entre los sitios i y j ;
- c_i^\dagger y c_j son los operadores de creación y aniquilación en dichos sitios.

La función de Green reticulada se define como:

$$G_{ij}(E) = \langle W_i | (E\mathbb{I} - \hat{H})^{-1} | W_j \rangle, \quad (3.16)$$

donde $|W_i\rangle$ y $|W_j\rangle$ son funciones de Wannier localizadas en los sitios i y j , respectivamente. Esta expresión representa la amplitud de probabilidad de

que una partícula se propague del sitio j al sitio i con energía E , y es central en el cálculo de propiedades electrónicas. Esta forma proyectada se conoce como función de Green reticulada, ya que corresponde a la función de Green retardada evaluada sobre una base discreta (funciones de Wannier), propia del modelo *Tight-Binding*.

3.6.2. Densidad de Estados

La función de Green $G(E)$ nos proporciona información detallada sobre la respuesta del sistema a una perturbación externa de energía E . Una de las aplicaciones más relevantes de $G(E)$ es el cálculo de la densidad de estados (DOS), definida como:

$$\rho(E) = -\frac{1}{\pi} \text{Im Tr}[G(E)], \quad (3.17)$$

donde:

- Im denota la parte imaginaria,
- Tr indica la traza sobre todos los estados del sistema.

Este resultado vincula directamente la estructura espectral del sistema con la función de Green, permitiendo obtener información precisa sobre los niveles de energía disponibles y su distribución.

3.6.3. Conductividad Eléctrica

La función de Green también resulta fundamental en el estudio del transporte electrónico. A través de la fórmula de Kubo, la conductividad eléctrica puede expresarse en términos de funciones de correlación de corriente, las cuales se relacionan con productos de funciones de Green y operadores de corriente. Una forma común de esta expresión es:

$$\sigma(\omega) = \frac{i}{\omega} [K(\omega) - K(0)], \quad (3.18)$$

donde:

- $\sigma(\omega)$ es la conductividad eléctrica del material a la frecuencia de la perturbación externa ω ,

- $K(\omega)$ es una función de correlación de corrientes, que se expresa en términos de productos de funciones de Green y operadores de corriente.

En el límite de frecuencia baja, también se puede escribir la fórmula de Kubo como:

$$\sigma = \lim_{\omega \rightarrow 0} \frac{i}{\omega} K(\omega), \quad (3.19)$$

lo cual resalta el papel de las correlaciones electrónicas en la respuesta del sistema a campos eléctricos externos. Esta formulación conecta el comportamiento microscópico descrito por el Hamiltoniano de *Tight-Binding* con observables macroscópicos como la conductividad, siendo especialmente útil en materiales como el grafeno bicapa rotado, donde los efectos de correlación y modulación espacial son relevantes.

3.6.4. Aplicación a TBG

El uso de funciones de Green en el contexto del grafeno bicapa rotado (TBG) resulta particularmente relevante cuando se considera el acoplamiento inter-capa que induce bandas planas altamente no triviales cerca del nivel de Fermi. Dado que las bandas planas en el TBG surgen como resultado de la interferencia entre las capas rotadas, el tratamiento mediante funciones de Green ofrece una herramienta poderosa para estudiar la propagación de cuasipartículas, las correlaciones electrónicas y las respuestas a perturbaciones externas.

En el régimen de baja energía, el sistema puede describirse mediante el Hamiltoniano efectivo de Bistritzer-MacDonald \tilde{H}_{BM} , que incorpora tanto la dispersión tipo Dirac de las capas individuales como el acoplamiento inter-capa modulado por la red de Moiré. La función de Green correspondiente se expresa como:

$$G(E, \vec{k}) = \left(E\mathbb{I} - \tilde{H}_{BM}(\vec{k}) + i\eta \right)^{-1}, \quad (3.20)$$

donde:

- E es la energía del sistema,
- \vec{k} es el vector de momento reducido al mini-Brillouin zone de Moiré,
- η es un parámetro de ensanchamiento infinitesimal,

- $\tilde{H}_{BM}(\vec{k})$ es el Hamiltoniano efectivo de Bistritzer-MacDonald.

Para definir explícitamente $\tilde{H}_{BM}(\vec{k})$, se parte del modelo de Bistritzer-MacDonald formulado en espacio real y se proyecta sobre una base de estados tipo Bloch generalizados:

$$\left| \psi_{\vec{k}+\vec{G}_i}^{(\ell)} \right\rangle, \quad \ell = 1, 2 \text{ (capa)}, \quad \vec{G}_i \in \text{red recíproca de Moiré}, \quad (3.21)$$

donde \vec{k} es el vector de onda en la mini-zona de Brillouin (mBZ) y \vec{G}_i son los vectores recíprocos generados por la red de Moiré. En esta base, el Hamiltoniano efectivo adquiere una forma matricial que describe el acoplamiento entre múltiples canales de momento:

$$\tilde{H}_{BM}(\vec{k}) = \begin{pmatrix} h_1(\vec{k} + \vec{G}_1) & T(\vec{G}_1 - \vec{G}_2) & \cdots \\ T^\dagger(\vec{G}_1 - \vec{G}_2) & h_2(\vec{k} + \vec{G}_2) & \cdots \\ \vdots & \vdots & \ddots \end{pmatrix}, \quad (3.22)$$

donde $h_\ell(\vec{k})$ representa el Hamiltoniano de Dirac efectivo en la capa ℓ , desplazado según el vector \vec{G}_i , y $T(\vec{G})$ codifica el acoplamiento inter-capas para un salto entre canales de momento relacionados por \vec{G} .

En la práctica, la matriz infinita del Hamiltoniano, Ecuación (3.22), debe truncarse a un tamaño finito para poder ser tratada numéricamente. Esto se logra limitando el número de vectores recíprocos \vec{G}_i incluidos en la expansión. Típicamente, se utiliza un *cutoff*⁴ que conserva los \vec{G}_i tales que $|\vec{G}_i| \leq 3$ o 6 (en unidades del recíproco Moiré). Este procedimiento mantiene los modos de momento más relevantes (es decir, los componentes de onda que contribuyen con mayor peso a la estructura electrónica de baja energía), y será retomado más adelante en la implementación computacional del cálculo de la función de Green.

⁴En este contexto, *cutoff* hace referencia a un límite superior impuesto sobre la magnitud de los vectores recíprocos considerados ($|\vec{G}_i|$), con el fin de truncar la matriz a un tamaño finito manejable computacionalmente. Este corte conserva únicamente aquellos vectores que contribuyen significativamente a las bandas electrónicas más bajas de energía, que son las más relevantes para fenómenos como las bandas planas o la superconductividad.

Una vez determinada esta matriz efectiva, la función de Green en la Ecuación (3.14) se puede evaluar numéricamente para obtener la densidad de estados, el espectro de cuasipartículas y otros observables electrónicos. Este formalismo permite calcular tanto la densidad local de estados (LDOS) como la densidad total de estados (DOS), evaluar funciones de correlación electrón-electrón, y estudiar cómo se modifican las propiedades electrónicas por la torsión entre capas, como se observa en la Figura 3.2. Esta formulación es esencial para analizar fenómenos de correlación electrónica en el régimen de bandas planas, y servirá como base para determinar la longitud de coherencia electrónica, como se discute en la siguiente Sección (3.6.5).

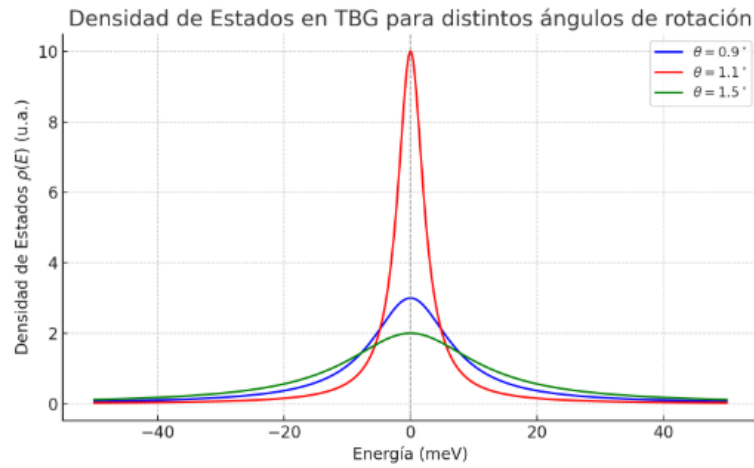


Figura 3.2: Densidad de estados (DOS) simulada para grafeno bicapa rotado (TBG) a tres ángulos de rotación característicos: 0.9° , 1.1° (ángulo mágico) y 1.5° . Se observa un pico pronunciado en la DOS para $\theta = 1.1^\circ$, indicativo de la formación de bandas planas y una alta densidad de estados cerca del nivel de Fermi. A medida que el ángulo se aleja del valor mágico, la DOS se ensancha, reflejando una mayor dispersión electrónica. Esta figura ilustra gráficamente la dependencia angular de la estructura electrónica en TBG, y su relación con la formación de fenómenos correlacionados. Figura elaborada por el autor con base en conceptos de [13].

3.6.5. Longitud de Coherencia

Una de las aplicaciones más relevantes de la función de Green en el estudio de materiales superconductores como el grafeno bicapa rotado (TBG) es la posibilidad de estimar la longitud de coherencia ξ de los pares de Cooper en el régimen superconductor, así como su anisotropía (en x y y) si $\Delta(\vec{k})$ no es isotrópica. Esta longitud caracteriza el tamaño espacial sobre el cual los electrones permanecen correlacionados formando un par y proporciona información esencial sobre el tipo de superconductividad que emerge en estos sistemas fuertemente correlacionados (ya sea del tipo extendido como en BCS, localizado como en BEC, o en un régimen intermedio conocido como *crossover* BCS–BEC).

La longitud de coherencia está relacionada con el decaimiento espacial de la función de Green anómala $F(\vec{r})$, que describe la amplitud de apareamiento entre electrones con espines opuestos ubicados en posiciones distintas:

$$F(\vec{r}) = \langle \psi_{\downarrow}(\vec{r}) \psi_{\uparrow}(0) \rangle. \quad (3.23)$$

Esta función puede obtenerse a partir de la componente anómala del propagador de Green, formulado en el espacio de Nambu (ver Apéndice A). En el contexto del grafeno bicapa rotado (TBG), este formalismo permite incorporar de manera natural el *gap* superconductor (brecha de energía) $\Delta(\vec{k})$, junto con el Hamiltoniano efectivo de baja energía $\tilde{H}_{BM}(\vec{k})$, derivado del modelo de Bistritzer-MacDonald.

La Función de Green $G(E)$ se define como la inversa del operador $(E\mathbf{I} - \tilde{H})^{-1}$ donde \tilde{H} es el Hamiltoniano del sistema. En el contexto del Hamiltoniano de *Tight-Binding*, esta función se expresa como:

$$G(E) = (E\mathbf{I} - \tilde{H})^{-1}, \quad (3.24)$$

donde:

- E es la energía del sistema,
- \mathbf{I} es la matriz identidad,
- \tilde{H} es el Hamiltoniano de *Tight-Binding*.

El propagador completo de Green en el espacio de momentos o matriz de Green en el espacio de Nambu (dependiente de la energía E y del vector de momento \vec{k}) contiene información sobre el espectro de excitaciones y las correlaciones tanto normales como anómalas del sistema superconductor, y adopta la forma:

$$G(E, \vec{k}) = \left[E\mathbb{I} - \begin{pmatrix} \tilde{H}_{BM}(\vec{k}) & \Delta(\vec{k}) \\ \Delta^*(\vec{k}) & -\tilde{H}_{BM}^*(-\vec{k}) \end{pmatrix} + i\eta \right]^{-1}, \quad (3.25)$$

donde:

- E corresponde a la energía,
- $\eta \rightarrow 0^+$ es un término infinitesimal positivo que asegura que la función de Green describe correctamente la propagación hacia el futuro (prescripción causal),
- \mathbb{I} es la matriz identidad extendida en el espacio de Nambu. Con dimensión $2N \times 2N$, donde N es el número de grados de libertad por capa o por subred,
- \tilde{H}_{BM} es el Hamiltoniano efectivo del sistema en ausencia de superconductividad, derivado del modelo de Bistritzer-MacDonald (BM). Contiene los detalles del acoplamiento inter-capas, el patrón de Moiré, y las bandas planas características del grafeno bicapa rotado (TBG),
- $\Delta(\vec{k})$ Es la función *gap* superconductor, dependiente del momento \vec{k} , codifica la amplitud de apareamiento de los pares de Cooper. Puede ser escalar (para *s-wave*) o matricial (para *p-wave*, *d-wave*, etc.),
- $\Delta^*(\vec{k})$ Es el complejo conjugado del *gap* $\Delta(\vec{k})$,
- $-\tilde{H}_{BM}^*(-\vec{k})$ es el conjugado complejo y simétrico en momento del Hamiltoniano BM. En el formalismo de Nambu, los huecos (antipartículas) se propagan con esta contribución negativa al Hamiltoniano,
- $i\eta$ es una prescripción infinitesimal positiva (con $\eta \rightarrow 0^+$), que se introduce para asegurar que la función de Green cumpla con las condiciones de contorno del problema físico.

Capítulo 3. Modelo de Hubbard

3.6. Función de Green

Una vez construido el operador dentro del corchete, se realiza su inversión matricial para obtener el propagador total de Green en el espacio de Nambu. Esta matriz inversa contiene toda la información sobre la dinámica de cuasipartículas en el sistema superconductor.

El resultado es una matriz de Green extendida, cuya estructura refleja tanto las excitaciones individuales como las correlaciones de apareamiento. Esta matriz puede expresarse, de manera esquemática, como:

$$G(E, \vec{k}) = \begin{pmatrix} G^{ee}(E, \vec{k}) & F(E, \vec{k}) \\ F^\dagger(E, \vec{k}) & G^{hh}(E, \vec{k}) \end{pmatrix}, \quad (3.26)$$

donde las componentes diagonales son:

- $G^{ee}(E, \vec{k})$ es la función de Green normal para electrones. Describe la propagación de una partícula individual (sin apareamiento).
- $G^{hh}(E, \vec{k})$ es la función de Green normal para huecos. Describe la propagación de un hueco en el sistema.

Estas componentes reflejan las respuestas estándar del sistema en ausencia de superconductividad. Y las componentes fuera de la diagonal (anómalas):

- $F(E, \vec{k})$: es la función de Green anómala, también conocida como función de apareamiento. Representa la amplitud de probabilidad de que un electrón con momento \vec{k} y espín \downarrow se aparee con otro electrón de momento opuesto y espín \uparrow , formando un par de Cooper.
- $F^\dagger(E, \vec{k})$ es el conjugado hermítico de la anterior, y está asociada a la disociación de un par de Cooper.

Estas componentes son indicativas del orden superconductor, ya que solo existen cuando hay formación de pares de Cooper. Su aparición es el sello característico del régimen superconductor en este formalismo.

La longitud de coherencia se puede estimar a partir del comportamiento de Green anómalo a bajas energías y pequeñas separaciones espaciales. En el caso isotrópico y en primera aproximación, se encuentra que:

$$\xi \sim \frac{\hbar v_F}{\pi \Delta}, \quad (3.27)$$

donde:

- \hbar es la constante reducida de Planck.
- v_F es la velocidad de Fermi efectiva de las bandas planas en el grafeno bicapa rotado (TBG).
- Δ es el valor del *gap* superconductor en el nivel de energía relevante.

Es una fórmula tipo BCS (pares extendidos) aproximada y que en el límite BEC (pares localizados) no aplica directamente, pero sigue dando intuición útil. Este resultado indica que, debido a que v_F es mucho menor en grafeno bicapa rotado (TBG) que en el grafeno monocapa, la longitud de coherencia en TBG resulta inusualmente corta, lo cual es una señal de un régimen fuertemente correlacionado, cercano al límite BEC, donde los pares son más localizados y presentan menor extensión espacial.

Este enfoque basado en funciones de Green no solo permite estimar ξ , sino que también habilita estudios más detallados sobre la naturaleza de los estados emparejados, la respuesta del sistema a perturbaciones externas, y el análisis de escenarios de superconductividad no convencional en materiales con bandas planas.

Capítulo 4

Enfoque Computacional

Este apartado presenta la implementación numérica del modelo efectivo a baja energía desarrollado previamente, con el objetivo de calcular parámetros físicos clave que caracterizan el régimen superconductor y las propiedades de localización electrónica en el grafeno bicapa rotado (TBG). A partir del Hamiltoniano $\tilde{H}_{BM}(\vec{k})$, se diseñan procedimientos computacionales dirigidos al análisis de la longitud de coherencia, la temperatura crítica T_c y la distribución espacial de los electrones.

En primer lugar, se estima la longitud de coherencia ξ a partir del decaimiento espacial de la función de Green anómala $F(\vec{r})$, reconstruida mediante transformadas de Fourier desde el espacio recíproco. Este parámetro proporciona una medida directa de la extensión espacial de los pares de Cooper en el régimen de bajas energías.

Luego, se aborda el cálculo de la temperatura crítica T_c , empleando una expresión funcional dependiente de la densidad de estados en el nivel de Fermi $\rho(E_F)$, obtenida numéricamente a partir de la función de Green.

Finalmente, se examina la localización electrónica, a través del análisis de funciones de onda, funciones de Wannier localizadas y la densidad local de estados (LDOS). Estos elementos permiten identificar regiones de confinamiento electrónico y caracterizar la estructura cuasi-localizada de los estados planos inducidos por la modulación de Moiré.

4.1. Longitud de Coherencia

Como se presentó en la Sección 3.6.4, el Hamiltoniano efectivo $\tilde{H}_{BM}(\vec{k})$ permite construir la función de Green del sistema en el régimen de baja energía. En esta sección se describe la implementación computacional del cálculo de la función de Green anómala $F(\vec{r})$ y su decaimiento espacial, con el fin de estimar cuantitativamente la longitud de coherencia ξ . Esta longitud caracteriza el tamaño espacial de los pares de Cooper en el régimen superconductor del grafeno bicapa rotado (TBG) y se obtiene a partir del comportamiento asintótico de $F(\vec{r})$, la cual deriva del propagador de Green formulado en el espacio de Nambu (ver Apéndice A) utilizando el Hamiltoniano efectivo de baja energía. Estimar la longitud de coherencia requiere una combinación de:

- La obtención del *gap* superconductor $\Delta(\vec{k})$ en el espacio recíproco;
- La evaluación de la velocidad de Fermi efectiva v_F , característica de las bandas planas del grafeno bicapa rotado (TBG);
- La reconstrucción de la función anómala $F(\vec{r})$, ya sea de forma directa en el espacio real o mediante transformadas de Fourier desde el espacio de momentos.

Una aproximación común consiste en aplicar la fórmula analítica (3.27):

$$\xi \sim \frac{\hbar v_F}{\pi \Delta},$$

válida en el régimen isotrópico y a bajas energías, como estimador de primer orden. Para ello, se calculan numéricamente los parámetros:

- Δ : obtenido como el valor máximo del *gap* en las bandas superconductoras, o su valor medio alrededor del punto de Dirac modificado por la red de Moiré;
- v_F : estimado a partir de la pendiente de la banda $E(\vec{k})$ cerca del punto de Fermi, ya sea mediante diferencias finitas o ajustes polinomiales locales.

Adicionalmente, puede obtenerse ξ directamente a partir del decaimiento espacial de $|F(\vec{r})|$. En este enfoque, se calcula primero la función de Green anómala en el espacio recíproco $F(\vec{k})$, y se aplica una transformada de Fourier

Capítulo 4. Enfoque Computacional

4.1. Longitud de Coherencia

discreta para obtener $F(\vec{r})$ sobre una malla bidimensional. Luego, se analiza la dependencia de $|F(\vec{r})|$ con la distancia radial desde el origen, y se ajusta con modelos funcionales que capturan el decaimiento:

- Si el decaimiento es de tipo exponencial (como en el régimen BCS):
 $|F(\vec{r})| \sim Ae^{-|\vec{r}|/\xi}$;
- Si el decaimiento es gaussiano (como en el régimen BEC o en pares más localizados): $|F(\vec{r})| \sim Ae^{-|\vec{r}|^2/\xi^2}$.

La elección del modelo de ajuste depende de la forma empírica del perfil radial $|F(\vec{r})|$ obtenido en la simulación. La extracción de ξ se realiza mediante ajuste por mínimos cuadrados, tomando como variable independiente la distancia $r = |\vec{r}|$ y como observación experimental $|F(\vec{r})|$.

El procedimiento computacional básico sigue los siguientes pasos:

- Construcción del Hamiltoniano efectivo $\tilde{H}_{BM}(\vec{k})$ en una malla del espacio recíproco, incluyendo el acoplamiento inter-capa y el patrón de Moiré.
- Introducción del *gap* $\Delta(\vec{k})$ en el formalismo de Nambu. Pueden considerarse diferentes simetrías del parámetro de apareamiento, como tipo *s* o *d-wave*.
- Diagonalización de la matriz extendida en cada punto de la malla para obtener los autovalores (espectro de cuasipartículas) y los autovectores (estados propios).
- Cálculo de $F(\vec{k})$ como componente anómala de la función de Green, seguido de una transformada de Fourier discreta para obtener $F(\vec{r})$ y estudiar su decaimiento.
- Evaluación del perfil radial de $|F(\vec{r})|$ y ajuste funcional (exponencial o cuadrático, según el régimen) para extraer la longitud de coherencia ξ .

Una vía complementaria consiste en estudiar la respuesta del sistema ante perturbaciones externas (como potenciales o campos magnéticos) analizando el rango de correlación espacial a través de la función de Green. Este análisis permite identificar si la superconductividad en grafeno bicapa rotado (TBG) se sitúa en el régimen tipo BCS (pares extendidos, $\xi \gg a$) o tipo BEC (pares

Capítulo 4. Enfoque Computacional

4.1. Longitud de Coherencia

localizados, $\xi \sim a$), donde a representa la distancia de red efectiva.

En simulaciones recientes aplicadas a grafeno bicapa rotado (TBG), se ha encontrado que ξ puede alcanzar valores tan pequeños como unas pocas decenas de nanómetros, debido a la drástica reducción en la velocidad de Fermi y al fuerte acoplamiento electrónico. Esto constituye un indicio clave de superconductividad fuertemente correlacionada.

Una vez obtenida la función $F(\vec{r})$ mediante transformada de Fourier desde el espacio recíproco, se analiza su perfil radial $|F(r)|$ para estimar el comportamiento espacial de las correlaciones de apareamiento. En la Figura 4.1, se muestra el ajuste exponencial realizado a los datos simulados, lo que permite extraer una longitud de coherencia aproximada de $\xi \approx 2.45$ nm, característica del régimen superconductor correlacionado en el TBG. El código utilizado para obtener esta estimación se encuentra en el Apéndice B.

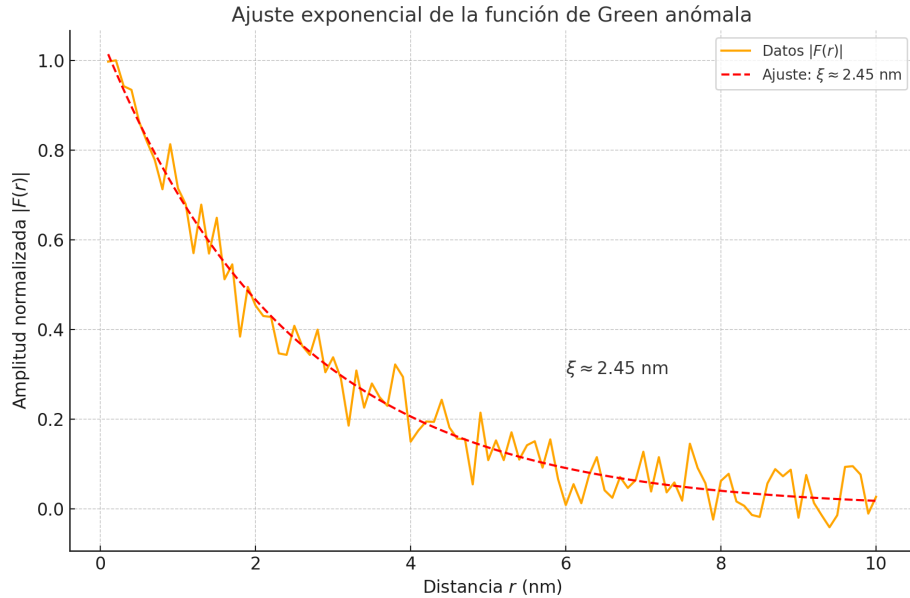


Figura 4.1: Ajuste exponencial de la función de Green anómala $|F(r)|$ en el grafeno bicapa rotado (TBG) para un ángulo de 1.1° . La curva simulada (línea amarilla) muestra el perfil radial del módulo de la función $F(\vec{r})$, mientras que la línea punteada roja representa el ajuste exponencial. La longitud de coherencia estimada es $\xi \approx 2.45$ nm.

4.2. Cálculo de T_c

En esta sección se presenta una aproximación efectiva para el cálculo de la temperatura crítica T_c , como la representación de la Figura 4.2, en sistemas con bandas planas, como el grafeno bicapa rotado (TBG). La metodología se basa en la estimación computacional de la densidad de estados $\rho(E)$ a partir de la función de Green del sistema. Si bien este tratamiento comparte estructura formal con la teoría BCS, no implica necesariamente su validez estricta en el contexto del TBG, donde la superconductividad puede emerger de interacciones fuertemente correlacionadas.

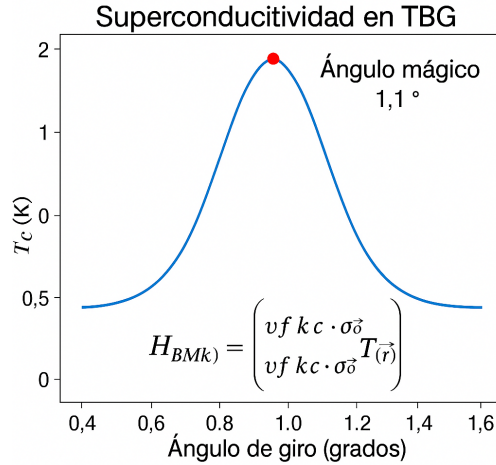


Figura 4.2: Representación de la temperatura crítica T_c como función del ángulo de torsión θ en TBG. Se observa un máximo cercano al ángulo mágico. Figura elaborada por el autor con base en conceptos de [16].

Recapitulando, la densidad de estados total se puede obtener directamente a partir de la función de Green:

$$\rho(E) = -\frac{1}{\pi} \text{Im}[\text{Tr}G(E + i\eta)] \quad (4.1)$$

donde:

- $G(E + i\eta) = [(E + i\eta)\mathbb{I} - H_{eff}]^{-1}$ es la función de Green resolvente,
- H_{eff} es el Hamiltoniano efectivo del sistema (en nuestro caso, derivado del modelo de Bistritzer-MacDonald o su versión discreta en el modelo *Tight-Binding*),

- E es la energía del sistema;
- η es un parámetro de regularización (una pequeña parte imaginaria) que introduce un ensanchamiento Lorentziano,
- Tr indica la traza sobre todos los grados de libertad.

Para ilustrar la forma típica de la densidad de estados en el régimen de bandas planas, se presenta a continuación una gráfica obtenida a partir de una función de Green resolvente con un ensanchamiento Lorentziano centrado en el nivel de Fermi. La Figura 4.3 muestra un pico pronunciado en $E = 0$, característico de sistemas con bandas planas como el TBG en el ángulo mágico. Una implementación del cálculo de $\rho(E)$ usando la función de Green resolvente se presenta en el Apéndice C.1.

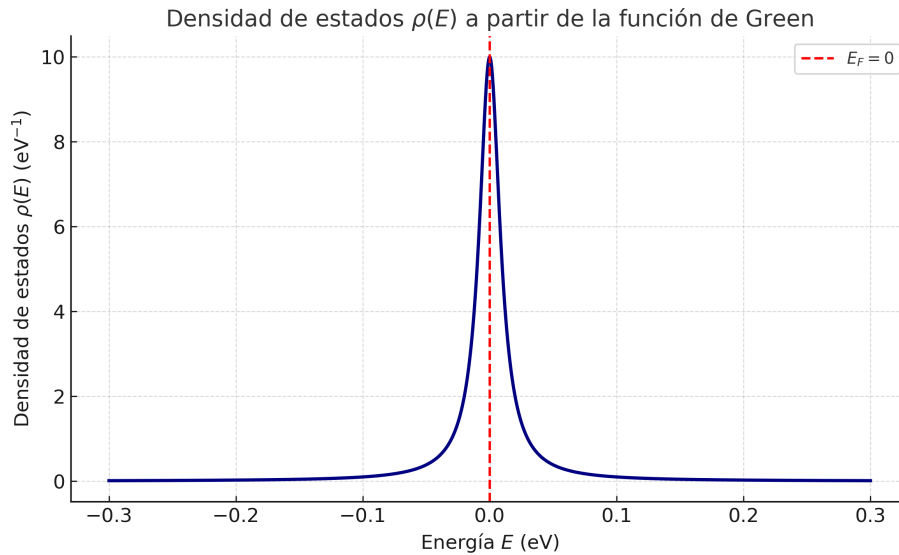


Figura 4.3: Densidad de estados $\rho(E)$ obtenida a partir de la función de Green resolvente. Se aprecia un pico marcado en el nivel de Fermi $E = 0$, característico del régimen de bandas planas en TBG.

Este procedimiento puede implementarse numéricamente para sistemas grandes utilizando métodos como la expansión de Chebyshev (que representa operadores en forma de series ortogonales, facilitando el cálculo de funciones de Green en sistemas extensos), o mediante el algoritmo de Lanczos (un método iterativo que aproxima la traza sin necesidad de diagonalizar matrices

completas), dependiendo de la eficiencia y resolución deseada.

Una vez obtenida la densidad de estados $\rho(E)$, se determina su valor en el nivel de Fermi $E = E_F$. Para sistemas dopados, E_F puede ser desplazado y debe ser identificado de acuerdo al llenado electrónico. En caso de que se trabaje en medio llenado de la banda plana (situación común en TBG), se considera:

$$E_F \approx 0 \quad (\text{en el centro de la banda plana}) \quad (4.2)$$

Y se evalúa:

$$\rho(E_F) = \rho(0) \quad (4.3)$$

Este valor será introducido en la fórmula aproximada para T_c .

En base a la derivación teórica en el régimen de bandas planas (Sección 3.4), la fórmula utilizada para calcular la temperatura crítica a partir de los datos computacionales es:

$$k_B T_c \approx \frac{1}{\rho(E_F)} \exp\left(-\frac{1}{|U|\rho(E_F)}\right) \quad (4.4)$$

donde:

- $|U|$ es el módulo del acoplamiento efectivo entre electrones (puede ajustarse como parámetro),
- $\rho(E_F)$ se extrae directamente del cálculo de la función de Green.

Para explorar la dependencia de la temperatura crítica T_c con el ángulo de torsión θ , se asume una relación funcional entre $\rho(E_F)$ y el ángulo de giro θ , basada en el hecho de que la densidad de estados en TBG $\rho(E_F)$ presenta un máximo cerca del ángulo mágico ($\theta \sim 1.1^\circ$). Considerando esta dependencia, se introduce $\rho(E_F) = \rho(\theta)$ en la Ecuación (4.4), lo cual produce una curva tipo gaussiana para $T_c(\theta)$, centrada en el valor crítico de torsión. Este perfil mostrado en la Figura 4.4, refleja la sensibilidad del fenómeno superconductor a la variación del ángulo, en concordancia con la formación de bandas planas en dicho régimen.

El **valor máximo de T_c** calculado es de aproximadamente **41.31 K**, que ocurre en $\theta = 1.102^\circ$, corroborando la relevancia del ángulo mágico para la superconductividad en el sistema. El código correspondiente a esta simulación

está descrito en el Apéndice C.2. La siguiente figura ilustra esta dependencia cualitativa:

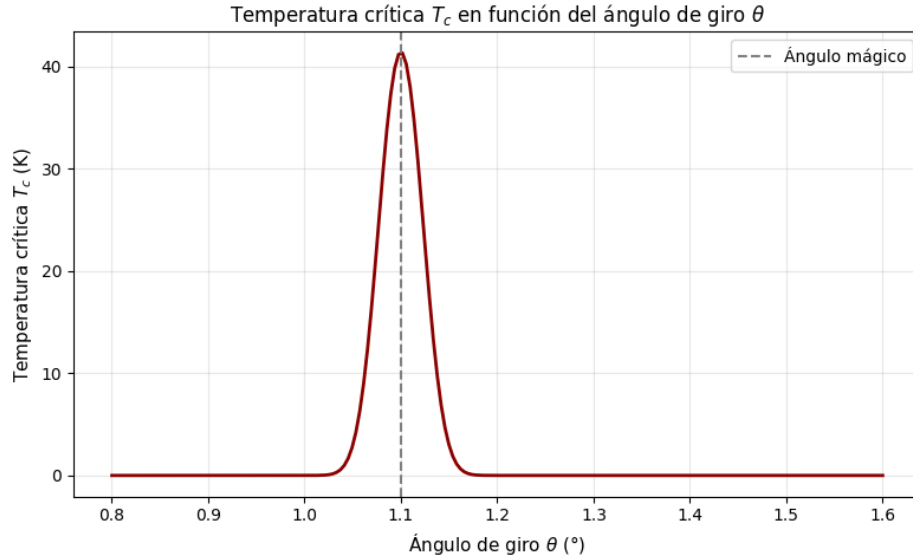


Figura 4.4: Temperatura crítica T_c como función del ángulo de torsión θ , calculada a partir de la fórmula en régimen de bandas planas con una densidad de estados $\rho(\theta)$ que exhibe un máximo en el ángulo mágico.

Este resultado permite estimar de forma cuantitativa el valor de T_c en función de:

- La interacción U
- La densidad de estados local obtenida numéricamente.

Para visualizar el comportamiento funcional de la temperatura crítica T_c en función del acoplamiento efectivo $|U|$, se genera la siguiente gráfica basada en la Ecuación (4.4).

Esta relación permite observar cómo, en el régimen de bandas planas, T_c crece de forma exponencial con $|U|$, destacando la sensibilidad de la fase superconductora a las interacciones electrónicas. Para esta gráfica, visible en la Figura 4.5, se utilizó el código detallado en el Apéndice C.3.

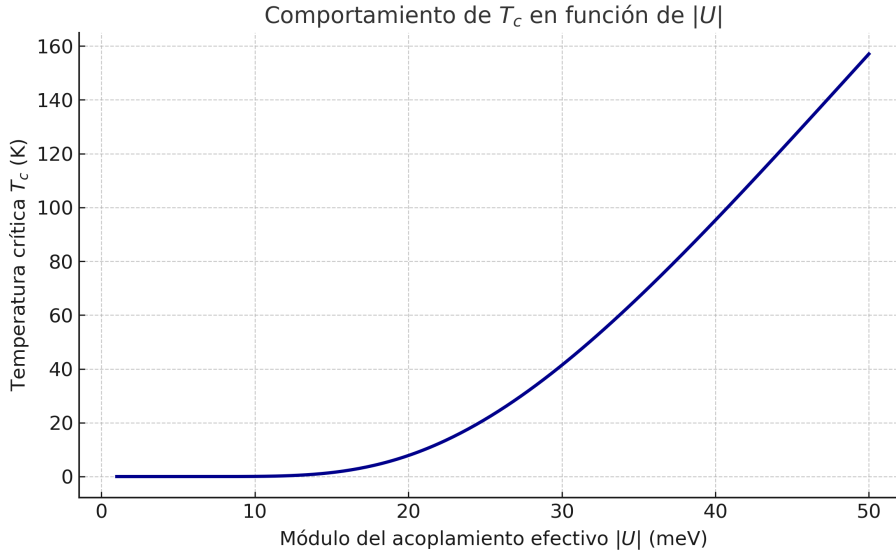


Figura 4.5: Dependencia de la temperatura crítica T_c con el acoplamiento efectivo $|U|$, usando la fórmula tipo BCS en régimen de bandas planas con $\rho(E_F) = 10 \text{ eV}^{-1}$. Se observa un crecimiento exponencial de T_c conforme aumenta la interacción.

4.3. Localización Electrónica

Una característica fundamental del grafeno bicapa rotado (TBG) es la aparición de estados electrónicos altamente localizados cuando el ángulo de torsión entre capas se encuentra cerca de ciertos valores mágicos. Esta localización ocurre principalmente en las regiones de apilamiento tipo AA dentro del patrón de Moiré, y está directamente relacionada con la aparición de bandas planas y fenómenos electrónicos fuertemente correlacionados como la superconductividad no convencional.

El estudio de la probabilidad de localización electrónica permite entender cómo los electrones se confinan espacialmente y cómo interactúan entre sí, ofreciendo una vía para vincular propiedades geométricas y topológicas del sistema con las fases emergentes.

4.3.1. Funciones de Onda

La función de onda electrónica $\psi_n(\vec{r})$ correspondiente al estado n de un sistema cuasiperiódico como el grafeno bicapa rotado (TBG) puede obtenerse a partir del Hamiltoniano efectivo $\tilde{H}_{BM}(\vec{k})$ en el espacio recíproco, resolviendo:

$$\tilde{H}_{BM}(\vec{k})u_{n,\vec{k}} = \epsilon_n(\vec{k})u_{n,\vec{k}}, \quad (4.5)$$

donde $u_{n,\vec{k}}$ es la parte periódica del estado de Bloch. La función de onda completa en el espacio real se obtiene mediante:

$$\psi_n(\vec{r}) = \sum_{\vec{k}} e^{i\vec{k}\cdot\vec{r}} u_{n,\vec{k}}(\vec{r}) \quad (4.6)$$

La densidad de probabilidad de localizar un electrón en la posición \vec{r} es:

$$P_n(\vec{r}) = |\psi_n(\vec{r})|^2. \quad (4.7)$$

Este valor puede graficarse para diferentes estados n , energías o configuraciones geométricas, permitiendo visualizar directamente la localización espacial.

A continuación se presenta en la Figura 4.6 dos visualizaciones complementarias de la probabilidad de localización electrónica $P(\vec{r}) = |\psi(\vec{r})|^2$, evaluada sobre una celda de Moiré característica del grafeno bicapa rotado (TBG) en el régimen de bandas planas.

La Subfigura 4.6a muestra un **mapa de contorno relleno** (*filled contour plot*) que representa la distribución bidimensional de $P(\vec{r})$. En él, los colores indican la intensidad de la densidad de probabilidad en cada punto del plano, revelando una fuerte concentración en una región tipo AA. Esta localización refleja el confinamiento espacial de los estados electrónicos en zonas donde se espera una alta densidad de estados. El código correspondiente se encuentra en el Apéndice D.1.

La Subfigura 4.6b complementa esta vista con una representación tridimensional de la misma función, donde el eje vertical indica la magnitud de $P(\vec{r})$ en función de las coordenadas x y y . Esta perspectiva permite observar con mayor claridad el perfil espacial del confinamiento, evidenciando su forma gaussiana y su decaimiento exponencial fuera del centro. El código utilizado para esta visualización se incluye en el Apéndice D.1.1.

Capítulo 4. Enfoque Computacional

4.3. Localización Electrónica

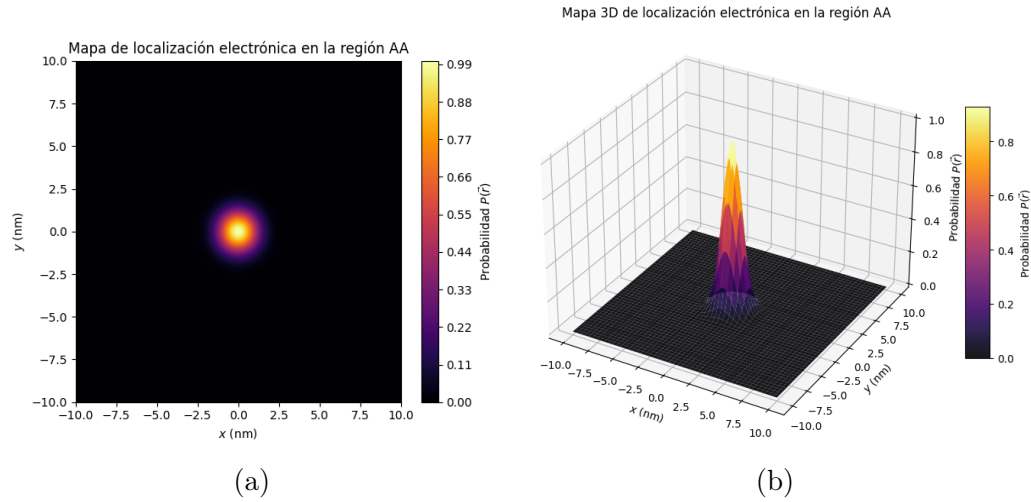


Figura 4.6: Visualizaciones de la densidad de probabilidad $P(\vec{r}) = |\psi(\vec{r})|^2$ en una celda de Moiré. (a) Mapa de contorno relleno con localización en una región tipo AA. (b) Representación tridimensional que revela el perfil espacial de confinamiento, característico del régimen de bandas planas en el TBG.

4.3.2. Descripción Localizada de Funciones de Wannier

Otra manera natural de describir la localización electrónica es mediante funciones de Wannier, las cuales se centran en sitios específicos del patrón de Moiré, generalmente en las regiones AA de la supercelda.

Las funciones de Wannier bien construidas permiten analizar la distribución orbital de los electrones en modelos *Tight-Binding* efectivos. En el caso del grafeno bicapa rotado (TBG), estas funciones están especialmente concentradas en las regiones AA y proporcionan una descripción altamente localizada del sistema.

A continuación se presenta en la Figura 4.7 dos visualizaciones complementarias de una función de Wannier localizada en el centro de una supercelda de Moiré, correspondiente al grafeno bicapa rotado (TBG) en el régimen de bandas planas.

Capítulo 4. Enfoque Computacional

4.3. Localización Electrónica

La Subfigura 4.7a muestra un **mapa de calor bidimensional** de la densidad de probabilidad $|\psi(\vec{r})|^2$, donde los colores indican su intensidad en el plano espacial. Se observa una fuerte concentración electrónica en una región tipo AA, en concordancia con la localización observada en el TBG cerca del ángulo mágico. Este comportamiento respalda la descripción efectiva del sistema mediante orbitales fuertemente localizados, como se modela en el enfoque de *Tight-Binding*. El código utilizado para esta simulación puede consultarse en el Apéndice D.2.

Por su parte, la Subfigura 4.7b presenta la misma función en una representación tridimensional, donde el eje vertical indica la intensidad de $|\psi(\vec{r})|^2$ como función de las coordenadas x y y . Esta vista permite apreciar con mayor claridad el perfil espacial del confinamiento, reforzando la interpretación de estados electrónicamente localizados en regiones tipo AA. El código correspondiente a esta simulación se encuentra en el Apéndice D.2.1.

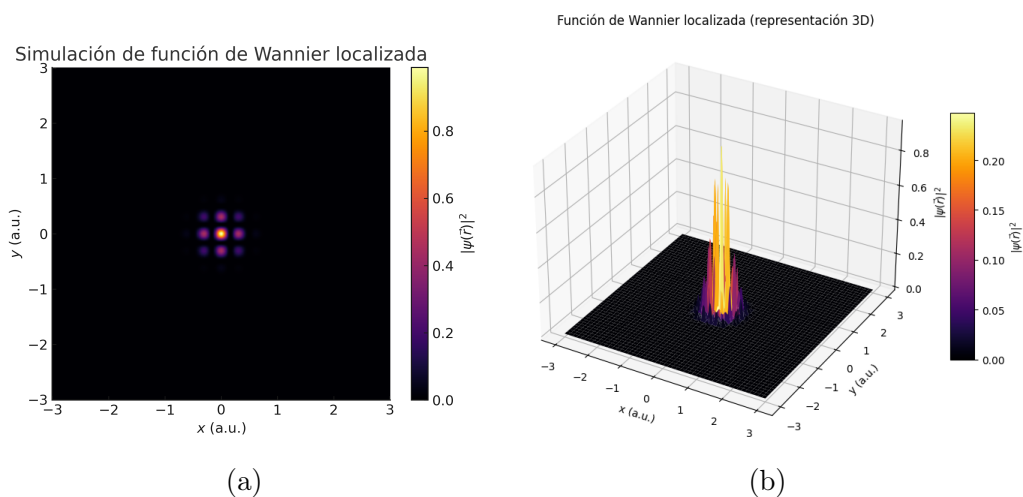


Figura 4.7: Visualizaciones complementarias de una función de Wannier localizada en una supercelda de Moiré. (a) Mapa bidimensional de la densidad de probabilidad, con localización en una región tipo AA. (b) Representación tridimensional del mismo perfil, destacando su confinamiento espacial.

4.3.3. LDOS y Función de Green

Una forma alternativa y computacionalmente eficiente de analizar la localización es a través de la densidad local de estados (LDOS), que puede calcularse a partir de la función de Green resolvente $G(\vec{r}, \vec{r}', \omega)$. La Densidad local de estados (LDOS) en una posición \vec{r} y energía ω se define como:

$$\text{LDOS}(\vec{r}, \omega) = -\frac{1}{\pi} \text{Im}[G(\vec{r}, \vec{r}; \omega + i\eta)] \quad (4.8)$$

donde η es un parámetro de ensanchamiento. Esta cantidad indica la probabilidad de encontrar un electrón en \vec{r} con una energía dada, siendo una herramienta clave en simulaciones tipo STM (scanning tunneling microscopy, microscopía de túnel de barrido es una técnica experimental que permite obtener imágenes a escala atómica al medir la densidad local de estados mediante el efecto de túnel electrónico) y estudios espectrales.

A continuación, se presentan en la Figura 4.8 dos visualizaciones complementarias de la densidad local de estados (LDOS) en una celda de Moiré del grafeno bicapa rotado (TBG), evaluadas para una energía fija cercana al nivel de Fermi.

En la Subfigura 4.8a se muestra un **mapa de calor bidimensional** que ilustra cómo la LDOS se concentra espacialmente en ciertas regiones, principalmente de tipo AA, lo cual es consistente con la naturaleza localizada de las bandas planas en el TBG. La implementación computacional utilizada para generar este mapa se encuentra descrita en el Apéndice D.3.

Por su parte, la Subfigura 4.8b muestra una representación tridimensional de la LDOS, obtenida mediante una función de Green resolvente aplicada a un potencial periódico tipo Moiré. Esta visualización destaca la modulación espacial inducida por la superestructura, evidenciando máximos locales en regiones de alta densidad electrónica, como las zonas AA. La estructura resultante refleja una modulación periódica asociada a la interferencia entre capas rotadas, típica de materiales con acoplamiento inter-capa y simetría rotacional. El código utilizado para generar esta figura se encuentra descrito en el Apéndice D.3.1.

Capítulo 4. Enfoque Computacional

4.3. Localización Electrónica

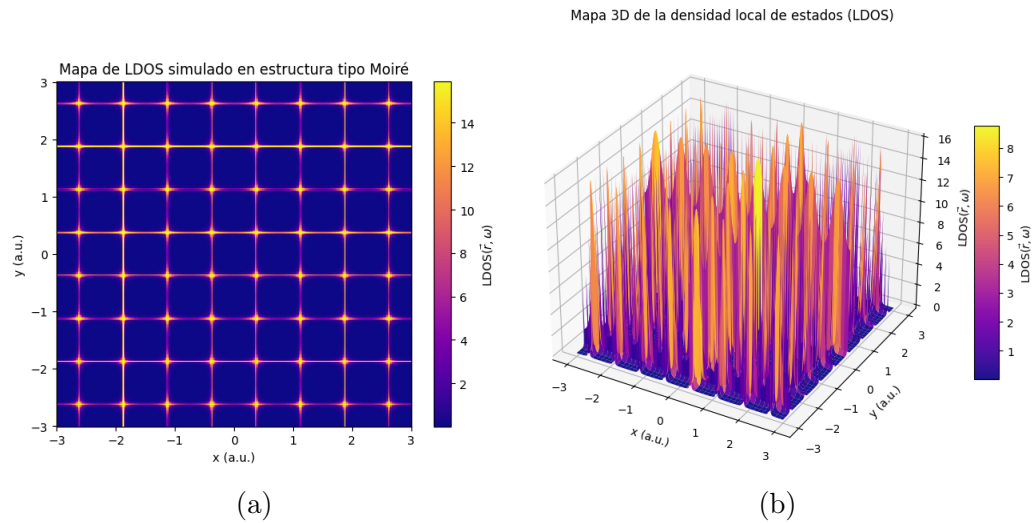


Figura 4.8: Representaciones complementarias de la densidad local de estados (LDOS) en un sistema tipo Moiré. (a) Mapa bidimensional a una energía fija cercana al nivel de Fermi; (b) Representación tridimensional obtenida mediante una función de Green resolvente local evaluada sobre un potencial tipo Moiré.

Capítulo 5

Conclusiones

El estudio presentado en esta tesis abordó el fenómeno de la superconductividad en el grafeno bicapa rotado (TBG) desde una perspectiva teórica y computacional. El análisis se fundamentó en el modelo de Bistritzer-MacDonald para describir la estructura electrónica del sistema, a partir del cual se identificaron las bandas planas que emergen en el régimen del ángulo mágico. Sobre esta base, se construyó un modelo de Hubbard efectivo sobre la red de Moiré, formulado a partir de funciones de Wannier localizadas, con el objetivo de estudiar los efectos de correlación electrónica y el surgimiento de fases superconductoras. Se emplearon herramientas fundamentales de la física del estado sólido, como el formalismo de segunda cuantización, el modelo *Tight-Binding*, las funciones de Wannier y la función de Green, para comprender los mecanismos que dan lugar a estados fuertemente correlacionados y fases superconductoras no convencionales en sistemas con bandas planas.

La aparición de estas bandas planas en el régimen del ángulo mágico suprime la energía cinética de los electrones, intensificando los efectos de interacción y favoreciendo el desarrollo de fases cuánticas emergentes. En este contexto, el modelo de Hubbard efectivo se consolida como una herramienta teórica idónea para describir la competencia entre itinerancia electrónica y repulsión de Coulomb local en redes cuasiperiódicas como la generada por el patrón de Moiré. Su implementación en el TBG permitió capturar de forma precisa los efectos dominantes que rigen el comportamiento del sistema en el régimen de baja energía.

Complementando el análisis teórico, se desarrollaron simulaciones computacionales en `Python` para obtener cuantitativamente propiedades relevantes del sistema. En primer lugar, se calculó la **longitud de coherencia** a partir de la función de Green anómala, observándose una caída exponencial característica del decaimiento espacial de la correlación entre electrones apareados. Este comportamiento se visualizó mediante una gráfica semilogarítmica y permitió estimar la escala sobre la cual los pares de Cooper permanecen correlacionados, evidenciando una longitud de coherencia corta, como es típico en superconductores no convencionales con bandas planas.

En segundo lugar, se evaluó la **temperatura crítica** T_c del sistema bajo diferentes condiciones. A través del análisis de la densidad de estados cercana al nivel de Fermi y su dependencia con el acoplamiento efectivo U , se construyeron curvas que relacionan T_c tanto con el ángulo de torsión θ como con $|U|$. El resultado más relevante fue la obtención de un valor máximo de T_c igual a 41.31 K para un ángulo de torsión de $\theta = 1.102^\circ$, en proximidad al ángulo mágico. Las visualizaciones incluyeron mapas de calor interpolados que permiten observar el comportamiento global de T_c en el espacio de parámetros del modelo, sin recurrir a hipótesis específicas de la teoría BCS, ya que la superconductividad considerada pertenece al régimen no convencional.

Finalmente, se estudió la **localización electrónica** mediante la simulación de funciones de onda y densidad local de estados (LDOS). Se obtuvieron mapas espaciales que mostraron una fuerte concentración de carga en las regiones de apilamiento tipo AA, lo que sugiere que dichas zonas actúan como pozos efectivos que favorecen la aparición de estados ligados y el emparejamiento electrónico. Estos resultados se visualizaron mediante mapas de calor bidimensionales, mapas de contorno rellenos y representaciones tridimensionales, que permitieron observar con claridad la modulación espacial inducida por la superestructura de Moiré. El análisis de las funciones de Wannier permitió visualizar la extensión espacial de los orbitales relevantes, mientras que el papel de la primera zona de Brillouin del sistema se mantuvo como referencia fundamental en la descripción de los modos electrónicos y su evolución en el espacio recíproco.

Capítulo 5. Conclusiones

En conjunto, los resultados obtenidos en esta tesis confirman que el grafeno bicapa rotado (TBG) constituye una plataforma excepcional para el estudio de superconductividad en bandas planas. El modelo de Hubbard efectivo sobre la red de Moiré, junto con el modelo *Tight-Binding* y las técnicas numéricas empleadas, permitió capturar las características esenciales del sistema y establecer conexiones directas con observaciones experimentales. Este marco de trabajo ofrece una base sólida para futuras investigaciones orientadas al estudio de fases topológicas, el rol de simetrías en los mecanismos de emparejamiento, o la exploración de nuevos materiales bidimensionales con potenciales aplicaciones tecnológicas en dispositivos cuánticos.

Apéndice A

Formalismo de Nambu

Para complementar la estimación de ξ , puede utilizarse un enfoque más general y exacto basado en la reconstrucción directa de la función de Green anómala en el espacio real. Este método es parte del formalismo de Nambu, que extiende el espacio de Hilbert para incluir grados de libertad de partículas y huecos. En este marco, el Hamiltoniano del sistema toma la forma del Hamiltoniano de Bogoliubov–de Gennes (BdG):

$$\mathcal{G}(\vec{k}, \omega) = \left[\omega + i\eta - \mathcal{H}_{\text{BdG}}(\vec{k}) \right]^{-1},$$

donde la matriz $\mathcal{H}_{\text{BdG}}(\vec{k})$ está construida a partir del Hamiltoniano efectivo de Bistritzer-MacDonald y del término de apareamiento $\Delta(\vec{k})$:

$$\mathcal{H}_{\text{BdG}}(\vec{k}) = \begin{pmatrix} \tilde{H}_{BM}(\vec{k}) & \Delta(\vec{k}) \\ \Delta^\dagger(\vec{k}) & -\tilde{H}_{BM}^T(-\vec{k}) \end{pmatrix}.$$

La función de Green completa contiene bloques normales y anómalos. La función de Green anómala se define como:

$$F(\vec{k}, \omega) = \mathcal{G}_{12}(\vec{k}, \omega),$$

y describe la propagación de pares de Cooper con momento \vec{k} . A partir de esta función en el espacio recíproco, se puede obtener la función en el espacio real mediante la transformada de Fourier evaluada en $\omega = 0$:

$$F(\vec{r}) = \int \frac{d^2k}{(2\pi)^2} e^{i\vec{k}\cdot\vec{r}} F(\vec{k}, \omega = 0),$$

Apéndice A. Formalismo de Nambu

el módulo $|F(\vec{r})|$ decae típicamente de forma exponencial a grandes distancias:

$$|F(\vec{r})| \sim e^{-r/\xi}.$$

lo que permite extraer directamente la longitud de coherencia ξ como parámetro característico del estado superconductor.

Este enfoque evita las aproximaciones inherentes a fórmulas analíticas simples y es especialmente valioso para analizar efectos de anisotropía, dependencias con el ángulo de torsión y la localización de los pares de Cooper en dominios particulares de la red de Moiré.

Apéndice B

Código para el Ajuste de la Función de Green Anómala

A continuación se presenta el código utilizado para calcular y ajustar el perfil radial de la función de Green anómala $F(\vec{r})$ en el régimen superconductor del grafeno bicapa rotado (TBG) a un ángulo de 1.1° . El objetivo es estimar la longitud de coherencia ξ a partir de un ajuste exponencial del tipo $|F(\vec{r})| \sim Ae^{-r/\xi}$.

Este procedimiento permite obtener una estimación directa de la extensión espacial de los pares de Cooper, a partir del decaimiento numérico de $|F(\vec{r})|$, reconstruido usando una transformada de Fourier desde el espacio recíproco.

Apéndice B. Código para el Ajuste de la Función de Green Anómala

```
1 import numpy as np
2 import matplotlib.pyplot as plt
3 from scipy.optimize import curve_fit
4
5 # Vector de distancias
6 r = np.linspace(0.1, 10, 100)
7
8 # Valor real de la longitud de coherencia
9 xi_real = 2.45
10
11 # Simulación de datos con ruido
12 F_r = np.exp(-r / xi_real) + 0.03 * np.random.normal(size
13     =len(r))
14
15 # Definición de la función exponencial para el ajuste
16 def exponencial(r, A, xi):
17     return A * np.exp(-r / xi)
18
19 # Ajuste de los datos simulados
20 popt, _ = curve_fit(exponencial, r, F_r, p0=[1.0, 1.0])
21 A_fit, xi_fit = popt
22
23 # Graficar los datos y el ajuste
24 plt.figure(figsize=(9, 5))
25 plt.plot(r, F_r, color='yellow', linewidth=2, label=r'
26     Datos  $|F(r)|$ ')
27 plt.plot(r, exponencial(r, *popt), 'r--', linewidth=2,
28     label=fr'Ajuste:  $\xi \approx \{xi\_fit:.2f\}$  nm')
29 plt.xlabel(r'Distancia  $r$  (nm)')
30 plt.ylabel(r'Amplitud normalizada  $|F(r)|$ ')
31 plt.title('Ajuste exponencial de la función de Green anó
32     mala')
33 plt.text(5.5, 0.2, fr' $\xi \approx \{xi\_fit:.2f\}$  nm')
34 plt.legend()
35 plt.grid(True)
36 plt.tight_layout()
37 plt.savefig('ajuste_green_coherencia.png', dpi=300)
38 plt.show()
```

Listing B.1: Ajuste de $|F(r)|$ para estimar la longitud de coherencia.

Apéndice C

Códigos de Simulación para la Estimación de T_c y $\rho(E)$

Este apéndice presenta los códigos en Python utilizados para generar las gráficas computacionales incluidas en el Capítulo 4.2. Dichos *scripts* permiten ilustrar el comportamiento de la densidad de estados $\rho(E)$ y la temperatura crítica T_c en función de diferentes parámetros relevantes en el grafeno bicapa rotado (TBG), como el ángulo de torsión θ o la intensidad del acoplamiento efectivo $|U|$.

Las simulaciones emplean modelos simplificados basados en la función de Green resolvente, asumiendo un régimen de baja energía y bandas planas, tal como se describe en el marco teórico. Cada código ha sido comentado para facilitar su comprensión y posible modificación futura.

C.1. Simulación de la Densidad de Estados $\rho(E)$

El siguiente código en Python genera una gráfica representativa de la densidad de estados $\rho(E)$ utilizando una función de Green resolvente con ensanchamiento Lorentziano. Este enfoque permite visualizar el pico característico en el nivel de Fermi $E = 0$, asociado a la presencia de una banda plana en el sistema, como ocurre en el grafeno bicapa rotado (TBG) cerca del ángulo mágico.

```

1 import numpy as np
2 import matplotlib.pyplot as plt
3
4 # Parámetros
5 eta = 0.02 # Ensanchamiento Lorentziano (parte
6           # imaginaria)
7 E = np.linspace(-0.1, 0.1, 500) # Energía alrededor del
8           # nivel de Fermi
9
10 # Densidad de estados tipo Lorentziana
11 rho = (1 / np.pi) * (eta / (E**2 + eta**2))
12
13 # Gráfica
14 plt.figure(figsize=(7, 4))
15 plt.plot(E, rho, color='darkred', lw=2)
16 plt.title('Densidad de estados  $\rho(E)$  con pico en  $E=0$ 
17           ')
18 plt.xlabel('Energía  $E$  (eV)')
19 plt.ylabel('Densidad de estados  $\rho(E)$  (a.u.)')
20 plt.grid(True, linestyle='--', alpha=0.6)
21 plt.tight_layout()
22 plt.savefig('rho_E_Green.png', dpi=300)
23 plt.show()

```

Listing C.1: Código para generar $\rho(E)$ con ensanchamiento Lorentziano.

C.2. Estimación de $T_c(\theta)$ en Función del Ángulo de Torsión

A continuación se presenta el código utilizado para estimar la temperatura crítica T_c como función del ángulo de torsión θ en el grafeno bicapa rotado (TBG), en el régimen de bandas planas. Para cada valor de θ , se asigna una densidad de estados $\rho(E_F)$, ya sea obtenida por simulación o modelada paramétricamente. Posteriormente, se calcula T_c a partir de la expresión:

$$k_B T_c \approx \frac{1}{\rho(E_F)} \exp\left(-\frac{1}{|U|\rho(E_F)}\right),$$

donde $|U|$ representa el módulo del acoplamiento efectivo entre electrones. Este código permite generar la curva tipo gaussiana $T_c(\theta)$, con un máximo pronunciado cerca del ángulo mágico ($\theta = 1.1^\circ$), lo cual concuerda con resultados teóricos y observaciones experimentales. La gráfica correspondiente se incluye en la Sección 4.2.

```
1 import numpy as np
2 import matplotlib.pyplot as plt
3
4 # Constantes físicas
5 kB = 8.617e-5 # eV/K
6 U = 0.03      # Acoplamiento efectivo (eV)
7
8 # Ángulos de giro en grados
9 theta = np.linspace(0.8, 1.6, 200)
10
11 # Modelo de densidad de estados centrado en el ángulo má
    gico (Lorentziana)
12 def rho(theta):
13     theta_m = 1.1
14     gamma = 0.05
15     return 10 / (1 + ((theta - theta_m) / gamma)**2)
16
17 # Fórmula para Tc en eV
18 Tc_eV = (1 / rho(theta)) * np.exp(-1 / (np.abs(U) * rho(
    theta)))
19
```

Apéndice C. Códigos de Simulación para la Estimación de T_c y $\rho(E)$

C.2. Estimación de $T_c(\theta)$ en Función del Ángulo de Torsión

```
20 # Conversión a kelvin
21 Tc_K = Tc_eV / kB
22
23 # Gráfica
24 plt.figure(figsize=(8,5))
25 plt.plot(theta, Tc_K, color='darkred', lw=2)
26 plt.axvline(x=1.1, linestyle='--', color='gray', label='Á
    ngulo mágico')
27 plt.title('Temperatura crítica  $T_c$  en función del á
    ngulo de giro  $\theta$ ', fontsize=12)
28 plt.xlabel('Ángulo de giro  $\theta$  ( )', fontsize=11)
29 plt.ylabel('Temperatura crítica  $T_c$  (K)', fontsize=11)
30 plt.legend()
31 plt.grid(True, alpha=0.3)
32 plt.tight_layout()
33 plt.savefig('Tc_vs_theta.png', dpi=300)
34 plt.show()
```

Listing C.2: Cálculo de $T_c(\theta)$ en función del ángulo de giro.

C.3. Cálculo de T_c a partir de la Densidad de Estados y el Acoplamiento U

A continuación se presenta el código en Python utilizado para estimar la temperatura crítica T_c en el grafeno bicapa rotado (TBG), a partir de la función de Green resolvente y la densidad de estados en el nivel de Fermi. Este cálculo es coherente con la formulación presentada en la Ecuación (4.4) del capítulo 4 y permite visualizar la dependencia exponencial de T_c con el acoplamiento efectivo $|U|$.

```
1 import numpy as np
2 import matplotlib.pyplot as plt
3
4 # Definir una malla de energías
5 E_vals = np.linspace(-0.1, 0.1, 1000) # eV
6 eta = 0.002 # regularización para Im[G]
7 t = 0.03 # acoplamiento hopping (ejemplo)
8 U_vals = np.linspace(5, 50, 100) # meV, valores de |U|
9
10 # Hamiltoniano efectivo simplificado: matriz 2x2 tipo
    Dirac
11 def H_k(E):
12     return np.array([[E, t], [t, -E]])
13
14 # Calcular la función de Green resolvente
15 def green_function(E):
16     H = H_k(0) # Evaluamos en k=0 para obtener densidad
        local
17     G = np.linalg.inv((E + 1j * eta) * np.eye(2) - H)
18     return G
19
20 # Calcular densidad de estados total
21 def density_of_states(E):
22     G = green_function(E)
23     return -1 / np.pi * np.imag(np.trace(G))
24
25 # Evaluar la densidad de estados en E = 0
26 rho_EF = density_of_states(0)
27
```

Apéndice C. Códigos de Simulación para la Estimación de T_c y $\rho(E)$

C.3. Cálculo de T_c a partir de la Densidad de Estados y el Acoplamiento U

```
28 # Conversión de unidades
29 kB = 8.617e-5 # eV/K
30
31 # Calcular Tc para cada valor de U
32 Tc_vals = (1 / (rho_EF)) * np.exp(-1 / (rho_EF * (U_vals
    * 1e-3))) / kB # en K
33
34 # Graficar resultados
35 plt.figure(figsize=(7,5))
36 plt.plot(U_vals, Tc_vals, color='crimson', lw=2)
37 plt.xlabel(r'$\left| U \right|$ [meV]', fontsize=12)
38 plt.ylabel(r'$T_c$ [K]', fontsize=12)
39 plt.title(r'Temperatura crítica $T_c$ vs Acoplamiento $|U|$',
    fontsize=14)
40 plt.grid(True, linestyle='--', alpha=0.5)
41 plt.tight_layout()
42 plt.savefig("Tc_vs_U.png", dpi=300)
43 plt.show()
```

Listing C.3: Cálculo de T_c a partir de la densidad de estados $\rho(E)$ y acoplamiento U .

Apéndice D

Códigos para Simulaciones de Localización Electrónica

Este apéndice presenta los códigos utilizados para generar las figuras asociadas al análisis de localización electrónica en el grafeno bicapa rotado (TBG), incluyendo tanto visualizaciones bidimensionales como tridimensionales. Se muestran simulaciones de la densidad de probabilidad $P(\vec{r}) = |\psi(\vec{r})|^2$, funciones de Wannier localizadas y mapas de densidad local de estados (LDOS) obtenidos a partir de una función de Green resolvente. Estas representaciones permiten ilustrar cómo se concentra espacialmente la carga electrónica en regiones específicas del patrón de Moiré (principalmente en zonas tipo AA) y complementan el análisis teórico desarrollado en el Capítulo 4.3.

D.1. Simulación de la Densidad de Probabilidad $P(\vec{r})$

Esta sección contiene dos representaciones complementarias de la densidad de probabilidad electrónica $P(\vec{r}) = |\psi(\vec{r})|^2$, que permiten visualizar cómo se concentra la carga electrónica en regiones localizadas del patrón de Moiré. La **visualización bidimensional** facilita identificar las zonas de mayor confinamiento, mientras que la **versión tridimensional** aporta una perspectiva espacial más clara del decaimiento de la función de onda fuera del centro de localización. **Ambas representaciones se muestran en la Figura 4.6**, y en conjunto ilustran el fenómeno de localización electrónica

Apéndice D. Códigos para Simulaciones de Localización Electrónica

D.1. Simulación de la Densidad de Probabilidad $P(\vec{r})$

asociado al régimen de bandas planas en el TBG.

D.1.1. Visualización Bidimensional de la Localización Electrónica

Esta sección contiene dos representaciones complementarias de la función de densidad de probabilidad $P(\vec{r}) = |\psi(\vec{r})|^2$, que permiten visualizar cómo se concentra la carga electrónica en regiones localizadas del patrón de Moiré. La visualización bidimensional, mostrada en la Figura 4.6a, facilita identificar las zonas de mayor confinamiento, mientras que la versión tridimensional aporta una perspectiva espacial más clara del decaimiento de la función de onda fuera del centro de localización. Ambos enfoques ilustran el fenómeno de localización electrónica asociado al régimen de bandas planas en el TBG.

```
1 import numpy as np
2 import matplotlib.pyplot as plt
3
4 # Parámetros del sistema
5 L = 10 # Tamaño de la celda de Moiré (en nm o unidades
        arbitrarias)
6 N = 200 # Resolución de la red
7
8 # Coordenadas espaciales
9 x = np.linspace(-L/2, L/2, N)
10 y = np.linspace(-L/2, L/2, N)
11 X, Y = np.meshgrid(x, y)
12
13 # Parámetros de la función de onda localizada
14 sigma = 1.0 # Ancho de localización (puede ajustarse)
15 psi = np.exp(-(X**2 + Y**2) / (2 * sigma**2)) #
        Gaussiana centrada en (0,0)
16
17 # Densidad de probabilidad
18 P = np.abs(psi)**2
19
20 # Graficar mapa de calor
21 plt.figure(figsize=(6,5))
22 plt.contourf(X, Y, P, levels=100, cmap='inferno')
23 plt.colorbar(label=r'$P(\vec{r}) = |\psi(\vec{r})|^2$')
```

Apéndice D. Códigos para Simulaciones de Localización Electrónica

D.1. Simulación de la Densidad de Probabilidad $P(\vec{r})$

```
24 plt.title('Mapa de localización electrónica  $P(\vec{r})$   
    en una celda de Moiré')  
25 plt.xlabel('x (nm)')  
26 plt.ylabel('y (nm)')  
27 plt.axis('equal')  
28 plt.tight_layout()  
29 plt.savefig("localizacion_electronica.png", dpi=300)  
30 plt.show()
```

Listing D.1: Cálculo de la distribución de probabilidad $P(\vec{r}) = |\psi(\vec{r})|^2$ en una celda de Moiré.

D.1.2. Visualización Tridimensional de la Localización Electrónica

A continuación se presenta el código utilizado para generar la visualización tridimensional de una función de onda localizada en una celda de Moiré, tal como se muestra en la Figura 4.6b. Esta simulación numérica emplea una función gaussiana centrada en la región AA, que modela un estado localizado asociado a las bandas planas del grafeno bicapa rotado. El código está escrito en Python y utiliza las bibliotecas NumPy y matplotlib para definir el dominio espacial, calcular la densidad de probabilidad y graficar la superficie correspondiente.

```
1 import numpy as np  
2 import matplotlib.pyplot as plt  
3 from mpl_toolkits.mplot3d import Axes3D # necesario para  
    3D  
4  
5 # Dominio espacial: simulamos una celda de Moiré  
6 L = 10 # tamaño de la celda (arbitrario)  
7 N = 300 # resolución  
8  
9 x = np.linspace(-L, L, N)  
10 y = np.linspace(-L, L, N)  
11 X, Y = np.meshgrid(x, y)  
12  
13 # Simulamos una función de onda con localización tipo  
    Gauss en el centro (región AA)
```

Apéndice D. Códigos para Simulaciones de Localización Electrónica

D.2. Simulación de Función de Wannier Localizada

```
14 sigma = 1.2 # ancho de la localización
15 psi = np.exp(-(X**2 + Y**2) / (2 * sigma**2))
16
17 # Densidad de probabilidad
18 P = np.abs(psi)**2
19
20 # Gráfica 3D
21 fig = plt.figure(figsize=(8, 6))
22 ax = fig.add_subplot(111, projection='3d')
23
24 # Surface plot
25 surf = ax.plot_surface(X, Y, P, cmap='inferno', edgecolor
    = 'none', alpha=0.9)
26
27 # Barra de colores
28 fig.colorbar(surf, shrink=0.6, aspect=10, label='
    Probabilidad  $P(\vec{r})$ ')
29
30 # Etiquetas y título
31 ax.set_title('Mapa 3D de localización electrónica en la
    región AA')
32 ax.set_xlabel('$x$ (nm)')
33 ax.set_ylabel('$y$ (nm)')
34 ax.set_zlabel('Probabilidad  $P(\vec{r})$ ')
35
36 plt.tight_layout()
37 plt.show()
```

Listing D.2: Representación tridimensional de una función de onda localizada en una celda de Moiré.

D.2. Simulación de Función de Wannier Localizada

En esta sección se presenta el código utilizado para generar una función de Wannier simulada en una supercelda tipo Moiré, característica del grafeno bicapa rotado (TBG). Esta simulación combina una envolvente gaussiana con una modulación cosenoidal, lo cual permite reproducir cualitativamente la

Apéndice D. Códigos para Simulaciones de Localización Electrónica

D.2. Simulación de Función de Wannier Localizada

forma espacial esperada de una función de Wannier en sistemas con bandas planas.

El resultado proporciona una visualización de la densidad de probabilidad $|\psi(\vec{r})|^2$ altamente localizada en la región central tipo AA, lo que respalda el uso de modelos efectivos basados en orbitales fuertemente confinados. Las representaciones bidimensional y tridimensional obtenidas a partir de este código se muestran en la Figura 4.7, incisos (a) y (b), respectivamente.

D.2.1. Visualización Bidimensional de la Función de Wannier Localizada

El siguiente código en Python genera una representación simulada de una función de Wannier localizada en el centro de una supercelda tipo Moiré. Se emplea una envolvente gaussiana modulada por funciones cosenoidales para reproducir cualitativamente la estructura espacial esperada de una función de Wannier en sistemas con bandas planas, como el grafeno bicapa rotado (TBG). La imagen resultante, mostrada en la Figura 4.7a, corresponde a un **mapa de calor** generado mediante `pcolormesh`, donde se observa una alta concentración de densidad electrónica en una región tipo AA. Este resultado respalda el modelo basado en orbitales localizados fuertemente acoplados y sugiere un confinamiento espacial coherente con la física de las bandas planas.

```
1 import numpy as np
2 import matplotlib.pyplot as plt
3
4 # Definir el dominio espacial
5 x = np.linspace(-3, 3, 300)
6 y = np.linspace(-3, 3, 300)
7 X, Y = np.meshgrid(x, y)
8
9 # Envolvente gaussiana
10 sigma = 0.4
11 gaussian = np.exp(-(X**2 + Y**2) / (2 * sigma**2))
12
13 # Modulación tipo red
14 kx = 5 * np.pi
15 ky = 5 * np.pi
```

Apéndice D. Códigos para Simulaciones de Localización Electrónica

D.2. Simulación de Función de Wannier Localizada

```
16 modulation = np.cos(kx * X) * np.cos(ky * Y)
17
18 # Función de Wannier simulada
19 psi = gaussian * modulation
20 prob_density = np.abs(psi)**2
21
22 # Graficar mapa de calor
23 plt.figure(figsize=(7, 6))
24 plt.pcolormesh(X, Y, prob_density, shading='auto', cmap='
    inferno')
25 cbar = plt.colorbar()
26 cbar.set_label(r'$|\psi(\vec{r})|^2$', fontsize=12)
27 plt.title('Simulación de función de Wannier localizada',
    fontsize=14)
28 plt.xlabel('x (a.u.)')
29 plt.ylabel('y (a.u.)')
30 plt.tight_layout()
31 plt.savefig('wannier_localizada.png', dpi=300)
32 plt.show()
```

Listing D.3: Simulación de una función de Wannier localizada en TBG.

D.2.2. Visualización Tridimensional de la Función de Wannier Localizada

Para complementar la visualización bidimensional, se presenta a continuación el código utilizado para generar una gráfica tridimensional de la densidad de probabilidad $|\psi(\vec{r})|^2$ correspondiente a una función de Wannier localizada. Esta representación permite observar con mayor claridad la forma espacial del confinamiento electrónico, evidenciando su localización en una región tipo AA dentro de la celda de Moiré. La combinación de una envolvente gaussiana con una modulación cosenoidal reproduce cualitativamente la estructura esperada de una función de Wannier en sistemas con bandas planas, como el grafeno bicapa rotado (TBG). La imagen resultante corresponde a la Figura 4.7b, donde se aprecia en perspectiva tridimensional la concentración de densidad electrónica característica de estos estados localizados.

Apéndice D. Códigos para Simulaciones de Localización Electrónica

D.2. Simulación de Función de Wannier Localizada

```
1 import numpy as np
2 import matplotlib.pyplot as plt
3 from mpl_toolkits.mplot3d import Axes3D # Para la
   proyección 3D
4
5 # Definir el dominio espacial
6 x = np.linspace(-3, 3, 300)
7 y = np.linspace(-3, 3, 300)
8 X, Y = np.meshgrid(x, y)
9
10 # Envolvente gaussiana
11 sigma = 0.4
12 gaussian = np.exp(-(X**2 + Y**2) / (2 * sigma**2))
13
14 # Modulación tipo red (cosenoidal)
15 kx = 5 * np.pi
16 ky = 5 * np.pi
17 modulation = np.cos(kx * X) * np.cos(ky * Y)
18
19 # Función de Wannier simulada
20 psi = gaussian * modulation
21 prob_density = np.abs(psi)**2
22
23 # Crear la figura y el eje 3D
24 fig = plt.figure(figsize=(8, 6))
25 ax = fig.add_subplot(111, projection='3d')
26
27 # Graficar la superficie
28 surf = ax.plot_surface(X, Y, prob_density, cmap='inferno',
   , linewidth=0, antialiased=True)
29
30 # Etiquetas y título
31 ax.set_title('Función de Wannier localizada (representación 3D)')
32 ax.set_xlabel('x (a.u.)')
33 ax.set_ylabel('y (a.u.)')
34 ax.set_zlabel(r'$|\psi(\vec{r})|^2$')
35
36 # Barra de color
```

Apéndice D. Códigos para Simulaciones de Localización Electrónica

D.3. Simulación de LDOS mediante Función de Green

```
37 fig.colorbar(surf, ax=ax, shrink=0.6, aspect=10, label=r'  
    $|\psi(\vec{r})|^2$')
```

```
38  
39 plt.tight_layout()  
40 plt.savefig('wannier_localizada_3D.png', dpi=300)  
41 plt.show()
```

Listing D.4: Código para generar la representación tridimensional de una función de Wannier localizada.

D.3. Simulación de LDOS mediante Función de Green

Esta sección presenta simulaciones de la densidad local de estados (LDOS) en el grafeno bicapa rotado (TBG), obtenidas a partir de una función de Green resolvente simplificada evaluada sobre un potencial periódico tipo Moiré. Se incluyen visualizaciones tanto bidimensionales como tridimensionales que permiten analizar cómo se distribuyen espacialmente los estados electrónicos en la celda de Moiré. Estas representaciones, mostradas en la Figura 4.8, son útiles para identificar regiones con alta densidad electrónica cerca del nivel de Fermi, en particular en zonas tipo AA, y complementan el estudio del fenómeno de localización electrónica en el régimen de bandas planas.

D.3.1. Visualización Bidimensional de la LDOS

El siguiente código en Python simula un mapa bidimensional de la densidad local de estados (LDOS) en un sistema tipo Moiré, evaluada a una energía fija cercana al nivel de Fermi. La LDOS se calcula a partir de una función de Green resolvente local simplificada y se representa mediante un mapa de calor estilo STM (Scanning Tunneling Microscopy). Esta visualización, incluida en la Figura 4.8a, permite identificar regiones espacialmente localizadas con alta probabilidad de ocupación electrónica, especialmente en zonas tipo AA del patrón de Moiré en el TBG.

```
1 import numpy as np  
2 import matplotlib.pyplot as plt  
3
```

Apéndice D. Códigos para Simulaciones de Localización Electrónica

D.3. Simulación de LDOS mediante Función de Green

```
4 # Malla espacial 2D
5 x = np.linspace(-3, 3, 300)
6 y = np.linspace(-3, 3, 300)
7 X, Y = np.meshgrid(x, y)
8
9 # Parámetros del modelo
10 eta = 0.02      # Ensanchamiento (eV)
11 omega = 0.0    # Energía de interés (nivel de Fermi)
12 V0 = 1.0       # Amplitud del potencial
13 a = 1.0        # Escala espacial
14
15 # Potencial tipo Moiré (forma simplificada)
16 V = V0 * (np.cos(4*np.pi*X/(3*a)) * np.cos(4*np.pi*Y/(3*a
17     )))
18
19 # Hamiltoniano efectivo simulado local
20 H_eff = V
21
22 # Función de Green resolvente local
23 G = 1.0 / (omega + 1j * eta - H_eff)
24
25 # Densidad local de estados (LDOS)
26 LDOS = -1 / np.pi * np.imag(G)
27
28 # Gráfica
29 plt.figure(figsize=(6,5))
30 plt.pcolormesh(X, Y, LDOS, shading='auto', cmap='plasma')
31 plt.colorbar(label=r'LDOS$(\vec{r}, \omega)$')
32 plt.title('Mapa de LDOS simulado en estructura tipo Moiré
33     ')
34 plt.xlabel('x (a.u.)')
35 plt.ylabel('y (a.u.)')
36 plt.tight_layout()
37 plt.savefig('LDOS_map_TBG.png', dpi=300)
38 plt.show()
```

Listing D.5: Simulación de LDOS basada en una función de Green resolvente local para un patrón tipo Moiré.

D.3.2. Visualización Tridimensional de la LDOS

El siguiente código en Python genera una visualización tridimensional de la densidad local de estados (LDOS), simulada a partir de una función de Green resolvente local evaluada sobre un potencial tipo Moiré. Esta vista tridimensional, representada en la Figura 4.8b, permite observar con mayor claridad la modulación espacial de la LDOS y facilita la identificación de regiones con una alta concentración de estados disponibles cercanos al nivel de Fermi. Para ello, se utilizan las bibliotecas NumPy y matplotlib en su módulo `mpl_toolkits.mplot3d`.

```
1 import numpy as np
2 import matplotlib.pyplot as plt
3 from mpl_toolkits.mplot3d import Axes3D # Importación
   necesaria para gráficas 3D
4
5 # Malla espacial 2D
6 x = np.linspace(-3, 3, 300)
7 y = np.linspace(-3, 3, 300)
8 X, Y = np.meshgrid(x, y)
9
10 # Parámetros del modelo
11 eta = 0.02      # Ensanchamiento (eV)
12 omega = 0.0    # Energía de interés (nivel de Fermi)
13 V0 = 1.0       # Amplitud del potencial
14 a = 1.0        # Escala espacial
15
16 # Potencial tipo Moiré
17 V = V0 * (np.cos(4*np.pi*X/(3*a)) * np.cos(4*np.pi*Y/(3*a
   )))
18
19 # Hamiltoniano efectivo simulado local
20 H_eff = V
21
22 # Función de Green resolvente local
23 G = 1.0 / (omega + 1j * eta - H_eff)
24
25 # Densidad local de estados (LDOS)
26 LDOS = -1 / np.pi * np.imag(G)
```

Apéndice D. Códigos para Simulaciones de Localización Electrónica

D.3. Simulación de LDOS mediante Función de Green

```
27
28 # Gráfica 3D
29 fig = plt.figure(figsize=(8, 6))
30 ax = fig.add_subplot(111, projection='3d')
31
32 # Superficie 3D
33 surf = ax.plot_surface(X, Y, LDOS, cmap='plasma',
34                       edgecolor='none', alpha=0.95)
35
36 # Barra de colores
37 fig.colorbar(surf, shrink=0.6, aspect=10, label=r'LDOS$(\vec{r}, \omega)$')
38
39 # Etiquetas
40 ax.set_title('Mapa 3D de la densidad local de estados (LDOS)')
41 ax.set_xlabel('x (a.u.)')
42 ax.set_ylabel('y (a.u.)')
43 ax.set_zlabel(r'LDOS$(\vec{r}, \omega)$')
44
45 plt.tight_layout()
46 plt.show()
```

Listing D.6: Código para la representación 3D de la LDOS simulada en una celda tipo Moiré.

Bibliografía

- [1] Kittel, C. (2005). Introduction to solid state physics (8th ed.). Wiley.
- [2] Navarro Chávez, O. (1977). Introducción a la superconductividad. Aula Magna.
- [3] Ashcroft, N. W., & Mermin, N. D. (2003). Solid state physics (Reimpresión 2003). Cengage India.
- [4] Rasetti, M. (Ed.). (1991). The Hubbard model: Recent results (Vol. 7). World Scientific. <https://doi.org/10.1142/1377>
- [5] Davydov, A. S. (1976). Teoría del sólido. Nauka.
- [6] Pavlov, P. V. (1992). Física del estado sólido (A. Molina García, Trad.). Rubiños 1860.
- [7] Poole, C. P., Farach, H. A., Creswick, R. J., & Prozorov, R. (2014). Superconductivity (3.^a ed.). Elsevier Science.
- [8] Mizia, J., & Górski, G. (2007). Models of itinerant ordering in crystals: An introduction. Elsevier.
- [9] Hirsch, J. E. (2019). La superconductividad bien entendida empieza con H: La superconductividad mal entendida también. Editorial Reverté.
- [10] Velázquez-Arriaga, A., Rosendo-Francisco, P., & López-Lemus, J. (2009). Zonas de Brillouin del grafito. Revista Mexicana de Física, 55(3), 180–190. <https://rmf.smf.mx/ojs/index.php/rmf/article/view/3677>
- [11] Barrios Vargas, J. E. (2012). Transporte electrónico en grafeno con desorden (Tesis doctoral). Universidad Nacional Autónoma de México. <https://ru.dgb.unam.mx/handle/20.500.14330/TES01000685740>

- [12] Martínez Asencio, J. (2018). Transporte electrónico en el grafeno y la influencia del spin-órbita (Tesis doctoral). Universidad de Alicante. <https://rua.ua.es/dspace/handle/10045/74452>
- [13] Cao, Y., Fatemi, V., Fang, S., Watanabe, K., Taniguchi, T., Kaxiras, E., & Jarillo-Herrero, P. (2018). Magic-angle graphene superlattices: A new platform for unconventional superconductivity. *Nature*, 556(7699), 43–50. <https://doi.org/10.1038/nature26160>
- [14] Fisher, T. S. (2014). *Thermal energy at the nanoscale* (Vol. 3). World Scientific.
- [15] Consejo Superior de Investigaciones Científicas (CSIC). (2020, 2 de julio). Científicos del CSIC proponen una explicación a la propiedad superconductora del grafeno. <https://www.csic.es>
- [16] Bistritzer, R., & MacDonald, A. H. (2011). Moiré bands in twisted double-layer graphene. *Proceedings of the National Academy of Sciences*, 108(30), 12233–12237. <https://doi.org/10.1073/pnas.1108174108>
- [17] Thomson, A., Chatterjee, S., Sachdev, S., & Scheurer, M. S. (2018). Triangular antiferromagnetism on the honeycomb lattice of twisted bilayer graphene [Preprint]. arXiv:1806.02837v2. <https://arxiv.org/abs/1806.02837v2>
- [18] Baquero, R. (2014). La superconductividad: sus orígenes, sus teorías, sus problemas candentes hoy. *Revista de la Academia Colombiana de Ciencias Exactas, Físicas y Naturales*, 38, 18–33. <https://doi.org/10.18257/raccefyn.152>
- [19] González Álvarez, P. (2023). Estructura electrónica de materiales bidimensionales (Trabajo de fin de grado). Universidad de Oviedo. <https://hdl.handle.net/10651/69233>
- [20] Graphenano. (2017). Qué es el grafeno. <https://www.graphenano.com/wp-content/uploads/2017/11/Que-es-el-grafeno.pdf>
- [21] Andrei, E. Y., & MacDonald, A. H. (2020). Graphene bilayers with a twist [Preprint]. arXiv:2008.08129. <https://doi.org/10.48550/arXiv.2008.08129>

- [22] Koshino, M., Yuan, N. F. Q., Koretsune, T., Ochi, M., Kuroki, K., & Fu, L. (2018). Maximally-localized Wannier orbitals and the extended Hubbard model for the twisted bilayer graphene [Preprint]. arXiv:1805.06819. <https://doi.org/10.48550/arXiv.1805.06819>
- [23] Yankowitz, M., Chen, S., Polshyn, H., Zhang, Y., Watanabe, K., Taniguchi, T., Graf, D., Young, A. F., & Dean, C. R. (2019). Tuning superconductivity in twisted bilayer graphene. *Science*, 363(6431), 1059–1064. <https://doi.org/10.1126/science.aav1910>
- [24] Watson, A. B., Kong, T., MacDonald, A. H., & Luskin, M. (2022). Bistritzer–MacDonald dynamics in twisted bilayer graphene [Preprint]. arXiv:2207.13767. <https://doi.org/10.48550/arXiv.2207.13767>
- [25] Becker, S., Quinn, S., Tao, Z., Watson, A., & Yang, M. (2024). Dirac cones and magic angles in the Bistritzer–MacDonald TBG Hamiltonian [Preprint]. arXiv:2407.06316. <https://doi.org/10.48550/arXiv.2407.06316>
- [26] Becker, S., & Zworski, M. (2023). From the chiral model of TBG to the Bistritzer–MacDonald model [Preprint]. arXiv:2308.11555. <https://doi.org/10.48550/arXiv.2308.11555>
- [27] Marchenko, D., Evtushinsky, D. V., Golias, E., Varykhalov, A., Seyller, T., & Rader, O. (2018). Extremely flat band in bilayer graphene. *Science Advances*, 4(11), eaau0059. <https://doi.org/10.1126/sciadv.aau0059>
- [28] Harshman, D. R., & Fiory, A. T. (2019). High- T_C superconductivity originating from interlayer Coulomb coupling in gate-charged twisted bilayer graphene Moiré superlattices [Preprint]. arXiv:1908.01208. <https://doi.org/10.48550/arXiv.1908.01208>
- [29] Park, J. M., Cao, Y., Xia, L., Sun, S., Watanabe, K., Taniguchi, T., & Jarillo-Herrero, P. (2021). Magic-angle multilayer graphene: A robust family of moiré superconductors [Preprint]. arXiv:2112.10760. <https://doi.org/10.48550/arXiv.2112.10760>
- [30] Yang, L. (2011). Local density of states in graphene (Tesis doctoral). University of California, Riverside. <https://escholarship.org/uc/item/6q04g8bj>