

**ESTUDIO DEL TRANSPORTE ELECTRÓNICO Y DE LOS EFECTOS DE LA
QUIRALIDAD EN BICAPAS DE GRAFENO ROTADAS**

LUIS GABRIEL MESA SUÁREZ

UNIVERSIDAD INDUSTRIAL DE SANTANDER
FACULTAD DE CIENCIAS
ESCUELA DE FÍSICA
BUCARAMANGA

2026

**ESTUDIO DEL TRANSPORTE ELECTRÓNICO Y DE LOS EFECTOS DE LA
QUIRALIDAD EN BICAPAS DE GRAFENO ROTADAS**

LUIS GABRIEL MESA SUÁREZ

Trabajo de Grado para optar al título de
Magíster en Física

Director:

PH.D. CARLOS JOSÉ PÁEZ GONZÁLEZ

UNIVERSIDAD INDUSTRIAL DE SANTANDER
FACULTAD DE CIENCIAS
ESCUELA DE FÍSICA
BUCARAMANGA

2026

DEDICATORIA

A ti, madre.

A Claudia Patricia Suárez, que me dio la vida y me enseñó, a seguir adelante incluso cuando ella ya no estuviera.

No llegaste a ver este trabajo terminado, pero está hecho de lo que me diste: tu fuerza, tu ejemplo, tu amor. Cada página que escribí después de tu partida llevó tu nombre en silencio.

Esta dedicatoria es apenas una forma pequeña de decir lo que las palabras no alcanzan: que te sigo agradeciendo cada día, y que este logro, como tantos otros, es tuyo.

*Todo tiene su tiempo, y todo lo que se quiere
debajo del cielo tiene su hora.*

— Eclesiastés 3:1

AGRADECIMIENTOS

A mi madre, Claudia Patricia Suárez Rosas, quien me acompañó con su amor durante gran parte de este camino y partió antes de verlo concluido. Este trabajo lleva su huella en cada página. Gracias por haberme enseñado a no rendirme.

A mis hermanas, Carol Dayana Suárez Rosas y Nathalie Suárez Rosas, por sostenerme cuando el suelo se sintió inestable, por compartir conmigo el peso de esta pérdida y por recordarme que no estaba solo en este proceso.

A mi pareja, Doris Lissed Julio Lipez, por su paciencia, su compañía y su apoyo durante estos años. Gracias por estar en los días difíciles, y por creer en mí incluso cuando yo dudaba.

A mi director, Carlos José Páez González, por su orientación, su tiempo y su compromiso con este trabajo. Por su calidez humana durante este proceso. Su acompañamiento hizo de este camino algo no solo formativo, sino también profundamente humano. Sus aportes fueron fundamentales para que esta investigación llegara a buen puerto.

Finalmente agradezco a Dios y a todos aquellos que aportaron con grandes o pequeñas acciones a este logro.

CONTENIDO

	pág.
INTRODUCCIÓN	23
1. MARCO TEÓRICO	30
1.1. Modelo <i>tight-binding</i> para la bicapa de grafeno rotada	30
1.2. Modelo <i>tight-binding</i> en presencia de un campo magnético	33
1.3. Propiedades de transporte electrónico	33
1.4. Conductancia	35
1.4.1. Efecto de desacople (" <i>mismatch</i> ")	36
1.5. Resistencia	37
1.6. Funciones de Green	38
1.6.1. Funciones de Green de la región de dispersión	38
1.6.2. Funciones de Green del dispositivos y contactos	39
1.7. Densidad local de estados (LDOS)	40
1.8. Densidad de estados (DOS)	40
1.9. Patrones de moiré y geometría de la bicapa rotada	40
2. METODOLOGÍA	43
2.1. Construcción del sistema y selección de ángulos	43
2.2. Geometrías de contacto	44
2.2.1. Configuración de cuatro contactos:	44
2.2.2. Configuración de seis contactos:	45
2.2.3. Configuración Hall:	45
3. RESULTADOS	46

3.1. Efecto del acoplamiento en la bicapa de grafeno	46
3.2. Bicapa de grafeno rotada	47
3.3. Resistencia no local	53
3.4. Patrones de moiré y efectos del tamaño	56
3.5. Efecto de la quiralidad en la bicapa de grafeno rotada	60
3.6. Efectos del campo magnético y la quiralidad	62
3.6.1. Campo magnético <i>in-plane</i>	62
3.6.2. Campo magnético perpendicular	69
3.7. Bicapa de grafeno rotada con seis contactos	72
3.8. Configuración Hall	73
3.8.1. Resistencia transversal y longitudinal	75
3.9. Discusión de resultados	77
3.9.1. Acoplamiento intercapa y estructura electrónica de la bicapa de grafeno	77
3.9.2. Efecto del ángulo de rotación sobre la DOS y la conductancia	78
3.9.3. Resistencia y transporte no local	78
3.9.4. Efectos de la quiralidad en ausencia de campo magnético	79
3.9.5. Efectos del campo magnético externo	80
4. PUBLICACIONES Y EVENTOS	81
4.1. MATERIAL PUBLICADO Y EVENTOS	81
5. CONCLUSIONES	82
BIBLIOGRAFÍA	87
ANEXOS	93

LISTA DE FIGURAS

	pág.
Figura 1. Representación esquemática de una hélice levógira y de su imagen especular dextrógira. Ambas configuraciones forman un par quiral: una no puede transformarse en la otra mediante rotaciones propias en el espacio.	24
Figura 2. Superposición de las zonas de Brillouin de dos monocapas de grafeno rotadas un ángulo relativo α . La separación angular entre los puntos K y K' de cada capa cambia el acoplamiento entre conos de Dirac y constituye una representación en espacio recíproco de la quiralidad inducida por la torsión.	25
Figura 3. Patrón de moiré formado por la superposición de dos monocapas de grafeno con rotación relativa de 5.09° . La longitud característica estimada para este ángulo es $D \approx 2.77 \text{ nm}$, valor superior a la constante de red del grafeno, $d \approx 0.246 \text{ nm}$.	27

Figura 4. (a) Red cristalina hexagonal del grafeno con sus dos subredes A (azul) y B (naranja). Los vectores primitivos de la red se definen como $\vec{a}_1 = d(1, 0)$ y $\vec{a}_2 = d(1/2, \sqrt{3}/2)$, donde $d \approx \sqrt{3}a$ nm es la constante de red y $a = 0.142$ nm denota la distancia interatómica $C - C$. (b) Esquema de la bicapa de grafeno rotada, formada por la superposición de dos monocapas: la capa superior (azul) se rota un ángulo α respecto a la capa inferior (rojo). Las monocapas poseen dimensiones $L \times W$ nm². (c) Representación esquemática de la distancia d_{ij} entre sitios atómicos en la bicapa de grafeno rotada considerados dentro de una esfera de radio $4a$. Los sitios atómicos A y B de cada monocapa son representados con distintos colores: naranja y rojo en la capa inferior y azul y verde en la capa superior.

31

Figura 5. Representación esquemática de la configuración típica para el formalismo de Landauer-Buttiker. Dos grandes depósitos con potenciales químicos μ_p y μ_q , están conectados a través de contactos cuasi-unidimensionales a un dispositivo o región de dispersión con coeficiente de transmisión $T(E)$.

34

Figura 6. Estructura de bandas de los contactos acoplados a la región de dispersión, caracterizada por una probabilidad de transmisión T . Se asume temperatura nula, de modo que la distribución de energías de los electrones que entran en la región de dispersión es considerada entre los potenciales químicos μ_p y μ_q . Note que los momentos k están orientados en la dirección k_y según la orientación cristalográfica adoptada.

35

Figura 7. Patrones de moire para un ángulos conmensurables (a) 5.09° y (b) 20.05° , cuyas periodicidades de sus estructuras conmensurables corresponden a 2.769 nm y 0.704 nm, respectivamente.

41

Figura 8. (a) Periodicidad del patrón de moiré de la bicapa de grafeno en función del ángulo de rotación α . (b) Tiempo de computo t de la matriz de conductancia en función del ancho del sistema W , para un valor de energía. El recuadro muestra la representación logarítmica junto con el ajuste lineal $\ln(t) = 2.97 \ln(W) - 4.65$ ($R^2 = 0.9984$), confirmando un escalamiento de ley de potencia $t \propto W^\beta$ con $\beta \approx 2.97$.

45

Figura 9. (a) Bicapa de grafeno rotada con cuatro contactos selectivos por capa. Los contactos 0 y 1 se acoplan a la capa inferior, mientras que los contactos 2 y 3 se acoplan a la capa superior. (b) Esquema simplificado del dispositivo de cuatro terminales con bordes *armchair*. (c) Densidad de estados (DOS) de la bicapa sin rotación ($\alpha = 0^\circ$, apilamiento AA) calculada con distintos términos de *hopping*: primeros vecinos intracapa t_0 , segundos vecinos intracapa t_1 y acoplamiento intercapa $t_0^\perp$. (d) Representación esquemática de los acoplamientos considerados en el modelo *tight-binding*.

46

Figura 10. Densidad de estados (DOS) de la bicapa de grafeno rotada con dimensiones $W = L = 10 \text{ nm}$ para los ángulos conmensurables $\alpha = 1.2^\circ$, 4.4° , 5.09° y 9.4° . Las rotaciones se toman en sentido antihorario y la energía se muestra en el intervalo $E \in [0.65, 0.9] \text{ eV}$, alrededor del punto de neutralidad de carga desplazado.

48

Figura 11. Densidad local de estados normalizada (LDOS) de la bicapa de grafeno rotada con $W = L = 10$ nm, evaluada en $E = 0.79$ eV para (a) $\alpha = 1.2^\circ$ y (b) $\alpha = 4.4^\circ$. El tamaño de cada circunferencia representa la magnitud normalizada $\rho_i^{\text{norm}} = \rho_i / \max_i \rho_i$ dentro de cada configuración. Los sitios de la capa inferior se muestran en rojo y los de la capa superior en azul. La normalización es independiente para cada ángulo; por ello, la figura compara principalmente la distribución espacial relativa y no la magnitud absoluta de la LDOS.

50

Figura 12. Elementos independientes de la matriz de conductancia G , normalizados por $G_0 = e^2/h$, para el sistema de cuatro contactos con $W = L = 10$ nm y ángulos $\alpha = 1.2^\circ, 4.4^\circ, 5.09^\circ$ y 9.4° . Se muestra la parte triangular superior debido a la reciprocidad $G_{pq} = G_{qp}$ en ausencia de campo magnético.

51

Figura 13. Elementos independientes de la matriz de conductancia G/G_0 para $W = L = 10$ nm y ángulos intermedios $\alpha = 27.795^\circ, 30^\circ$ y 38.21° . Los ángulos 27.795° y 38.21° corresponden a configuraciones conmensurables dentro del modelo empleado, mientras que 30° representa el caso cuasicristalino o inconmensurable. En los paneles intercapa se usa una escala de 10^{-3} , lo que evidencia el carácter débil de la transmisión entre capas en este régimen.

52

Figura 14. Elementos independientes de la matriz de conductancia G/G_0 para $W = L = 10$ nm y ángulos cercanos a 60° : $\alpha = 58.8^\circ, 55.6^\circ, 54.91^\circ$ y 50.6° . La proximidad a 60° restablece parcialmente el acoplamiento intercapa debido a la vecindad geométrica con configuraciones locales tipo AB/BA.

53

- Figura 15. Comparación de elementos representativos de la conductancia para pares de ángulos relacionados por proximidad a 0° y 60° : (fila superior) $\alpha = 1.2^\circ$ y 58.8° ; (fila inferior) $\alpha = 4.4^\circ$ y 55.6° . El término G_{01} corresponde a transporte intracapa en la capa inferior, mientras que G_{02} y G_{03} corresponden a canales intercapa. 54
- Figura 16. Resistencia no local de cuatro terminales $R_{01,23}$ en función de la energía para $W = L = 10$ nm. Se muestran ángulos cercanos a (a) 0° , $\alpha = 1.2^\circ$, 4.4° y 9.4° , y (b) 60° , $\alpha = 58.8^\circ$, 55.6° y 50.6° . La resistencia se expresa en unidades de h/e^2 . 55
- Figura 17. Densidad de estados de la bicapa de grafeno rotada con dimensiones $W = L = 30$ nm para los ángulos conmensurables $\alpha = 1.2^\circ$ y 4.4° . La energía se muestra en el mismo intervalo empleado para el sistema de 10 nm. 56
- Figura 18. LDOS normalizada ρ_i^{norm} para una bicapa de grafeno rotada de dimensiones $W = L = 30$ nm, evaluada en $E = 0.79$ eV para (a) $\alpha = 1.2^\circ$ y (b) $\alpha = 4.4^\circ$. Los puntos azules y rojos corresponden a las capas inferior y superior, respectivamente; el tamaño de los puntos representa la LDOS normalizada dentro de cada panel. 57
- Figura 19. Comparación de los elementos independientes de la matriz de conductancia G/G_0 para $\alpha = 1.2^\circ$ y $\alpha = 58.8^\circ$ en una bicapa de grafeno rotada con dimensiones $W = L = 30$ nm. 58
- Figura 20. (a) Resistencia no local $R_{01,23}$ en función de la energía para una bicapa con $W = L = 30$ nm y ángulos $\alpha = 1.2^\circ$ y 58.8° . (b)–(d) Resistencia $R_{01,23}$ evaluada en $E = 0.79$ eV como función del ángulo de rotación para sistemas de dimensiones (b) $W = L = 30$ nm, (c) $W = L = 15$ nm y (d) $W = L = 10$ nm. Los valores angulares y las posiciones de máximos se interpretan como estimaciones obtenidas a partir de las gráficas. 59

- Figura 21. Comparación de los elementos independientes de la matriz de conductancia G/G_0 para los ángulos de rotación opuestos $\alpha = 1.2^\circ$ y $\alpha = -1.2^\circ$ en el sistema de $W = L = 30$ nm. Las curvas rojas continuas corresponden a $\alpha = 1.2^\circ$ y las curvas azules discontinuas a $\alpha = -1.2^\circ$. 60
- Figura 22. Comparación de las resistencias (a) $R_{01,23}$, (b) $R_{01,01}$, (c) $R_{02,13}$ y (d) $R_{03,03}$ para los ángulos $\alpha = 1.2^\circ$ (línea continua roja) y $\alpha = -1.2^\circ$ (línea discontinua azul), en función de la energía $E \in [0.65, 0.9]$ eV. 62
- Figura 23. Esquema de la bicapa de grafeno rotada bajo un campo magnético externo *in-plane* $\mathbf{B} = B\hat{y}$. Las flechas negras indican la dirección del campo aplicado en la región de dispersión. Los contactos se mantienen como electrodos ideales sin campo magnético externo. 63
- Figura 24. Densidad de estados (DOS) de la bicapa de grafeno rotada bajo campo magnético externo *in-plane* para $B = 0, 10$ y 20 T: (a) $\alpha = 1.2^\circ$ y (b) $\alpha = 4.4^\circ$. La DOS se evalúa en el intervalo energético $E \in [0.65, 0.9]$ eV, alrededor del CNP (≈ 0.8 eV). En ambos casos se considera un sistema de $30 \text{ nm} \times 30 \text{ nm}$ con contactos ideales semi-infinitos de borde *armchair*. 64
- Figura 25. Elementos de la parte triangular superior de la matriz de conductancia para la bicapa de grafeno rotada bajo un campo magnético *in-plane* uniforme $B = 20$ T. Se comparan dos configuraciones de quiralidad opuesta: $\alpha = 1.2^\circ$ (curvas sólidas) y $\alpha = -1.2^\circ$ (curvas discontinuas). El campo se aplica únicamente en la región de dispersión, como se indica en la figura 23, y se introduce mediante la fase de Peierls. 65

Figura 26. (a) Resistencia no local $R_{01,23}$, (b) resistencia local $R_{01,01}$, (c) resistencia cruzada $R_{02,13}$ y (d) resistencia de transferencia intercapa $R_{03,03}$ para $\alpha = 1.2^\circ$ (curva continua roja) y $\alpha = -1.2^\circ$ (curva discontinua azul), en función de la energía $E \in [0.65, 0.9]$ eV. Las resistencias se evalúan bajo un campo magnético *in-plane* uniforme de magnitud 20 T, con $\mathbf{B} \parallel \hat{y}$. 67

Figura 27. (a) Resistencia cruzada no local $R_{02,13}$ en función del campo magnético *in-plane* para una bicapa de grafeno rotada con $\alpha = \pm 1.2^\circ$, evaluada en $E = 0.79$ eV. La curva roja corresponde a $\alpha = 1.2^\circ$ y la curva azul a $\alpha = -1.2^\circ$. La línea discontinua negra representa el ajuste lineal en el intervalo $B \in [-5, 5]$ T. (b) Descomposición de $R_{02,13}$ en componentes par e impar respecto al campo magnético. La curva azul muestra $R^{\text{par}}(B)$ y la curva naranja $R^{\text{impar}}(B)$. La línea punteada corresponde al ajuste lineal de la componente impar en el intervalo $B \in [-10, 10]$ T. 68

Figura 28. (a) Esquema de la bicapa de grafeno rotada bajo campo magnético perpendicular $\mathbf{B} = B\hat{z}$. Las flechas negras indican la dirección del campo aplicado en la región de dispersión, mientras que los contactos permanecen ideales y libres de campo. (b) DOS de una bicapa de grafeno rotada con $W = L = 30$ nm y $\alpha = 1.2^\circ$, calculada para $B = 0, 10$ y 20 T. 69

Figura 29. Elementos de la parte triangular superior de la matriz de conductancia para la bicapa de grafeno rotada bajo campo magnético perpendicular uniforme $B = 20$ T. Se comparan $\alpha = 1.2^\circ$ (curvas sólidas) y $\alpha = -1.2^\circ$ (curvas discontinuas). El campo se aplica únicamente en la región de dispersión, como se indica en la figura 28(a), y se introduce mediante fase de Peierls. 70

- Figura 30. (a) Resistencia no local $R_{01,23}$ y (b) resistencia local $R_{01,01}$ para $\alpha = 1.2^\circ$ (curva continua roja) y $\alpha = -1.2^\circ$ (curva discontinua azul), en función de la energía $E \in [0.65, 0.9]$ eV. Las resistencias se evalúan bajo un campo magnético perpendicular uniforme de magnitud 20 T. 71
- Figura 31. Esquema de la bicapa de grafeno rotada con seis contactos. Los contactos adicionales 4 y 5 consisten en redes de grafeno ideal, con acoplamiento de primeros vecinos t_0 y ancho $L = 30$ nm. 72
- Figura 32. Elementos seleccionados de la matriz de conductancia en función de la energía $E \in [0.65, 0.9]$ eV para la bicapa de grafeno rotada con seis contactos. Se comparan las configuraciones $\alpha = 1.2^\circ$ y $\alpha = -1.2^\circ$ en ausencia de campo magnético externo. 73
- Figura 33. (a) Resistencia no local $R_{01,23}$ y (b) resistencia $R_{01,45}$ en función de la energía $E \in [0.65, 0.9]$ eV para la bicapa de grafeno rotada con seis contactos. Se comparan $\alpha = 1.2^\circ$ (curva continua roja) y $\alpha = -1.2^\circ$ (curva discontinua azul). 74
- Figura 34. Geometría tipo Hall de la bicapa de grafeno rotada. Los cuatro contactos se acoplan a la capa inferior: los contactos 0 y 1 tienen bordes *armchair*, mientras que los contactos 2 y 3 tienen bordes *zigzag*. Los bordes *zigzag* de la capa superior se dopan con energías de sitio $U_i = 1000$ eV para desplazar los estados de borde fuera de la ventana energética de interés. 74
- Figura 35. Comparación de los elementos de la parte triangular superior de la matriz de conductancia G en función de la energía $E \in [0.65, 0.9]$ eV para la geometría Hall de la figura 34, con campo magnético nulo ($B = 0$ T). Se muestran los resultados para $\alpha = 1.2^\circ$ y $\alpha = -1.2^\circ$. 75

- Figura 36. (a) Resistencia transversal $R_{01,23}$ y (b) resistencia longitudinal $R_{01,01}$ en función de la energía $E \in [0.65, 0.9]$ eV para la bicapa de grafeno rotada con cuatro contactos acoplados a la capa inferior. Se comparan $\alpha = 1.2^\circ$ y $\alpha = -1.2^\circ$ en la geometría Hall de la figura 34. 76
- Figura 37. Descomposición par e impar de (a) la resistencia transversal $R_{01,23}$ y (b) la resistencia longitudinal $R_{01,01}$ en función de la energía $E \in [0.65, 0.9]$ eV para una bicapa de grafeno rotada con $\alpha = \pm 1.2^\circ$ en geometría Hall. La curva azul muestra la componente par $R^{\text{par}}(E)$ y la curva naranja la componente impar $R^{\text{impar}}(E)$. 77
- Figura 38. Elementos de la matriz de conductancia en función de la energía $E \in [0.65, 0.9]$ eV, para la bicapa de grafeno con ángulo de rotación $\alpha = 1.2^\circ$, de dimensiones $W = L = 30$ nm, con cuatro contactos cuya terminación cristalográfica es armchair (véase la figura 9(b)), en ausencia de campo magnético. Se cumple la relación simétrica de reciprocidad $G_{pq}(\alpha) = G_{qp}(\alpha)$ en ausencia de campo magnético. 94
- Figura 39. Elementos de la matriz de conductancia en función de la energía $E \in [0.65, 0.9]$ eV, para la bicapa de grafeno con ángulo de rotación $\alpha = 1.2^\circ$, de dimensiones $W = L = 30$ nm, con configuración Hall (véase la figura 34), en ausencia de campo magnético. Se cumple la relación simétrica de reciprocidad $G_{pq}(\alpha) = G_{qp}(\alpha)$ en ausencia de campo magnético. 95
- Figura 40. Elementos de la matriz de conductancia en función de la energía $E \in [0.65, 0.9]$ eV, para la bicapa de grafeno con ángulo de rotación $\alpha = 1.2^\circ$, de dimensiones $W = L = 30$ nm, con seis contactos (véase la figura 31), en ausencia de campo magnético. Se cumple la relación simétrica de reciprocidad $G_{pq}(\alpha) = G_{qp}(\alpha)$ en ausencia de campo magnético. 96

Figura 41. Elementos de la matriz de conductancia en función de la energía $E \in [0.65, 0.9]$ eV, para la bicapa de grafeno con ángulo de rotación $\alpha = 1.2^\circ$, de dimensiones $W = L = 30$ nm, con cuatro contactos (véase la figura 9(b)), en presencia de un campo magnético *in-plane* de magnitud $B = 20$ T. Se cumple la relación simétrica de reciprocidad $G_{pq}(\alpha, B) = G_{qp}(\alpha, -B)$.

97

Figura 42. Relación de reciprocidad $R_{pq,kl}(B) = R_{kl,pq}(-B)$ para la bicapa de grafeno rotada con contactos armchair bajo un campo magnético *in-plane* uniforme B . Los resultados se muestran para el ángulo de rotación $\alpha = 1.2^\circ$ bajo la acción de un campo magnético orientado en diferentes direcciones $\mathbf{B} = 20\hat{y}$ y $-20\hat{y}$.

98

Figura 43. Esquema del dispositivo considerado para el cálculo de transporte en estructuras cuasi-cristalinas. Una bicapa de grafeno rotada, donde la capa inferior tiene dimensiones aproximadas de $\sim 20 \times 20$ nm², mientras que la capa superior tiene dimensiones de $\sim 14 \times 14$ nm². Se conectan dos contactos metálicos ideales, etiquetados como 0 y 1, acoplados en los bordes inferior y superior, respectivamente. Los contactos se modelan como electrodos de grafeno semi-infinitos, mientras que la región central corresponde a la bicapa rotada. Los colores distinguen los átomos pertenecientes a cada capa, y la numeración indica la asignación de los contactos utilizados para la inyección y recolección de corriente. La energía de sitio asignada a los bordes zigzag de la capa superior (puntos negros) es $U_i = 1000$ eV.

99

Figura 44. (Panel superior) Conductancia normalizada G/G_0 en función de la energía para una bicapa de grafeno rotada con un ángulo inconmensurable $\alpha = 30^\circ$ (línea azul) y un ángulo conmensurable cercano $\alpha = 27.796^\circ$ (línea roja). (Panel inferior) Densidad de estados total $DOS(E)$ correspondiente a las mismas configuraciones angulares. Las líneas verticales discontinuas indican energías seleccionadas donde la DOS presenta picos pronunciados. La DOS fue reducida en un factor de 10^3 para efectos de visualización.

101

Figura 45. LDOS (ρ_i^{norm}) calculados para la energía $E = -0.727$ eV, correspondiente a uno de los picos más pronunciados en la DOS total. (a) Ángulo inconmensurable $\alpha = 30^\circ$. (b) Ángulo conmensurable $\alpha = 27.976^\circ$. El tamaño e intensidad de los marcadores es proporcional a la LDOS, y los colores distinguen la contribución de cada capa. Los mapas se muestran sobre la geometría real del sistema.

102

Figura 46. Panel superior: densidad de estados (DOS) de la bicapa de grafeno con apilamiento AA ($W = L = 30$ nm, $t = 2.7$ eV, $t_\perp = 0.48$ eV) calculada mediante el método KPM. La línea vertical punteada indica el punto de neutralidad de carga $E_{\text{CNP}} = 0.79$ eV. Panel inferior: DOS integrada acumulada $N(E)$ normalizada; la intersección con $N = 0.5$ (línea horizontal punteada) determina el CNP.

103

LISTA DE TABLAS

	pág.
Tabla 1. Ángulos de rotación conmensurables estudiados, con sus índices (n, m) y periodicidad de moiré D . El ángulo 30° corresponde a un ángulo inconmensurable, es decir, no posee periodicidad.	44

ANEXOS

	pág.
Anexo A. RELACIONES DE RECIPROCIDAD	93
Anexo B. ÁNGULOS INCONMENSURABLES	97
Anexo C. PUNTO DE NEUTRALIDAD DE CARGA	102

RESUMEN

TÍTULO: ESTUDIO DEL TRANSPORTE ELECTRÓNICO Y QUIRALIDAD EN BICAPAS DE GRAFENO ROTADAS *

AUTOR: LUIS GABRIEL MESA SUÁREZ **

PALABRAS CLAVE: BICAPA DE GRAFENO ROTADA, QUIRALIDAD, CONDUCTANCIA, DENSIDAD DE ESTADOS.

DESCRIPCIÓN:

En el presente trabajo se estudia el transporte electrónico en bicapas de grafeno rotadas, con énfasis en los efectos de quiralidad geométrica inducidos por la rotación relativa entre capas. El análisis se desarrolla dentro del formalismo de Landauer-Büttiker en el régimen lineal de transporte, implementado numéricamente mediante Kwant, empleando un modelo tight-binding parametrizado con acoplamientos tipo Slater-Koster dependientes de la distancia. La quiralidad emerge al considerar configuraciones con ángulos de rotación opuestos, $+\alpha$ y $-\alpha$, que constituyen enantiómeros electrónicos no equivalentes bajo rotaciones propias. En ausencia de campo magnético externo se analizan la densidad de estados (DOS), la densidad local de estados (LDOS), la matriz de conductancia y distintas resistencias de cuatro terminales para una amplia gama de ángulos, desde valores cercanos al primer ángulo mágico hasta ángulos próximos a 60° , incluyendo el caso cuasicristalino en torno a 30° . En este régimen se verifica el cumplimiento de las relaciones de Onsager-Casimir y de las simetrías de la matriz de conductancia, sin que ello implique respuesta no recíproca. Posteriormente, se introduce como configuración principal un campo magnético externo en el plano de la bicapa, incorporado mediante la sustitución de Peierls en la región de dispersión; complementariamente, se analiza un campo perpendicular, que reorganiza la DOS y modifica la conductancia. Bajo campo in-plane, se observan respuestas no recíprocas multiterminal; en particular, la resistencia cruzada no local $R_{02,13}$ presenta una contribución impar lineal en el campo, asociada a efectos magnetoquirales. Además, se estudian configuraciones con seis contactos y geometría tipo Hall, donde los contactos armchair y zigzag se acoplan a la capa inferior y los estados de borde superiores se suprimen mediante una energía de sitio grande. Allí, la resistencia transversal $R_{01,23}$ resulta predominantemente impar bajo $\alpha \rightarrow -\alpha$, mientras que la longitudinal $R_{01,01}$ es esencialmente par. Los resultados muestran que la quiralidad y el acoplamiento intercapa persisten incluso en ángulos grandes, tradicionalmente considerados electrónicamente triviales.

* Tesis de maestría

** Facultad de Ciencias. Escuela de Física. Maestría en Física. Director: Carlos José Páez González. Doctor en Física.

ABSTRACT

TITLE: STUDY OF ELECTRONIC TRANSPORT AND CHIRALITY IN TWISTED BILAYER GRAPHENE *

AUTHOR: LUIS GABRIEL MESA SUÁREZ **

KEYWORDS: TWISTED BILAYER GRAPHENE, CHIRALITY, CONDUCTANCE, DENSITY OF STATES.

DESCRIPTION:

This work studies electronic transport in twisted graphene bilayers, with emphasis on the geometric chirality effects induced by the relative rotation between layers. The analysis is developed within the Landauer-Büttiker formalism in the linear transport regime, implemented numerically using Kwant, employing a tight-binding model parametrized with distance-dependent Slater-Koster couplings. Chirality emerges when considering configurations with opposite rotation angles, $+\alpha$ and $-\alpha$, which constitute electronic enantiomers that are not equivalent under proper rotations. In the absence of an external magnetic field, the density of states (DOS), the local density of states (LDOS), the conductance matrix, and various four-terminal resistances are analyzed for a wide range of angles, from values near the first magic angle to angles close to 60° , including the quasicrystalline case around 30° . In this regime, compliance with the Onsager-Casimir reciprocity relations and the symmetries of the conductance matrix is verified, without this implying a non-reciprocal response. Subsequently, an in-plane external magnetic field applied to the bilayer is introduced as the main configuration, incorporated through the Peierls substitution in the scattering region; complementarily, a perpendicular field is also analyzed, which reorganizes the DOS and modifies the conductance elements. Under an in-plane field, non-reciprocal responses are observed in multiterminal transport; in particular, the nonlocal cross resistance $R_{02,13}$ exhibits a linear odd contribution in the magnetic field, associated with magnetochiral effects. In addition, six-contact configurations with a Hall-bar-type geometry are studied, in which armchair and zigzag contacts are coupled to the bottom layer and the edge states of the top layer are suppressed via a large on-site energy. In this geometry, the transverse resistance $R_{01,23}$ is predominantly odd under $\alpha \rightarrow -\alpha$, while the longitudinal resistance $R_{01,01}$ is essentially even. The results show that chirality effects and interlayer coupling persist even in the large-angle regime, traditionally considered electronically trivial.

* Master's thesis

** FFaculty of Sciences. School of Physics. Master of Science in Physics. Thesis Supervisor: Carlos José Páez González, Ph.D. in Physics.

INTRODUCCIÓN

La quiralidad es una propiedad geométrica mediante la cual un objeto no puede superponerse con su imagen especular por medio de rotaciones propias. Esta idea aparece de forma intuitiva en las manos humanas y en las hélices biológicas, pero también resulta central para describir estructuras cristalinas sin simetría especular ni centro de inversión¹. En física de la materia condensada, la quiralidad deja de ser solo una característica morfológica: puede modificar la estructura electrónica, seleccionar canales de propagación y producir respuestas de transporte dependientes del enantiómero. La figura 1 ilustra esta noción mediante dos hélices relacionadas por reflexión, que representan configuraciones levógiras y dextrógiras no superponibles. En sistemas electrónicos, la quiralidad puede manifestarse tanto en el espacio real como en el espacio recíproco. En el primero, se asocia con estructuras que carecen de operaciones impropias de simetría; en el segundo, se relaciona con la textura de bandas, la orientación de los valles, el pseudospín, el espín y la curvatura geométrica de los estados de Bloch²³. Esta conexión aparece en aislantes topológicos, semimetales de Weyl y materiales con acoplamiento espín-órbita, donde la estructura interna de los estados electrónicos condiciona la propagación de corrientes de borde o de superficie⁴⁵. En transporte mesoscópico, las relaciones de Onsager-Casimir imponen restricciones de reciprocidad que deben cumplirse al invertir el

¹ BARRON, Laurence D. Chirality and life. En: Space Science Reviews. 2008. Vol. 135, No. 1. p. 187-201.

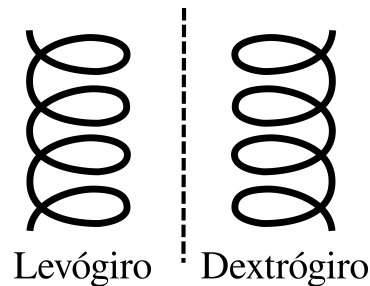
² YAN, Binghai. Structural Chirality and Electronic Chirality in Quantum Materials. En: Annual Review of Materials Research. 2024. Vol. 54, No. Volume 54, 2024. p. 97-115. DOI: <https://doi.org/10.1146/annurev-matsci-080222-033548>.

³ WANG, Jing y ZHANG, Shou-Cheng. Topological states of condensed matter. En: Nature materials. 2017. Vol. 16, No. 11. p. 1062-1067.

⁴ YANG, See-Hun et al. Chiral spintronics. En: Nature Reviews Physics. 2021. Vol. 3, No. 5. p. 328-343. DOI: 10.1038/s42254-021-00302-9.

⁵ FELSER, C. y GOOTH, J. Topology and Chirality. En: *Chiral Matter*. World Scientific, 2023. p. 115-141. DOI: 10.1142/9789811265068_0010. eprint: https://www.worldscientific.com/doi/pdf/10.1142/9789811265068_0010.

Figura 1. Representación esquemática de una hélice levógira y de su imagen especular dextrógira. Ambas configuraciones forman un par quiral: una no puede transformarse en la otra mediante rotaciones propias en el espacio.



campo magnético junto con la dirección microscópica del proceso⁶⁷. Por ello, las señales quirales bajo campos externos no deben interpretarse como una violación de la reciprocidad, sino como respuestas compatibles con ella cuando se comparan configuraciones relacionadas por inversión de campo y de quiralidad. La figura 2 anticipa esta idea en la bicapa de grafeno rotada: la rotación relativa separa los puntos K y K' de las dos capas, modificando las condiciones de acoplamiento entre valles y canales de transporte.

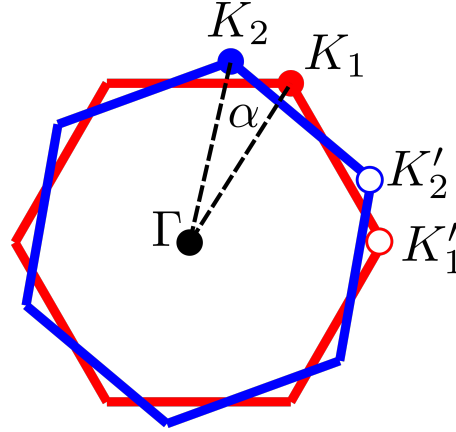
El grafeno monocapa introdujo un escenario excepcional para estudiar electrones en dos dimensiones, debido a su red hexagonal, sus bandas π y π^* , la dispersión aproximadamente lineal cerca de los puntos de Dirac y la alta movilidad de sus portadores⁸. A partir de este material se desarrollaron heteroestructuras de van der Waals en las que dos monocapas pueden apilarse con un ángulo relativo controlado. La bicapa de grafeno rotada, o TBG por sus siglas en inglés (*twisted bilayer*

⁶ ONSAGER, Lars. Reciprocal Relations in Irreversible Processes. I. En: Phys. Rev. 1931. Vol. 37. p. 405-426. DOI: 10.1103/PhysRev.37.405.

⁷ CASIMIR, H. B. G. On Onsager's Principle of Microscopic Reversibility. En: Rev. Mod. Phys. 1945. Vol. 17. p. 343-350. DOI: 10.1103/RevModPhys.17.343.

⁸ CASTRO NETO, A. H. et al. The electronic properties of graphene. En: Rev. Mod. Phys. 2009. Vol. 81. p. 109-162. DOI: 10.1103/RevModPhys.81.109.

Figura 2. Superposición de las zonas de Brillouin de dos monocapas de grafeno rotadas un ángulo relativo α . La separación angular entre los puntos K y K' de cada capa cambia el acoplamiento entre conos de Dirac y constituye una representación en espacio recíproco de la quiralidad inducida por la torsión.



graphene), se convirtió así en un sistema modelo de la twistrónica⁹¹⁰. Al rotar una capa respecto de la otra, sus redes recíprocas también se rotan y los conos de Dirac dejan de coincidir¹¹. Cerca del primer ángulo mágico, el modelo de Bistritzer y MacDonald predice bandas casi planas que reducen la energía cinética efectiva de los portadores¹². Este régimen permitió observar superconductividad no convencional y estados aislantes correlacionados en bicapas de grafeno de ángulo mágico¹³, mientras que la visualización experimental de bandas planas mediante ARPES pro-

⁹ IDEUE, Toshiya e IWASA, Yoshihiro. Symmetry Breaking and Nonlinear Electric Transport in van der Waals Nanostructures. En: Annual Review of Condensed Matter Physics. 2021. Vol. 12, No. Volume 12. p. 201-223. DOI: <https://doi.org/10.1146/annurev-conmatphys-060220-100347>.

¹⁰ YANANOSE, Kunihiro et al. Chirality-induced spin texture switching in twisted bilayer graphene. En: Phys. Rev. B. 2021. Vol. 104. p. 075407. DOI: 10.1103/PhysRevB.104.075407.

¹¹ ANDREI, Eva Y y MACDONALD, Allan H. Graphene bilayers with a twist. En: Nature materials. 2020. Vol. 19, No. 12. p. 1265-1275.

¹² BISTRITZER, Rafi y MACDONALD, Allan H. Moiré bands in twisted double-layer graphene. En: Proceedings of the National Academy of Sciences of the United States of America. 2011. Vol. 108, No. 30. p. 12233-12237.

¹³ CAO, Yuan et al. Correlated insulator behaviour at half-filling in magic-angle graphene superlattices. En: Nature. 2018. Vol. 556, No. 7699. p. 80-84. DOI: 10.1038/nature26154.

porciona una confirmación directa de la reconstrucción espectral inducida por la torsión¹⁴.

La fenomenología de la TBG no se agota en el régimen del ángulo mágico. En grafeno marginalmente rotado se han observado oscilaciones tipo Aharonov–Bohm asociadas con redes triangulares de estados unidimensionales¹⁵, y también se han reportado estados helicoidales protegidos topológicamente en bicapas con torsiones mínimas¹⁶. Estos antecedentes consolidaron la twistrónica como una estrategia para modificar propiedades electrónicas mediante el ángulo de rotación, de forma análoga al uso de campos externos, dopaje o presión¹⁷. La figura 3 muestra el patrón de moiré correspondiente a una rotación de 5.09° . Para este ángulo, la longitud característica estimada con $D = d/[2 \sin(\alpha/2)]$ es $D \approx 2.77$ nm, usando $d \approx 0.246$ nm como constante de red del grafeno. Esta escala, mucho mayor que la distancia carbono–carbono, explica por qué la torsión genera una modulación espacial capaz de reorganizar la densidad de estados y las amplitudes de transmisión.

Desde el punto de vista geométrico, los ángulos de rotación pueden clasificarse como conmensurables o inconmensurables. Los primeros admiten una supercelda periódica de moiré y permiten aplicar herramientas de teoría de bandas basadas en periodicidad cristalina. Los segundos carecen de una supercelda traslacional finita y pueden generar orden cuasiperiódico. El caso $\alpha = 30^\circ$ es especialmente relevante porque corresponde a una configuración cuasicristalina con simetría dodecagonal efectiva¹⁸. En esta tesis se consideran tanto ángulos pequeños como ángulos gran-

¹⁴ UTAMA, M. Iqbal Bakti et al. Visualization of the flat electronic band in twisted bilayer graphene near the magic angle twist. eng. En: Nature physics. London. 2021. Vol. 17, No. 2. p. 184-188.

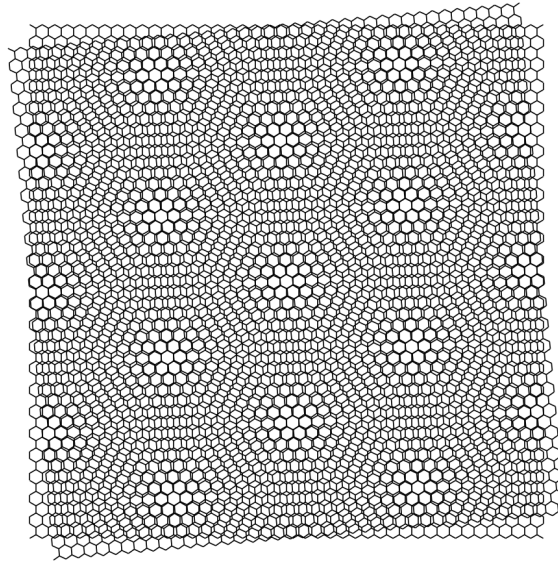
¹⁵ XU, S. G. et al. Giant oscillations in a triangular network of one-dimensional states in marginally twisted graphene. En: Nature Communications. 2019. Vol. 10, No. 1. DOI: 10.1038/s41467-019-11971-7.

¹⁶ HUANG, Shengqiang et al. Topologically Protected Helical States in Minimally Twisted Bilayer Graphene. En: Physical Review Letters. 2018. Vol. 121, No. 3. DOI: 10.1103/physrevlett.121.037702.

¹⁷ REN, Ya-Ning et al. Twistronics in graphene-based van der Waals structures. En: Chinese Physics B. 2020. Vol. 29, No. 11. p. 117303. DOI: 10.1088/1674-1056/abbbe2.

¹⁸ MOON, Pilkyung, KOSHINO, Mikito y SON, Young-Woo. Quasicrystalline electronic states in 30° rotated twisted bilayer graphene. En: Phys. Rev. B. 2019. Vol. 99. p. 165430. DOI: 10.1103/

Figura 3. Patrón de moiré formado por la superposición de dos monocapas de grafeno con rotación relativa de 5.09° . La longitud característica estimada para este ángulo es $D \approx 2.77$ nm, valor superior a la constante de red del grafeno, $d \approx 0.246$ nm.



des cercanos a 60° , además del régimen cuasicristalino, con el propósito de evaluar si el acoplamiento intercapa y las señales quirales persisten más allá del entorno del ángulo mágico. Esta pregunta es pertinente porque estudios recientes han mostrado que los ángulos grandes, antes tratados como casi triviales, pueden conservar efectos no despreciables de hibridación, topología o transporte¹⁹²⁰.

La quiralidad de la TBG surge al comparar las configuraciones $+\alpha$ y $-\alpha$. Estas dos estructuras son imágenes especulares: si la geometría de contactos se mantiene

PhysRevB.99.165430.

¹⁹ SANJUAN CIEPIELEWSKI, Aleksander et al. Transport signatures of Van Hove singularities in mesoscopic twisted bilayer graphene. En: Phys. Rev. Res. 2022. Vol. 4. p. 043145. DOI: 10.1103/PhysRevResearch.4.043145.

²⁰ ZHANG, Shuai et al. Abnormal conductivity in low-angle twisted bilayer graphene. En: Science Advances. 2020. Vol. 6, No. 47. p. eabc5555. DOI: 10.1126/sciadv.abc5555. eprint: <https://www.science.org/doi/pdf/10.1126/sciadv.abc5555>.

fija, una no se transforma en la otra mediante una rotación propia. Por esta razón pueden tratarse como enantiómeros electrónicos. En ausencia de campo magnético, las relaciones de reciprocidad restringen fuertemente la respuesta multiterminal; sin embargo, la comparación de elementos de conductancia y de resistencias no locales permite detectar qué canales son sensibles al signo de la torsión. El antecedente directo más cercano a esta tesis es el trabajo de Bahamon *et al.*, donde se propuso una sonda de quiralidad en TBG dentro del régimen lineal de transporte²¹. En el presente trabajo, el campo magnético *in-plane* se incorpora como perturbación orbital mediante la sustitución de Peierls en los acoplamientos intercapa. Debido a la separación finita entre capas, este campo rompe la inversión temporal efectiva sin introducir un término de Zeeman. La resistencia cruzada no local $R_{02,13}$ resulta entonces una magnitud particularmente sensible a la respuesta magnetoquiral, mientras que la configuración tipo Hall permite analizar una resistencia transversal impar bajo la transformación $\alpha \rightarrow -\alpha$ ^{22,23,24}.

El objetivo principal de esta tesis es estudiar el transporte electrónico y los efectos de quiralidad en bicapas de grafeno rotadas mediante un modelo *tight-binding* realista, con acoplamientos tipo Slater–Koster dependientes de la distancia, y el formalismo multiterminal de Landauer–Büttiker. Para ello se calcula la densidad de estados (DOS), densidad local de estados (LDOS), matrices de conductancia y resistencias de cuatro terminales mediante las funciones de Green. El análisis se centra en la resistencia no local $R_{01,23}$ como sonda del acoplamiento intercapa, en la resistencia cruzada $R_{02,13}$ como indicador de sensibilidad magnetoquiral, y en la comparación

²¹ BAHAMON, Dario A. et al. Chirality Probe of Twisted Bilayer Graphene in the Linear Transport Regime. En: Nano Letters. 2024. Vol. 24, No. 15. PMID: 38584591. p. 4478-4484. DOI: 10.1021/acs.nanolett.4c00371. eprint: <https://doi.org/10.1021/acs.nanolett.4c00371>.

²² LIU, Yizhou, HOLDER, Tobias y YAN, Binghai. Chirality-Induced Giant Unidirectional Magnetoresistance in Twisted Bilayer Graphene. En: The Innovation. 2021. Vol. 2, No. 1. p. 100085. DOI: 10.1016/j.xinn.2021.100085.

²³ HE, Wen-Yu et al. Creating in-plane pseudomagnetic fields in excess of 1000 T by misoriented stacking in a graphene bilayer. En: Phys. Rev. B. 2014. Vol. 89. p. 125418. DOI: 10.1103/PhysRevB.89.125418.

²⁴ PERSHOGUBA, Sergey S. y YAKOVENKO, Victor M. Energy spectrum of graphene multilayers in a parallel magnetic field. En: Phys. Rev. B. 2010. Vol. 82. p. 205408. DOI: 10.1103/PhysRevB.82.205408.

de respuestas para $+\alpha$ y $-\alpha$ bajo campos magnéticos *in-plane* y perpendiculares. También se examinan configuraciones con cuatro contactos por capa, seis contactos y geometría tipo Hall, con especial atención a la persistencia de efectos quirales en ángulos grandes. La implementación numérica se organiza en el marco de Hamiltonianos de red y transporte cuántico compatible con Kwant²⁵.

El documento se organiza de la siguiente manera. El capítulo de marco teórico presenta el modelo *tight-binding* de la TBG, la sustitución de Peierls, el formalismo de Landauer–Büttiker, las funciones de Green, la DOS, la LDOS y la geometría de los patrones de moiré. El capítulo de metodología describe la construcción del sistema, la selección de ángulos de rotación, las configuraciones de contactos y los criterios numéricos usados en los cálculos. El capítulo de resultados analiza la DOS y la LDOS para diferentes ángulos, la matriz de conductancia, las resistencias no locales, los efectos del tamaño finito, la quiralidad en ausencia y presencia de campo magnético, la configuración de seis contactos y la geometría tipo Hall. Finalmente, las conclusiones sintetizan los resultados principales y delimitan el alcance físico del modelo empleado.

²⁵ BOWERS, K J, ALBRIGHT, J y YIN, L. Kwant: a software package for quantum transport. En: 2014. DOI: 10.1088/1367-2630/16/6/063065.

1. MARCO TEÓRICO

1.1. Modelo *tight-binding* para la bicapa de grafeno rotada

Para este trabajo se consideran dos monocapas de grafeno de dimensiones $W \times L$ nm². Cada capa es modelada, con dos vectores de red primitivos $\vec{a}_1 = d(1, 0)$ nm y $\vec{a}_2 = d(1/2, \sqrt{3}/2)$ nm, donde $d \approx \sqrt{3}a$ nm corresponde a la constante de red y $a = 0.142$ nm la distancia entre los átomos (véase la figura 4(a)). Las monocapas se encuentran apiladas verticalmente, a una distancia $z_0 = 0.335$ nm y acopladas entre si. La capa superior es rotada un ángulo α respecto a la capa inferior sin relación, como se muestra en la figura 4(b). Cuando el ángulo de rotación α es cero, el apilamiento es tipo AA (átomo A sobre átomo A), mientras que para $\alpha = 60^\circ$ el apilamiento es AB (átomo A sobre átomo B). El sistema es modelado mediante la aproximación *tight-binding* (TB), también denominada combinación lineal de orbitales atómicos (LCAO, por sus siglas en inglés).

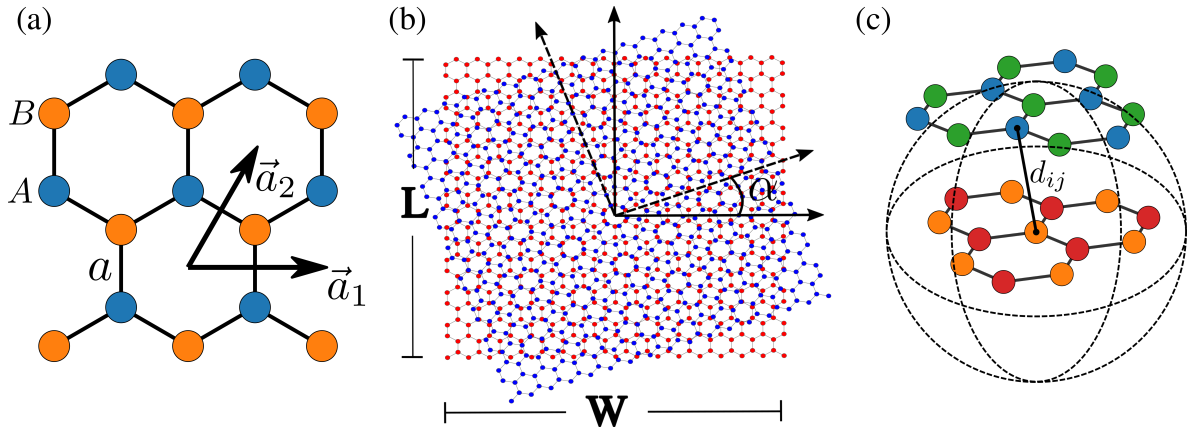
La aproximación TB es un método heurístico ampliamente usado en física de la materia condensada para determinar la estructura de bandas y estudiar las propiedades electrónicas de un sólido. Este método consiste en aproximar la función de onda electrónica como una superposición de funciones de onda atómica, ortogonales entre sí y localizadas sobre cada sitio. De este modo, se ignora la interacción explícita electrón-electrón y efectos de muchos cuerpos. Esta propuesta, permite describir las propiedades electrónicas y de localización del sistema (p.ej. conductancia y densidad local de estados), además permite extenderse fácilmente para sistemas apilados con un número de capas finito.

La TBG se describe mediante el hamiltoniano *tight-binding* propuesto por Lewenkopf y Mucciolo²⁶, el cual puede expresarse como

$$H_{TBG} = \sum_i \varepsilon_i |i\rangle \langle i| - \sum_{i \neq j} (t_{ij} |i\rangle \langle j| + H.c), \quad (1)$$

²⁶ LEWENKOPF, Caio H. y MUCCILOLO, Eduardo R. The recursive Green's function method for graphene. En: Journal of Computational Electronics. 2013. Vol. 12, No. 2. p. 203-231. DOI: 10.1007/s10825-013-0458-7.

Figura 4. (a) Red cristalina hexagonal del grafeno con sus dos subredes A (azul) y B (naranja). Los vectores primitivos de la res se definen como $\vec{a}_1 = d(1, 0)$ y $\vec{a}_2 = d(1/2, \sqrt{3}/2)$, donde $d \approx \sqrt{3}a$ nm es la constante de red y $a = 0.142$ nm denota la distancia interatómica $C - C$. (b) Esquema de la bicapa de grafeno rotada, formada por la superposición de dos monocapas: la capa superior (azul) se rota un ángulo α respecto a la capa inferior (rojo). Las monocapas poseen dimensiones $L \times W$ nm². (c) Representación esquemática de la distancia d_{ij} entre sitios atómicos en la bicapa de grafeno rotada considerados dentro de una esfera de radio $4a$. Los sitios atómicos A y B de cada monocapa son representados con distintos colores: naranja y rojo en la capa inferior y azul y verde en la capa superior.



donde la suma sobre los índices i y j recorren la totalidad de los sitios atómicos de ambas capas. Aquí, ε_i representa la energía de sitio del i -ésimo átomo, t_{ij} es el parámetro de *hopping* entre los sitios i y j , y $H.c.$ corresponde al conjugado hermítico. Para el grafeno, el modelo solo considera la hibridación de orbitales tipo p_z ²⁷²⁸. De modo que, la energía ε_i puede interpretarse como un potencial local efectivo asociado al orbital p_z . En este trabajo, se toma $\varepsilon_i = 0$ eV, fijado como referencia energética del punto de neutralidad de carga. En grafeno ideal, con acoplamiento a

²⁷ MOON, Pilkyung y KOSHINO, Mikito. Energy spectrum and quantum Hall effect in twisted bilayer graphene. En: Physical Review B. 2012. Vol. 85, No. 19. DOI: 10.1103/physrevb.85.195458.

²⁸ BRIHUEGA, I. et al. Unraveling the Intrinsic and Robust Nature of van Hove Singularities in Twisted Bilayer Graphene by Scanning Tunneling Microscopy and Theoretical Analysis. En: Physical Review Letters. 2012. Vol. 109, No. 19. DOI: 10.1103/physrevlett.109.196802.

primeros vecinos, esta elección coincide con la energía del punto de neutralidad de carga $E_{CNP} = 0$ eV. Por otro lado, el término de *hopping* t_{ij} representa la integral de transferencia entre dos orbitales p_z . Es importante notar que, al tratar con una TBG, este término t_{ij} captura tanto los saltos electrónicos intracapa (sitios atómicos en la misma capa) como el acoplamiento intercapa (sitios atómicos en diferentes capas). Para modelar esta dependencia geométrica, el *hopping* se parametriza mediante una forma tipo Slater–Koster ²⁹ como:

$$t_{ij}(d_{ij}) = V_{pp\sigma}(d_{ij}) \cos^2 \theta + V_{pp\pi}(d_{ij}) \sin^2(\theta), \quad (2)$$

donde $\vec{d}_{ij} = \vec{R}_j - \vec{R}_i$ es el vector de separación entre los sitios (con magnitud d_{ij}) y θ es el ángulo formado por el vector de unión $\vec{d}_{ij}$ y el eje perpendicular a las capas (eje z). Los elementos de matriz dependen de la distancia entre sitios y vienen dados por $V_{pp\sigma} = t_0 \exp\left(-\frac{d_{ij}-z_0}{\delta}\right)$, $V_{pp\pi} = t_{\perp}^0 \exp\left(-\frac{d_{ij}-a}{\delta}\right)$ donde $t_{\perp}^0 = 0.48$ eV es el acoplamiento intercapa a una distancia $z_0 = 0.335$ nm y $t_0 = -2.7$ eV es el *hopping* intracapa a primeros vecinos a una distancia a . El parámetro de decaimiento se fija en $\delta = 0.148\sqrt{3}a$ ³⁰. En grafeno, típicamente el término t_{ij} conecta primeros vecinos. No obstante, debido a la rotación α relativa entre las capas, las distancias interatómicas d_{ij} dejan de ser uniformes. Por lo tanto, en la TBG es necesario extender el rango de acoplamiento para obtener una descripción más precisa de las propiedades electrónicas; por ello se incluyeron los términos correspondientes a vecinos j cuya distancia al sitio i satisface $d_{ij} \leq 4a$ (aproximadamente 0.568 nm; véase la figura 4(c)). De este modo, el decaimiento de los términos de *hopping* con la distancia permite capturar de manera realista la formación del patrón de Moiré y el consecuente acoplamiento selectivo entre los sitios de ambas capas.

²⁹ SLATER, J. C. y KOSTER, G. F. Simplified LCAO Method for the Periodic Potential Problem. eng. En: Physical review. 1954. Vol. 94, No. 6. p. 1498-1524.

³⁰ BAHAMON, Dario A., GÓMEZ-SANTOS, G. y STAUBER, T. Emergent magnetic texture in driven twisted bilayer graphene. En: Nanoscale. 2020. Vol. 12, No. 28. p. 15383–15392. DOI: 10.1039/d0nr02786c.

1.2. Modelo *tight-binding* en presencia de un campo magnético

Los efectos del campo magnético externo $\vec{B}$ en el modelo *tight-binding*, pueden estudiarse incorporando la sustitución de Peierls³¹. Esta sustitución introduce una fase compleja en los elementos de *hopping* entre los sitios i y j del sistema, es decir,

$$t_{ij} \longrightarrow t_{ij} \exp \left[-i \frac{e}{\hbar} \int_{\vec{R}_i}^{\vec{R}_j} d\vec{r} \cdot \vec{A}(\vec{r}) \right], \quad (3)$$

donde $\hbar$ es la constante de Planck, e es la magnitud de la carga del electron y $\vec{A}(\vec{r})$ es un potencial vectorial magnético, que depende del gauge utilizado, tal que, $\vec{B} = \nabla \times \vec{A}(\vec{r})$ (rotacional de $\vec{A}(\vec{r})$). Físicamente, esta fase corresponde a una fase de Aharonov-Bohm adquirida por el electrón al propagarse entre los sitios de la red³², y permite incorporar los efectos del campo magnético a través del flujo magnético. En consecuencia, la sustitución de Peierls modifica las condiciones de interferencia cuántica entre las trayectorias en la red.

1.3. Propiedades de transporte electrónico

Establecido el Hamiltoniano *tight-binding*, se procede a estudiar las propiedades de transporte electrónico utilizando la aproximación de Landauer-Buttiker. La figura 5 ilustra la configuración típica del dispositivo considerado, mostrando la disposición de los contactos y las capas de grafeno (región de dispersión). Dos grandes depósitos electrónicos, cuyos potenciales químicos son μ_p y μ_q , conectados a un dispositivo central a través de contactos cuasi-unidimensionales (guías de onda cuánticas) que permiten la propagación de ondas planas hacia dentro y fuera de la región de dispersión. Estos contactos corresponden a los electrodos en un experimento de transporte cuántico. El hamiltoniano total del sistema adopta una estructura matricial de bloque tridiagonal:

³¹ CRESTI, Alessandro. Convenient Peierls phase choice for periodic atomistic systems under magnetic field. En: Phys. Rev. B. 2021. Vol. 103. p. 045402. DOI: 10.1103/PhysRevB.103.045402.

³² DATTA, Supriyo. Electronic Transport in Mesoscopic Systems. Cambridge Studies in Semiconductor Physics and Microelectronic Engineering. Cambridge University Press, 1995. DOI: 10.1017/CB09780511805776.

Figura 5. Representación esquemática de la configuración típica para el formalismo de Landauer-Buttiker. Dos grandes depósitos con potenciales químicos μ_p y μ_q , están conectados a través de contactos cuasi-unidimensionales a un dispositivo o región de dispersión con coeficiente de transmisión $T(E)$.



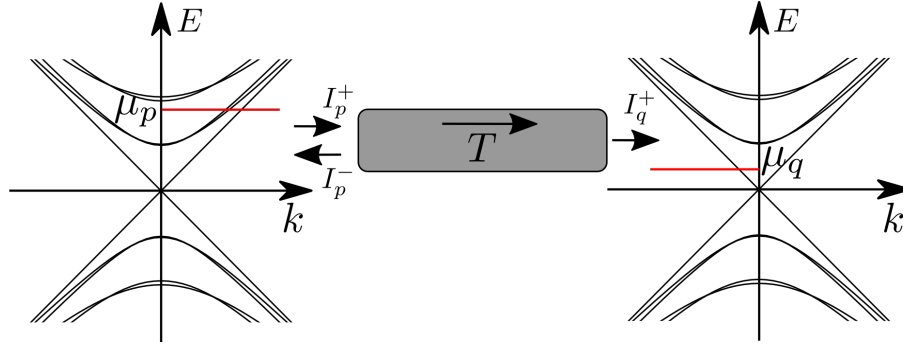
$$H = \begin{pmatrix} H_p & -t_{ps} & 0 \\ -t_{sp} & H_s & -t_{qs} \\ 0 & -t_{sq} & H_q \end{pmatrix} \quad (4)$$

donde $H_s = H_{TBG}$ es el hamiltoniano de la región de dispersión (en nuestro caso corresponde a la bicapa de grafeno rotada), H_p es el hamiltoniano del contacto izquierdo, H_q es el hamiltoniano del contacto derecho, t_{ps} es la matriz de acoplamiento entre el contacto izquierdo (p) y la región de dispersión (s), con $t_{sp} = t_{ps}^\dagger$ su adjunto hermítico. Análogamente, t_{qs} es la matriz de acoplamiento del contacto derecho (q) con el dispositivo (región s), y $t_{sq} = t_{qs}^\dagger$ su adjunto hermítico.

Asumiendo temperatura cero, la corriente entre los contactos está determinada por los estados con energías comprendidas entre los potenciales químicos μ_p y μ_q . Cada contacto (p y q) contiene $m(n)$ modos transversales, con probabilidad de transmisión promedio T . Los estados con momento $+k$, corresponden a electrones que ingresan desde el contacto izquierdo, mientras que los estados $-k$, provienen del contacto derecho, de modo que sus potenciales químicos son μ_p y μ_q , respectivamente (véase la figura 6). Esta definición fue generalizada para sistemas multi-terminal (más de dos contactos) por Buttiker³³, considerando que la corriente neta a través del dispositivo es determinada por medio de la suma de las probabilidades transmisión $\bar{T}$

³³ BÜTTIKER, M. Four-Terminal Phase-Coherent Conductance. En: Phys. Rev. Lett. 1986. Vol. 57. p. 1761-1764. DOI: 10.1103/PhysRevLett.57.1761.

Figura 6. Estructura de bandas de los contactos acoplados a la región de dispersión, caracterizada por una probabilidad de transmisión T . Se asume temperatura nula, de modo que la distribución de energías de los electrones que entran en la región de dispersión es considerada entre los potenciales químicos μ_p y μ_q . Note que los momentos k están orientados en la dirección k_y según la orientación cristalográfica adoptada.



sobre todos los terminales (p y q) como

$$I_p = \frac{2e}{h} \sum_q [\bar{T}_{q \leftarrow p} \mu_p - \bar{T}_{p \leftarrow q} \mu_q]. \quad (5)$$

Cabe mencionar, que las flechas en los subíndices indican la dirección en la que el electrón se transfiere.

1.4. Conductancia

Como se muestra en la figura 6, la corriente neta que fluye a través del dispositivo esta dada por $I = I_1^+ - I_1^- = I_2^+$, de manera que la conductancia para un determinado valor de energía E , se puede escribir mediante la formula de Landauer³² como

$$G(E) = \frac{I}{(\mu_1 - \mu_2)/|e|} = \frac{e^2}{h} T(E), \quad (6)$$

donde e corresponde a la carga del electrón y h la constante de Planck. El termino e^2/h es conocido como la unidad cuántica de conductancia o cuanto de conductancia G_0 , y equivale a la conductancia de un solo modo unidimensional. La conductancia se puede interpretar como una magnitud proporcional a la probabilidad de transmisión debido a la diferencia de potencial entre dos contactos p y q . Con esto,

la ecuación 5 se puede reescribir de la forma

$$I_p = \sum_q [G_{qp}V_p - G_{pq}V_q], \quad (7)$$

donde $V_{p(q)} = \mu_{p(q)}/e$ es el potencial electroquímico del contacto, y

$$G_{pq} \equiv \frac{e^2}{h} \bar{T}_{p \leftarrow q} \quad (8)$$

es la conductancia desde el contacto q al contacto p . Los coeficientes de G , deben satisfacer $\sum_q G_{qp} = \sum_q G_{pq}$, para garantizar que la corriente I_p sea cero, cuando todos los potenciales $V_{p(q)}$ sean iguales³². Sumado a esto, en ausencia de campo magnético, se cumple la relación de simetría formulada por Onsager-Casimir⁷

$$G_{pq} = G_{qp}. \quad (9)$$

Esta relación fundamental subyace del principio de reversibilidad microscópica planteada por Onsager⁶ y la simetría de inversión temporal. En caso contrario, es decir, bajo la presencia de un campo magnético B , se cumple que

$$G_{pq}(B) = G_{qp}(-B). \quad (10)$$

1.4.1. Efecto de desacople (“*mismatch*”) Cuando el acoplamiento entre los contactos y la región de dispersión es ideal, es decir, contactos ideales hechos del mismo material que el dispositivo, se espera que todos los modos $m(n)$ se transmitan eficientemente ya que no habría diferencia de Fermi entre contactos y dispositivo. No obstante, estudios recientes sobre uniones molocapa-bicapa-monocapa en grafeno demuestran que el acoplamiento entre sistemas con geometrías diferentes provocan dispersión y mezclado imperfecto de modos propagantes³⁴. Este efecto *mismatch*, provocado por una diferencia efectiva de niveles de energía, reduce la probabilidad de transmisión.

³⁴ CHU, Kai-Long et al. Transport properties in monolayer–bilayer–monolayer graphene planar junctions. En: Chinese Physics B. 2017. Vol. 26, No. 6. p. 067202. DOI: 10.1088/1674-1056/26/6/067202.

Conviene destacar que una mala alineación entre capas en una bicapa de grafeno³⁵, desorden³⁴, impurezas o fluctuaciones de ángulos locales³⁶, también pueden originar efectos mismatch. Sin embargo, en el presente trabajo se considera una bicapa ideal, sin desorden ni interacciones, tal que el efecto mismatch es provocado por una diferencia efectiva de alineación en los niveles de bandas entre los contactos y el dispositivo rotado.

1.5. Resistencia

De la ecuación 7, notese que se asocia un voltaje con cada energía por medio de $V_p = \mu_p/e$. Esto permite reescribir la ecuación 7 como:

$$\mathbf{I} = \mathbf{G}\mathbf{V}, \quad (11)$$

donde $\mathbf{I}$ es el vector columna de corrientes, $\mathbf{V}$ es el vector columna de voltajes y $\mathbf{G}$ es la matriz de conductancia. La matriz $\mathbf{G}$ proporciona las conductancias entre contactos suponiendo que se miden corrientes y voltajes simultáneamente en todos los terminales. En la práctica experimental, las mediciones de resistencia no se realizan de ese modo, sino usando configuraciones de corriente y voltaje separados (método de cuatro puntas).

Para conectar con cantidades medibles experimentalmente, considérese que se inyecta una corriente I desde un contacto p hacia otro contacto q ($I = I_{pq}$), y se mide la diferencia de potencial entre otros dos terminales k y l . Es importante resaltar, que los contactos k y l se consideran ideales, de modo que estos no intercambian corriente con el sistema $I_k = I_l = 0$, es decir, actúan como sondas de prueba. Esto

³⁵ QIAN, You et al. The effects of interlayer mismatch on electronic properties of bilayer armchair graphene nanoribbons. En: Carbon. 2012. Vol. 50, No. 4. p. 1659-1666. DOI: <https://doi.org/10.1016/j.carbon.2011.12.007>.

³⁶ ZHENG, Jiaxin et al. Interfacial Properties of Bilayer and Trilayer Graphene on Metal Substrates. English. En: Scientific Reports (Nature Publisher Group). jun. de 2013. Vol. 3. Copyright - Copyright Nature Publishing Group Jun 2013; Última actualización - 2024-10-04; SubjectsTermNotLitGenreText - Environmental. p. 2081.

nos permite medir la respuesta del sistema, definida mediante la resistencia³⁷

$$R_{pq,kl} = \frac{V_k - V_l}{I_{pq}}, \quad (12)$$

la cual es una medida muy útil ya que puede ser encontrada también experimentalmente. Los términos del vector corriente I que no son nulos corresponden a $I_p = I$ e $I_q = -I$. Finalmente, consideramos al contacto q como nuestra referencia de potencial para fijar un cero de voltaje, esto matemáticamente se traduce en considerar $V_q = 0$.

1.6. Funciones de Green

1.6.1. Funciones de Green de la región de dispersión Para determinar la conductancia y resistencia del sistema, en este proyecto se implementa el uso de las funciones de Green. El método de las funciones de Green constituye una herramienta numérica estándar para simular las propiedades de transporte en nanoestructuras. Resulta especialmente útil bajo la aproximación de partícula única independiente, pues facilita la inclusión del campo magnético de forma directa. El operador de la función de Green, G , puede obtenerse a partir de la ecuación³²³⁸³⁹:

$$[E - H_{TBG}] G = I, \quad (13)$$

donde E son los auto-valores de H_{TBG} , H_{TBG} corresponde al hamiltoniano del sistema (bicapa de grafeno rotada), e I es la matriz identidad. Cuya solución formal es $G = [E - H_{TBG}]^{-1}$. Esta solución está bien definida para todos los valores de energía, excepto para los auto-valores (energías propias) del hamiltoniano H_{TBG} . Con

³⁷ STONE, A. Douglas y SZAFER, Aaron. What is measured when you measure a resistance?—The Landauer formula revisited. En: IBM Journal of Research and Development. 1988. Vol. 32, No. 3. p. 384-413. DOI: 10.1147/rd.323.0384.

³⁸ ECONOMOU, Eleftherios N y CRETE, University of. Green's Functions in Quantum Physics. eng. Third Edition. Vol. 7. Springer Series in Solid-State Sciences. Berlin, Heidelberg: Springer-Verlag, 2006.

³⁹ FERRY, David K., GOODNICK, Stephen M. y BIRD, Jonathan. Transport in Nanostructures. 2.^a ed. Cambridge University Press, 2009.

el fin de superar este inconveniente, se redefine la función de Green, incorporando condiciones de frontera añadiendo una parte imaginaria infinitesimal de la siguiente manera:

$$G^{\pm} = \lim_{\eta \rightarrow 0^+} \left[\frac{1}{E - H_{TBG} \pm i\eta} \right], \quad (14)$$

donde η es un número real positivo infinitesimal. Los signos $+$ y $-$ corresponden a la solución retardada $G^+ = G^r$ y avanzada $G^- = G^a$, respectivamente. Estas soluciones corresponden a diferentes condiciones de frontera: la solución retardada corresponde a las ondas salientes desde una perturbación, mientras que las soluciones avanzadas entran a una excitación.

1.6.2. Funciones de Green del dispositivos y contactos En nuestro caso, el hamiltoniano tiene la forma de la ecuación (4), representando un dispositivo (región de dispersión) con cuatro o más contactos. Usando esta representación del hamiltoniano en la ecuación $[E - H]G = I$, nos permite obtener la función de Green del dispositivo como ³²:

$$G = [E - H_{TBG} - \Sigma_p - \Sigma_q]^{-1} \quad (15)$$

donde $\Sigma_{p(q)}$ representan los auto-valores (energías propias) del contacto $p(q)$.

A partir de las funciones de Green, podemos calcular la probabilidad e transmisión $\bar{T}_{p \leftarrow q}$ mediante la relación de Fisher-Lee³². Esta última nos permite expresar la transmisión como

$$T_{pq} = \text{Tr}[\Gamma_p G^r \Gamma_q G^a], \quad (16)$$

donde Tr representa la traza, y $\Gamma_{p(q)}$ esta dado por

$$\Gamma_{p(q)} = i [\Sigma_{p(q)}^r - \Sigma_{p(q)}^a]. \quad (17)$$

La ecuación 16 proporciona un significado físico más claro de las funciones de Green. De aquí, la función de Green G^r describe la dinámica de los electrones dentro de la región de dispersión, teniendo en cuenta el efecto de los contactos a través de las energías propias $\Sigma^{r(a)}$. Así, Γ describe el acoplamiento de el dispositivo con los contactos.

1.7. Densidad local de estados (LDOS)

Por otra parte, el formalismo de funciones de Green permite calcular las propiedades internas del sistema, como la densidad local de estados (LDOS por sus siglas en inglés). La LDOS en la posición $\vec{r}$ y energía E viene dada por Datta³² como

$$\rho(\vec{r}, E) = -\frac{1}{\pi} \text{Im} [G^r(\vec{r}, \vec{r}; E)]. \quad (18)$$

1.8. Densidad de estados (DOS)

En sistemas extensos suele interesar más la densidad de estados total (DOS por sus siglas en inglés), que describe cuántos estados electrónicos existen para cada valor de energía E . La DOS se obtiene como la traza de la LDOS sobre todo el sistema, es decir, Esta puede ser obtenida mediante la traza de la densidad local de estados

$$DOS(E) = \sum_{\vec{r}} \rho(\vec{r}, E). \quad (19)$$

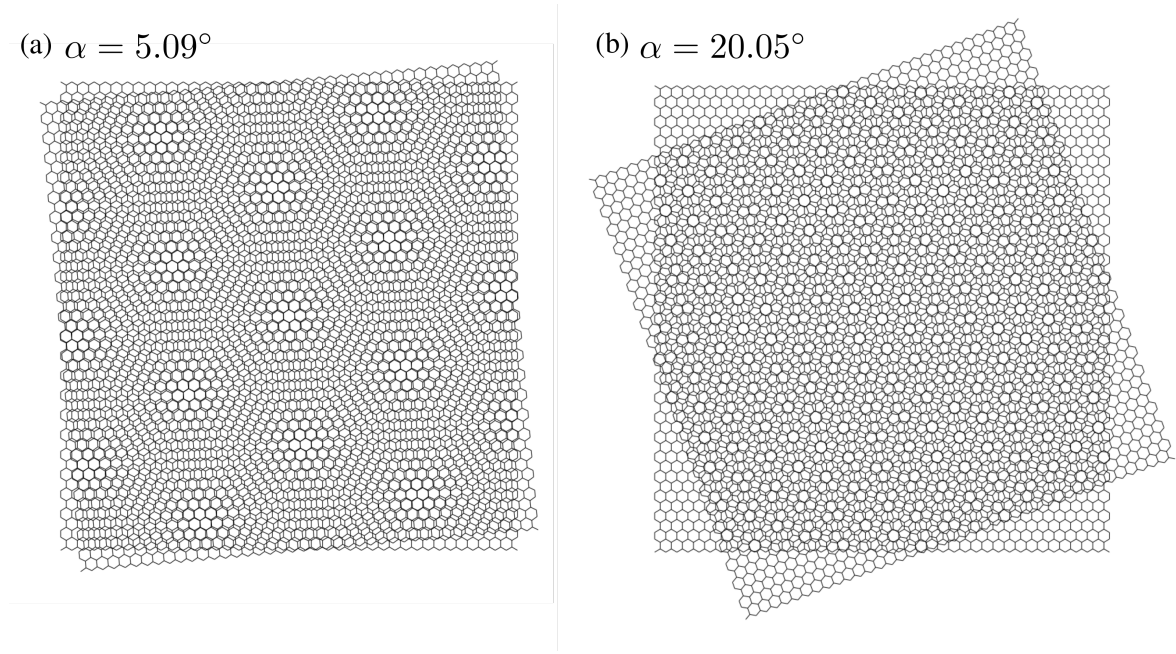
1.9. Patrones de moiré y geometría de la bicapa rotada

La superposición de las capas de grafeno, junto con la rotación relativa entre las capas α , produce un fenómeno visual conocido como patrones de moiré. Estos patrones pueden generar estructuras conmensurables, definidas como aquellas en las que la rotación convierte un vector de red de la primera capa $\vec{v} = (m, n)$ a un vector $\vec{v}' = (n, m)$ (en coordenadas de la red base), siendo n, m enteros que definen $\vec{v}$ en la base de los vectores primitivos $\vec{a}_1$ y $\vec{a}_2$ de la red de grafeno. De este modo, Trambly muestra que para una supercelda con enteros n, m , el ángulo (o su coseno) satisface⁴⁰

$$\cos \alpha = \frac{n^2 + 4nm + m^2}{2(n^2 + nm + m^2)}. \quad (20)$$

⁴⁰ LAISSARDIÈRE, G. Trambly de, MAYOU, D. y MAGAUD, L. Localization of Dirac Electrons in Rotated Graphene Bilayers. En: Nano Letters. 2010. Vol. 10, No. 3. PMID: 20121163. p. 804-808. DOI: 10.1021/nl902948m. eprint: <https://doi.org/10.1021/nl902948m>.

Figura 7. Patrones de moire para un ángulos conmensurables (a) 5.09° y (b) 20.05° , cuyas periodicidades de sus estructuras conmensurables corresponden a 2.769 nm y 0.704 nm, respectivamente.



En este sistema, un apilamiento tipo AA, se da cuando $\alpha = 0^\circ$, mientras que para $\alpha = 60^\circ$, el apilamiento es AB perfecto. Es importante resaltar que mientras más pequeño es el ángulo α (n y m grandes, y $|m - n|$ pequeños), mayor es el tamaño de la supercelda conmensurable (véase la figura 7(a)). Por el contrario, a medida que α se aleja de 1.1° , el patrón de moiré correspondiente pierde periodicidad apreciable (véase la figura 7(b)). Esta diferencia se debe a la simetría hexagonal del sistema: para ángulos de rotación genéricos el patrón de moiré da lugar a una coexistencia de distintos apilamientos locales. Esto se traduce, a nivel electrónico, en la presencia de regiones con apertura local de un gap energético y regiones sin gap, asociadas a las diferentes configuraciones de apilamiento dentro de la supercelda, como se observa en la figura 7(b).

Debido a la simetría hexagonal del grafeno, 30° es un ángulo de máxima inarmonía: en torno a 30° la periodicidad de moiré alcanza un mínimo (aproximadamente 0.475 nm). Al seguir aumentando α hacia 60° , la periodicidad vuelve a crecer, alcanzando nuevamente superceldas grandes cerca de 60° (que es simétrico de 0° por inversión

de subred). La longitud D de la supercelda periódica (cuando existe) viene dada por Campanera⁴¹

$$D = \frac{d}{2 \sin(\alpha/2)}, \quad (21)$$

donde $d = 0.245$ nm es la constante de red del grafeno (distancia entre dos átomos equivalentes en la red 2D).

⁴¹ CAMPANERA, J. M. et al. Density functional calculations on the intricacies of Moiré patterns on graphite. En: Phys. Rev. B. 2007. Vol. 75. p. 235449. DOI: 10.1103/PhysRevB.75.235449.

2. METODOLOGÍA

El estudio desarrollado en este trabajo se basa en el análisis del transporte electrónico cuántico en bicapas de grafeno rotadas mediante un modelo tight-binding, formulado dentro del formalismo de Landauer–Büttiker implementado mediante la técnica de funciones de Green. Las simulaciones numéricas se realizaron utilizando la librería especializada de Python: Kwant, diseñada para el modelado de sistemas cuánticos de transporte coherente en redes tight-binding. Kwant permite construir de manera explícita el Hamiltoniano del sistema en una geometría arbitraria, así como definir contactos semi-infinitos (leads) acoplados al sistema central, lo cual resulta esencial para el estudio de configuraciones multiterminal como las consideradas en este trabajo.

A continuación se detallan la construcción del sistema y las geometrías de contacto exploradas.

2.1. Construcción del sistema y selección de ángulos

El sistema de estudio consiste en una bicapa de grafeno rotada de dimensiones $W \times L \text{ nm}^2$, modelada sobre una red hexagonal discreta de átomos de carbono. La capa inferior se mantiene fija, mientras que la capa superior se rota un ángulo α respecto a la primera, partiendo de un apilamiento AA ($\alpha = 0^\circ$). Para el caso $\alpha = 60^\circ$, el apilamiento resultante es de tipo AB (Bernal). Los cálculos se realizaron mayoritariamente sobre ángulos conmensurables, definidos mediante la ecuación 20. La tabla 1 resume los ángulos estudiados junto con sus índices (n, m) y la periodicidad de moiré D correspondiente.

Dado que el tamaño del sistema $W \times L$ influye directamente en la resolución de la estructura de moiré, ya que incrementa a medida que el ángulo disminuye (véase la figura 8(a)), se optó por trabajar inicialmente con un sistema de tamaño $W = L = 10 \text{ nm}$. Esto responde al elevado costo computacional asociado al incremento del sistema como se muestra en la figura 8(b), por ejemplo, el tiempo de cómputo t de la matriz de conductancia para cada valor de energía escala con el ancho W siguiendo una ley de potencia de la forma $t \propto W^\beta$, con $\beta \approx 2.97$, lo que implica un crecimiento aproximadamente cúbico. En consecuencia, duplicar las dimensiones del sistema

Tabla 1. Ángulos de rotación conmensurables estudiados, con sus índices (n, m) y periodicidad de moiré D . El ángulo 30° corresponde a un ángulo inconmensurable, es decir, no posee periodicidad.

Ángulo (α)	(n, m)	Periodicidad D (nm)
1.2	(31, 30)	11.7
4.4	(8, 7)	3.2
5.09	(7, 6)	2.77
9.4	(4, 3)	1.5
27.795	(2, 1)	0.89
30	-	-
50.6	(3, 4)	1.5
55.6	(7, 8)	3.2
58.8	(30, 31)	11.7

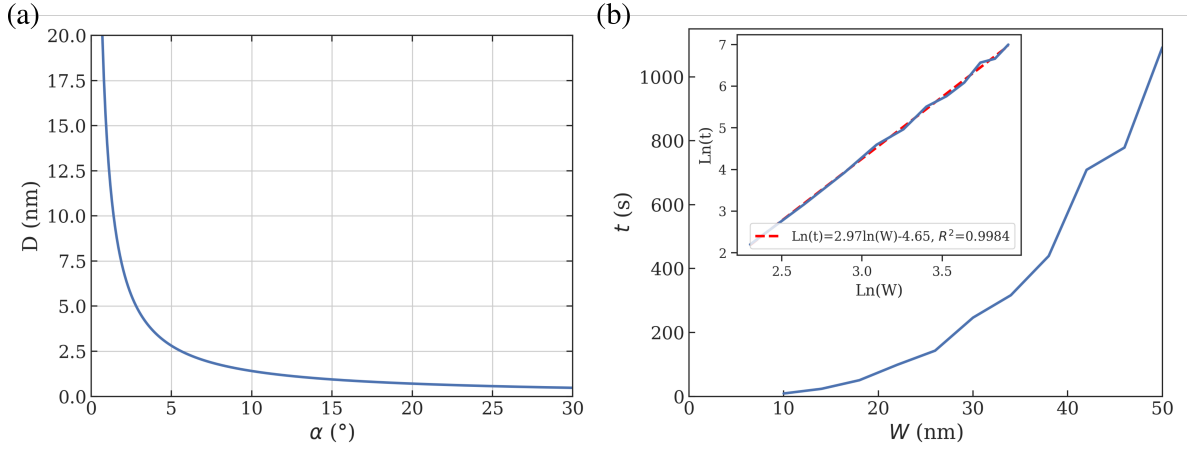
conlleva un aumento del tiempo de simulación casi un orden de magnitud. Teniendo esto en cuenta, únicamente para el caso del ángulo $\alpha = 1.2^\circ$ y cálculos posteriores, fue necesario ampliar el sistema a $w = L = 30$ nm, dado que el periodo de moiré a ángulos pequeños supera los 10 nm (véase la figura 8(a)), requiriendo un sistema mayor para reproducir adecuadamente la estructura de moiré.

2.2. Geometrías de contacto

Se estudiaron tres geometrías de contacto distintas, con el objetivo de explorar diferentes observables de transporte y evaluar la sensibilidad quiral del sistema:

2.2.1. Configuración de cuatro contactos: El sistema principal consiste en una bicapa de grafeno rotada de dimensiones $W \times L$ nm² acoplada a cuatro contactos metálicos ideales enumerados 0, 1, 2 y 3. Los contactos 0 y 1 están acoplados a la capa inferior, mientras que los contactos 2 y 3 se acoplan a la capa superior. Todos los contactos presentan bordes tipo armchair y están modelados como redes de grafeno semi-infinitas con acoplamiento solo a primeros vecinos t_0 . En esta geometría se determinaron conductancias, resistencias y los efectos de un campo magnético externo sobre las propiedades de transporte.

Figura 8. (a) Periodicidad del patrón de moiré de la bicapa de grafeno en función del ángulo de rotación α . (b) Tiempo de computo t de la matriz de conductancia en función del ancho del sistema W , para un valor de energía. El recuadro muestra la representación logarítmica junto con el ajuste lineal $\ln(t) = 2.97 \ln(W) - 4.65$ ($R^2 = 0.9984$), confirmando un escalamiento de ley de potencia $t \propto W^\beta$ con $\beta \approx 2.97$.



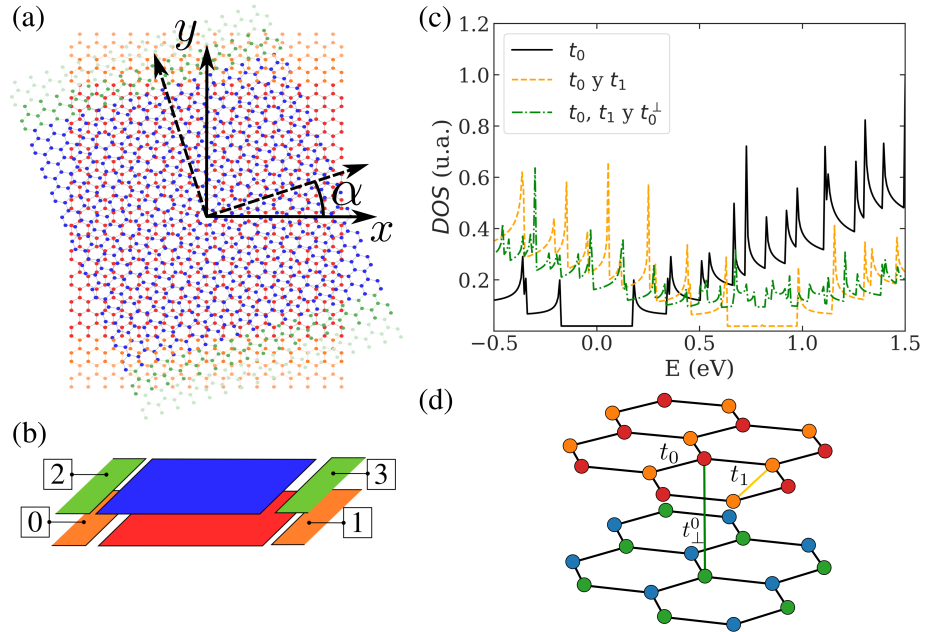
2.2.2. Configuración de seis contactos: Para explorar efectos quirales con mayor resolución, se extendió el sistema a seis contactos. Los contactos 0, 1 y 4 se acoplan a la capa inferior; los contactos 2, 3 y 5 a la capa superior. Los contactos 0, 1, 2 y 3 presentan bordes armchair, mientras que los contactos 4 y 5 tienen terminación zigzag. Esta configuración permite sondear canales de transmisión adicionales y evaluar resistencias no locales que involucran contactos de distinta terminación cristalográfica.

2.2.3. Configuración Hall: En esta geometría, los cuatro contactos se acoplan exclusivamente a la capa inferior: los contactos 0 y 1 tienen bordes armchair y los contactos 2 y 3 tienen bordes zigzag. Para suprimir los estados de borde de la capa superior, se aplicó un potencial de sitio de $U_i = 1000$ eV en los bordes zigzag de dicha capa, desplazando esos estados fuera de la ventana energética de interés. Esta configuración es equivalente a un experimento Hall convencional y permite medir la resistencia transversal $R_{01,23}$ y la longitudinal $R_{01,01}$ como función del ángulo de rotación y del signo de α , sin necesidad de campo magnético externo.

3. RESULTADOS

3.1. Efecto del acoplamiento en la bicapa de grafeno

Figura 9. (a) Bicapa de grafeno rotada con cuatro contactos selectivos por capa. Los contactos 0 y 1 se acoplan a la capa inferior, mientras que los contactos 2 y 3 se acoplan a la capa superior. (b) Esquema simplificado del dispositivo de cuatro terminales con bordes *armchair*. (c) Densidad de estados (DOS) de la bicapa sin rotación ($\alpha = 0^\circ$, apilamiento AA) calculada con distintos términos de *hopping*: primeros vecinos intracapa t_0 , segundos vecinos intracapa t_1 y acoplamiento intercapa $t_0^\perp$. (d) Representación esquemática de los acoplamientos considerados en el modelo *tight-binding*.



Como punto de partida se considera una bicapa de grafeno de dimensiones laterales $W = L = 10 \text{ nm}$, acoplada a cuatro contactos metálicos ideales numerados como 0, 1, 2 y 3. Los contactos 0 y 1 se conectan a la capa inferior y los contactos 2 y 3 a la capa superior, como se ilustra en la figura 9(a) y 9(b). Cada electrodo se modela como una nanocinta semi-infinita de grafeno con borde *armchair*, ancho $W = 10 \text{ nm}$ y acoplamiento intracapa de primeros vecinos t_0 . En la convención geométrica adop-

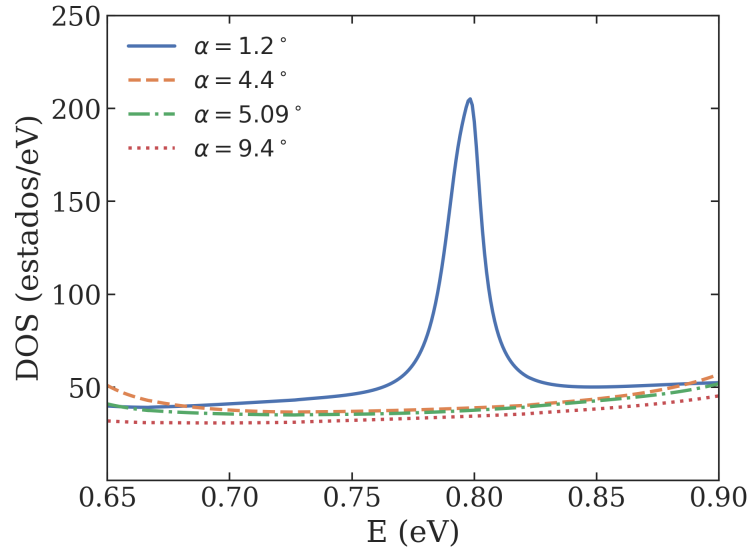
tada, la capa inferior permanece fija y la capa superior se rota un ángulo α respecto a ella. Así, $\alpha = 0^\circ$ corresponde al apilamiento AA, mientras que $\alpha = 60^\circ$ corresponde a una orientación equivalente al apilamiento Bernal AB/BA.

La figura 9(c) permite aislar el papel de los diferentes términos del Hamiltoniano en la estructura electrónica de la bicapa sin rotación. Cuando solo se incluye el acoplamiento de primeros vecinos t_0 , la DOS conserva la simetría electrón-hueco y el punto de neutralidad de carga se ubica en $E_{\text{CNP}} = 0.79 \text{ eV}$, como se espera para el modelo de grafeno no dopado de primeros vecinos⁸. Al incorporar el acoplamiento de segundos vecinos intracapa t_1 , la simetría electrón-hueco se rompe y el punto de neutralidad de carga se desplaza. De acuerdo con la figura 9(c), este desplazamiento sitúa el CNP cerca de 0.79 eV . Este resultado es corroborado por el cálculo analítico del punto de neutralidad de carga de la bicapa de grafeno, el cual se detalla en el Anexo 3. Finalmente, el acoplamiento intercapa $t_0^\perp$ introduce canales adicionales de hibridación entre las capas, lo que modifica la distribución espectral de la DOS y aumenta la cantidad de rasgos resonantes dentro de la ventana de energía analizada. En adelante, la energía se interpretará respecto a esta escala desplazada por los términos de *hopping* incluidos en el modelo.

3.2. Bicapa de grafeno rotada

La figura 10 muestra la DOS de la región de dispersión para cuatro ángulos de rotación pequeños. La DOS se obtiene a partir de la función de Green retardada definida en la sección 1.6; por tanto, describe el espectro efectivo de la región central acoplada a los contactos. Para $\alpha = 1.2^\circ$ aparece un incremento pronunciado de la DOS cerca de $E \approx 0.79\text{--}0.80 \text{ eV}$, es decir, alrededor del punto de neutralidad de carga desplazado por los términos de *hopping* más allá de primeros vecinos. Este aumento es compatible con la acumulación de peso espectral asociada a la reducción de la velocidad de grupo en bicapas rotadas cercanas al régimen de ángulo mágico¹². Sin embargo, a partir de esta figura no se debe concluir por sí sola la existencia de bandas perfectamente planas; dicha afirmación requeriría un análisis explícito de la estructura de bandas o de la dispersión efectiva. La lectura visual indica que el máximo para $\alpha = 1.2^\circ$ es varias veces mayor que el observado para $\alpha = 4.4^\circ$ en la misma vecindad energética, lo que señala un acoplamiento de moiré mucho más eficiente en el ángulo menor.

Figura 10. Densidad de estados (DOS) de la bicapa de grafeno rotada con dimensiones $W = L = 10 \text{ nm}$ para los ángulos conmensurables $\alpha = 1.2^\circ$, 4.4° , 5.09° y 9.4° . Las rotaciones se toman en sentido antihorario y la energía se muestra en el intervalo $E \in [0.65, 0.9] \text{ eV}$, alrededor del punto de neutralidad de carga desplazado.



Para $\alpha = 4.4^\circ$, 5.09° y 9.4° la DOS es más suave en torno al CNP y no presenta un pico comparable al de 1.2° . Este comportamiento es consistente con una reducción progresiva de la hibridación efectiva entre los conos de Dirac de ambas capas cuando aumenta el ángulo de rotación⁴². En los extremos de la ventana energética se aprecia un incremento moderado de la DOS, especialmente para $\alpha = 4.4^\circ$, pero estos cambios no deben interpretarse automáticamente como singularidades de Van Hove sin un soporte adicional en la estructura de bandas. En esta ventana, la asimetría residual entre los lados electrónico y de huecos también refleja la presencia del término t_1 , que rompe la simetría electrón-hueco del modelo.

La distribución espacial del peso espectral se analiza mediante la LDOS $\rho_i(E)$, evaluada en $E = 0.79 \text{ eV}$ para $\alpha = 1.2^\circ$ y 4.4° . En la figura 11(a), correspondiente a 1.2° , la LDOS se concentra de manera marcada en la región central del dispositivo. Esta región coincide con un dominio local de apilamiento AA del patrón de moiré.

⁴² SANTOS, J. M. B. Lopes dos, PERES, N. M. R. y CASTRO NETO, A. H. Graphene Bilayer with a Twist: Electronic Structure. En: Phys. Rev. Lett. 2007. Vol. 99. p. 256802. DOI: 10.1103/PhysRevLett.99.256802.

La longitud característica de moiré, estimada mediante la ecuación 21, es de aproximadamente 11.7 nm para este ángulo, valor comparable con el tamaño lateral del sistema. Por esta razón, el dispositivo contiene esencialmente una región AA dominante, lo que favorece la acumulación de peso espectral en el centro.

En contraste, para $\alpha = 4.4^\circ$, figura 11(b), la periodicidad de moiré es mucho menor, de aproximadamente 3.2 nm. En este caso el sistema contiene varios dominios locales alternados y la LDOS no se concentra en una única región AA extendida. La distribución muestra mayor peso relativo en zonas cercanas a los bordes y una modulación más débil en el interior. Esta diferencia puede estar influida tanto por la menor escala de moiré como por el acoplamiento entre los modos de los contactos y los estados de la región central, efecto relacionado con el *mismatch* discutido en la sección 1.4.1. Dado que la LDOS de la figura está normalizada de forma independiente para cada ángulo, las figuras muestran la forma espacial de los estados, no una comparación directa de amplitudes absolutas.

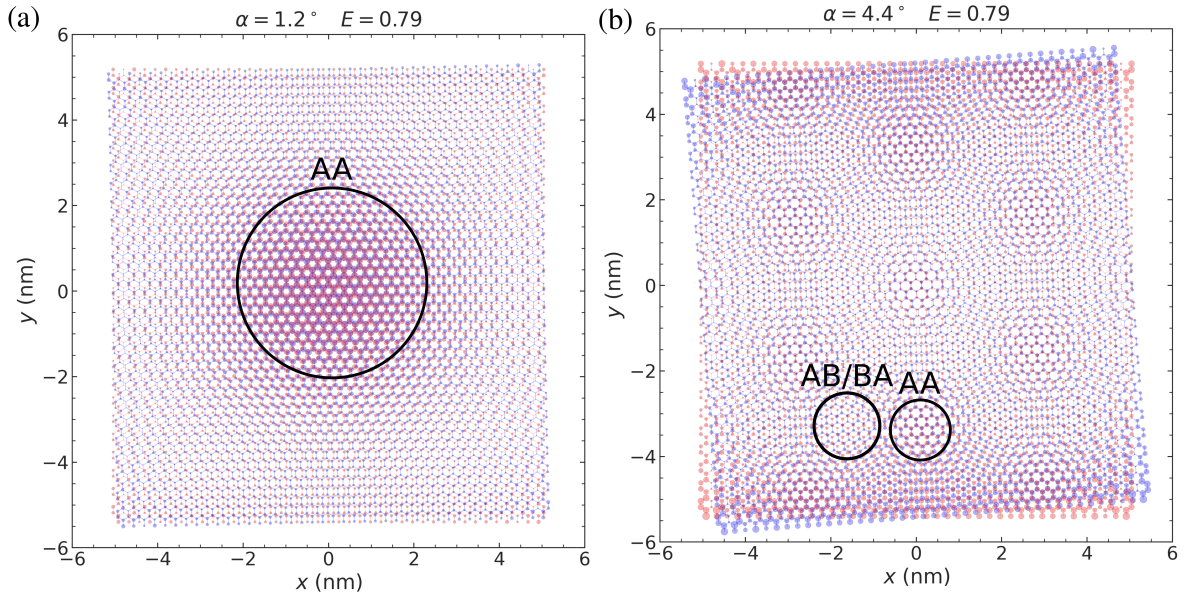
Estos resultados sugieren que la redistribución espacial de los estados electrónicos incide en las propiedades de transporte, en particular en los procesos que involucran transferencia de amplitud entre capas. Para cuantificar esta relación se calcula la matriz de conductancia del dispositivo dentro del formalismo de Landauer–Büttiker multiterminal. En este marco, la corriente I_p en el contacto p se expresa en función de los potenciales electroquímicos de los contactos y de los coeficientes de transmisión, como se definió en la sección 1.4.

Para el sistema de cuatro contactos, la relación corriente–voltaje puede escribirse en forma matricial como

$$\begin{pmatrix} I_0 \\ I_1 \\ I_2 \\ I_3 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} G_{00} & -G_{01} & -G_{02} & -G_{03} \\ -G_{10} & G_{11} & -G_{12} & -G_{13} \\ -G_{20} & -G_{21} & G_{22} & -G_{23} \\ -G_{30} & -G_{31} & -G_{32} & G_{33} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} V_0 \\ V_1 \\ V_2 \\ V_3 \end{pmatrix}, \quad (22)$$

Aquí G_{pq} , con $p \neq q$, representa el coeficiente positivo asociado al acoplamiento conductivo entre los contactos p y q , mientras que el signo negativo aparece en la matriz por la convención de corrientes salientes. Los elementos diagonales satisfacen $G_{pp} = \sum_{q \neq p} G_{pq}$, de modo que $\sum_q G_{pq} = 0$ y se garantiza la conservación de la carga. En ausencia de campo magnético, la reciprocidad de Onsager–Casimir (anexo 1) implica $G_{pq} = G_{qp}$ para el sistema considerado, por lo que basta mostrar la

Figura 11. Densidad local de estados normalizada (LDOS) de la bicapa de grafeno rotada con $W = L = 10$ nm, evaluada en $E = 0.79$ eV para (a) $\alpha = 1.2^\circ$ y (b) $\alpha = 4.4^\circ$. El tamaño de cada circunferencia representa la magnitud normalizada $\rho_i^{\text{norm}} = \rho_i / \max_i \rho_i$ dentro de cada configuración. Los sitios de la capa inferior se muestran en rojo y los de la capa superior en azul. La normalización es independiente para cada ángulo; por ello, la figura compara principalmente la distribución espacial relativa y no la magnitud absoluta de la LDOS.

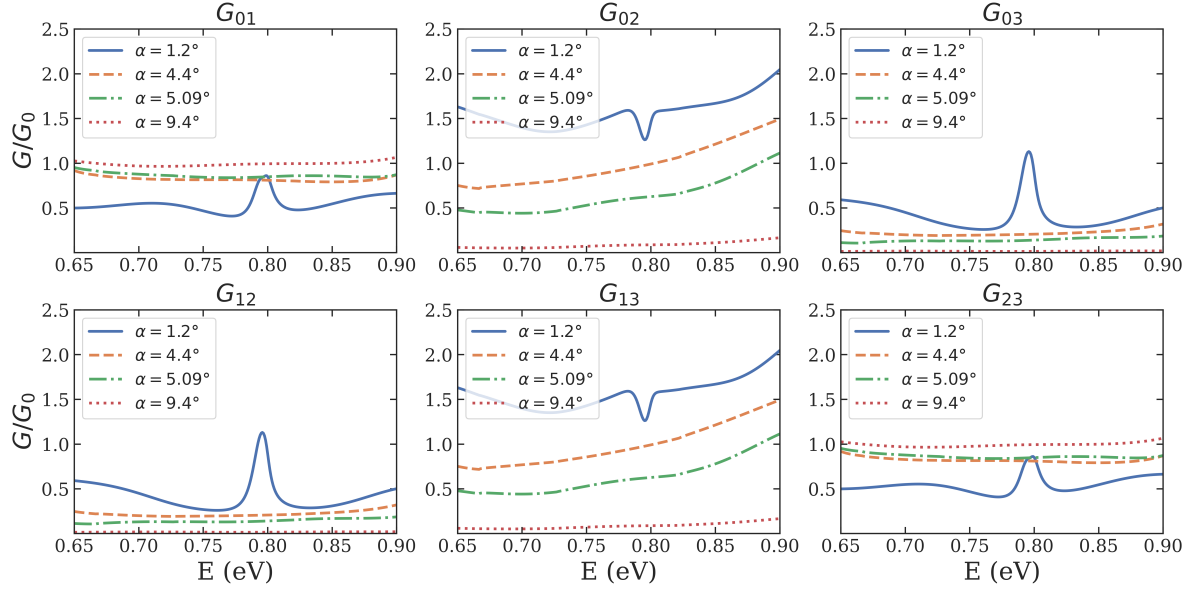


parte triangular superior de la matriz⁶.

La figura 12 presenta los elementos independientes de la matriz de conductancia para los ángulos pequeños analizados. Los términos G_{01} y G_{23} corresponden a transporte intracapa, pues conectan contactos ubicados en la misma monocapa. En cambio, G_{02} , G_{03} , G_{12} y G_{13} involucran contactos pertenecientes a capas diferentes y, por tanto, miden procesos de transmisión intercapa. Para $\alpha = 1.2^\circ$ se observan estructuras resonantes alrededor de $E \approx 0.79\text{--}0.80$ eV. En particular, algunos canales intracapa presentan máximos locales, mientras que ciertos canales intercapa muestran mínimos o antiresonancias en la misma región energética. Esta combinación indica que la alta DOS no se traduce de manera uniforme en todos los canales de transmisión: los estados disponibles pueden acoplarse preferentemente a ciertos contactos y desacoplarse de otros.

Al aumentar el ángulo, los términos intercapa disminuyen de manera apreciable.

Figura 12. Elementos independientes de la matriz de conductancia G , normalizados por $G_0 = e^2/h$, para el sistema de cuatro contactos con $W = L = 10$ nm y ángulos $\alpha = 1.2^\circ, 4.4^\circ, 5.09^\circ$ y 9.4° . Se muestra la parte triangular superior debido a la reciprocidad $G_{pq} = G_{qp}$ en ausencia de campo magnético.

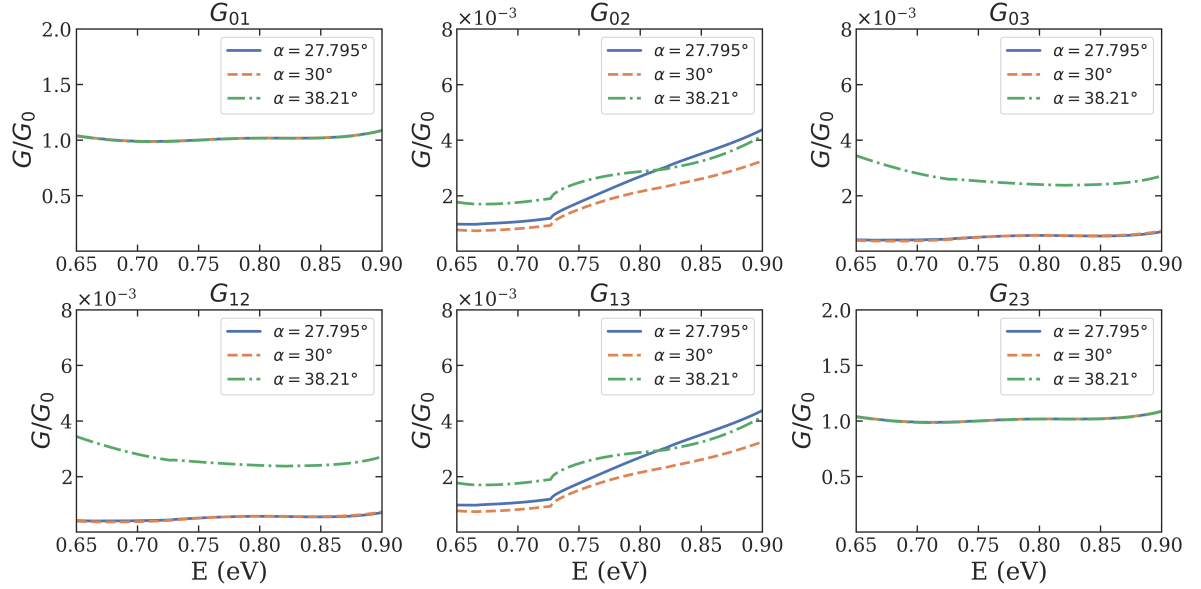


Para $\alpha = 9.4^\circ$, las conductancias intercapa son cercanas a cero dentro de la escala de la figura, mientras que los términos intracapa se aproximan a valores del orden de G_0 . Esta tendencia es consistente con el desacople efectivo de las capas cuando la separación entre los conos de Dirac rotados en el espacio recíproco reduce la hibridación intercapa⁴². En consecuencia, la bicapa se aproxima al comportamiento de dos monocapas débilmente acopladas, cada una conduciendo principalmente por sus propios contactos.

La figura 13 extiende el análisis al régimen de ángulos intermedios. En este intervalo, las conductancias intercapa se reducen hasta valores del orden de $10^{-3}G_0$, como se indica en los paneles correspondientes. Esto muestra que el acoplamiento entre capas no desaparece por completo, pero sí se vuelve mucho más débil que en los regímenes cercanos a 0° o 60° . El caso $\alpha = 30^\circ$ debe tratarse con especial cuidado: no corresponde a una supercelda periódica convencional, sino a una orientación cuasicristalina. Por ello, no conviene describirlo como un ángulo conmensurable en el mismo sentido que 27.795° o 38.21° .

Para ángulos superiores a 30° , figura 14, la respuesta intercapa aumenta nueva-

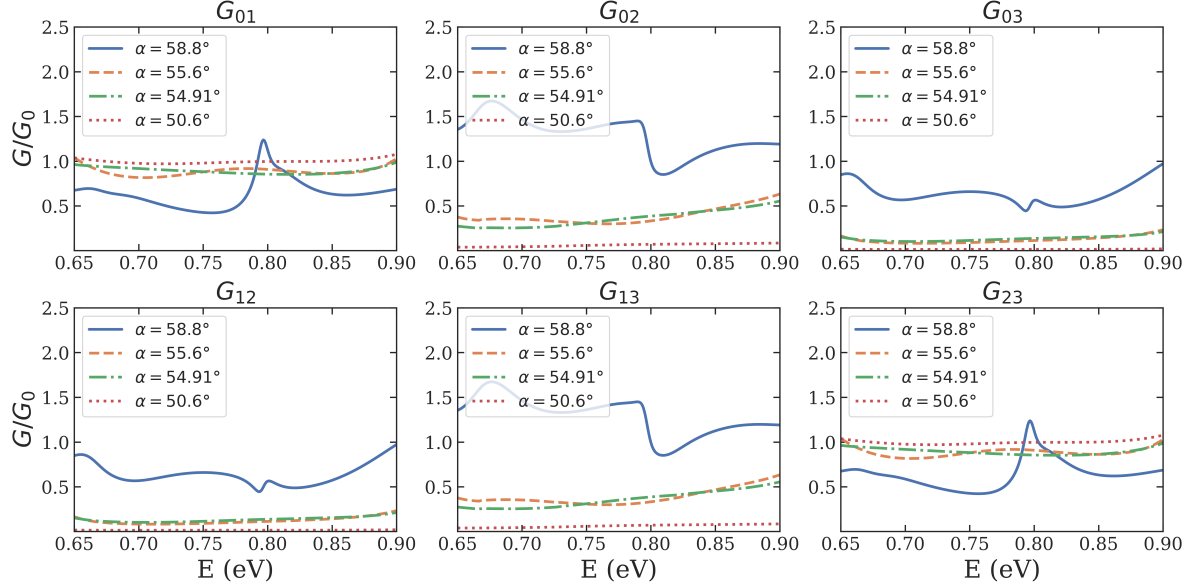
Figura 13. Elementos independientes de la matriz de conductancia G/G_0 para $W = L = 10$ nm y ángulos intermedios $\alpha = 27.795^\circ$, 30° y 38.21° . Los ángulos 27.795° y 38.21° corresponden a configuraciones conmensurables dentro del modelo empleado, mientras que 30° representa el caso cuasicristalino o inconmensurable. En los paneles intercapa se usa una escala de 10^{-3} , lo que evidencia el carácter débil de la transmisión entre capas en este régimen.



mente al aproximarse a 60° . Esta recuperación se entiende porque la geometría se aproxima a una configuración local tipo AB/BA, donde ciertos átomos de una capa quedan cerca de posiciones favorables para el acoplamiento con la otra. No obstante, la respuesta no es idéntica a la observada cerca de 0° , ya que el apilamiento local dominante, la orientación cristalográfica de los contactos y la correspondencia entre canales de entrada y salida son diferentes. Por tanto, los ángulos α y $60^\circ - \alpha$ no deben interpretarse como completamente equivalentes en un dispositivo finito con contactos fijos.

La figura 15 compara de forma directa algunos elementos de conductancia para pares de ángulos cercanos a 0° y 60° . Para 1.2° y 58.8° se observan diferencias apreciables en los canales intercapa, especialmente en la vecindad de $E \approx 0.8$ eV. Esto confirma que la cercanía geométrica a un apilamiento de alta simetría no garantiza la misma respuesta de transporte en un dispositivo multiterminal finito. La razón es que la conductancia no depende solo de la DOS global, sino también del

Figura 14. Elementos independientes de la matriz de conductancia G/G_0 para $W = L = 10$ nm y ángulos cercanos a 60° : $\alpha = 58.8^\circ$, 55.6° , 54.91° y 50.6° . La proximidad a 60° restablece parcialmente el acoplamiento intercapa debido a la vecindad geométrica con configuraciones locales tipo AB/BA.



acoplamiento entre los estados de la región central y los modos propagantes de cada contacto. Para 4.4° y 55.6° la diferencia entre canales también persiste, aunque con una estructura espectral menos abrupta.

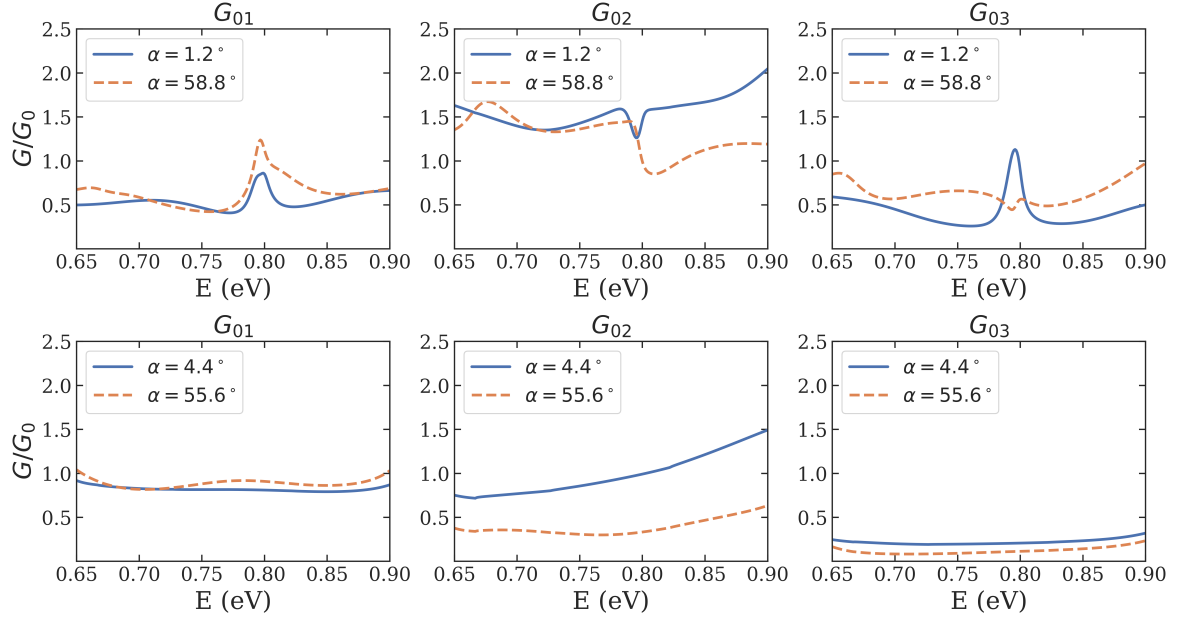
3.3. Resistencia no local

La resistencia no local de cuatro terminales se define como

$$R_{01,23} = \frac{V_2 - V_3}{I}, \quad (23)$$

donde una corriente I se inyecta desde el contacto 0 y se extrae por el contacto 1, de modo que $I_0 = I$, $I_1 = -I$ e $I_2 = I_3 = 0$. La diferencia de potencial se mide entre los contactos 2 y 3, ubicados en la capa superior. Esta magnitud, por tanto, caracteriza una respuesta no local inducida en la capa superior por una corriente aplicada en la capa inferior.

Figura 15. Comparación de elementos representativos de la conductancia para pares de ángulos relacionados por proximidad a 0° y 60° : (fila superior) $\alpha = 1.2^\circ$ y 58.8° ; (fila inferior) $\alpha = 4.4^\circ$ y 55.6° . El término G_{01} corresponde a transporte intracapa en la capa inferior, mientras que G_{02} y G_{03} corresponden a canales intercapa.



Partiendo de la relación lineal corriente–voltaje,

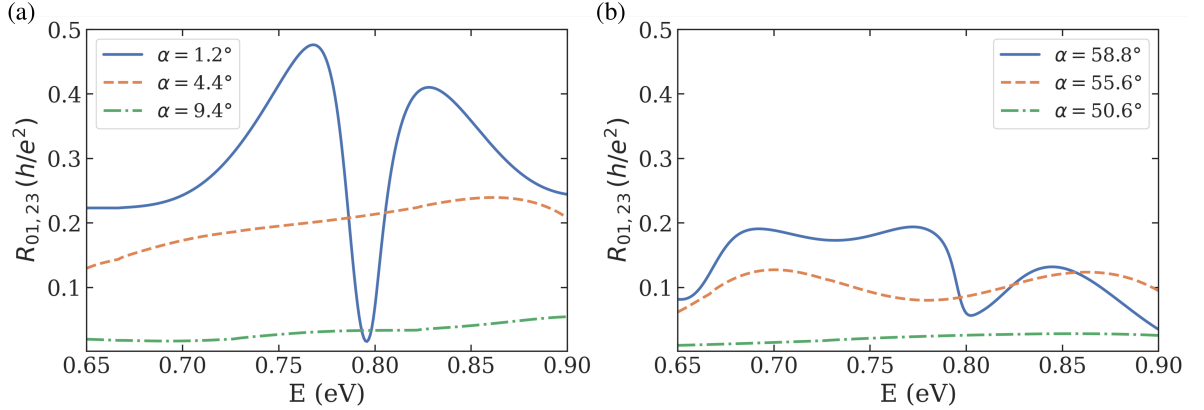
$$\begin{pmatrix} I_0 \\ I_1 \\ I_2 \\ I_3 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} G_{00} & -G_{01} & -G_{02} & -G_{03} \\ -G_{10} & G_{11} & -G_{12} & -G_{13} \\ -G_{20} & -G_{21} & G_{22} & -G_{23} \\ -G_{30} & -G_{31} & -G_{32} & G_{33} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} V_0 \\ V_1 \\ V_2 \\ V_3 \end{pmatrix}, \quad (24)$$

se fija el potencial de referencia $V_1 = 0$. Con esta elección, el sistema se reduce a una matriz 3×3 para los potenciales V_0 , V_2 y V_3 :

$$\begin{pmatrix} I_0 \\ I_2 \\ I_3 \end{pmatrix} = \tilde{\mathbf{G}} \begin{pmatrix} V_0 \\ V_2 \\ V_3 \end{pmatrix}, \quad \begin{pmatrix} V_0 \\ V_2 \\ V_3 \end{pmatrix} = \tilde{\mathbf{G}}^{-1} \begin{pmatrix} I \\ 0 \\ 0 \end{pmatrix}. \quad (25)$$

Usando la conservación de corriente, $G_{pp} = \sum_{q \neq p} G_{pq}$, la resistencia no local puede

Figura 16. Resistencia no local de cuatro terminales $R_{01,23}$ en función de la energía para $W = L = 10$ nm. Se muestran ángulos cercanos a (a) 0° , $\alpha = 1.2^\circ, 4.4^\circ$ y 9.4° , y (b) 60° , $\alpha = 58.8^\circ, 55.6^\circ$ y 50.6° . La resistencia se expresa en unidades de h/e^2 .



escribirse como

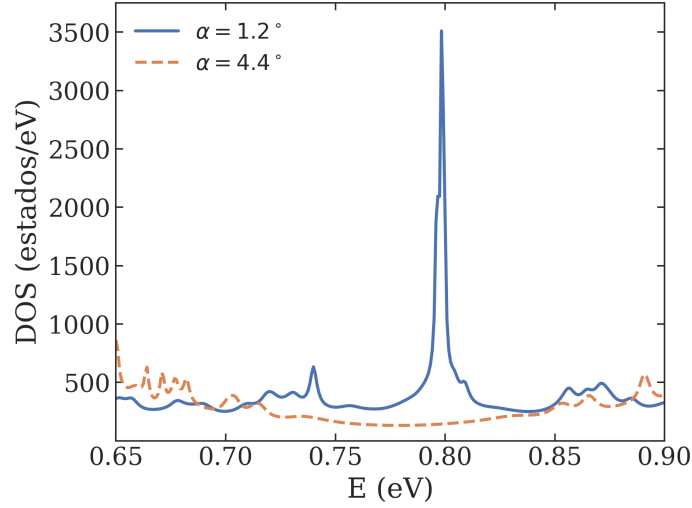
$$R_{01,23} = \frac{V_2 - V_3}{I} = \frac{G_{20}G_{31} - G_{21}G_{30}}{|\tilde{G}|}. \quad (26)$$

Esta expresión muestra que, para la configuración considerada, la señal no local depende de una combinación de conductancias intercapa que conectan la capa inferior con la superior. El determinante $|\tilde{G}|$ fija la escala global de la respuesta, mientras que el numerador determina el signo y la magnitud relativa de la diferencia de potencial $V_2 - V_3$.

La figura 16 muestra que $R_{01,23}$ es distinta de cero para ángulos cercanos a 0° y 60° , donde el acoplamiento intercapa permite inducir una diferencia de potencial en la capa superior. En cambio, la señal disminuye cuando el ángulo se aleja de esas configuraciones, en concordancia con la supresión de los elementos intercapa de la matriz de conductancia. Para los ángulos 1.2° y 58.8° se observan variaciones espectrales alrededor del CNP. Estas variaciones no deben interpretarse únicamente como cambios en la DOS global: la resistencia depende de una combinación de canales de transmisión y, por tanto, puede presentar máximos o mínimos cuando los estados disponibles se acoplan de manera diferente a los contactos 2 y 3.

Dentro de la ventana mostrada, la señal representada es positiva, lo que indica que $V_2 > V_3$ para la convención de corriente adoptada. Esta positividad se relaciona con el balance entre las combinaciones $G_{20}G_{31}$ y $G_{21}G_{30}$ en la ecuación 26. No

Figura 17. Densidad de estados de la bicapa de grafeno rotada con dimensiones $W = L = 30 \text{ nm}$ para los ángulos conmensurables $\alpha = 1.2^\circ$ y 4.4° . La energía se muestra en el mismo intervalo empleado para el sistema de 10 nm .



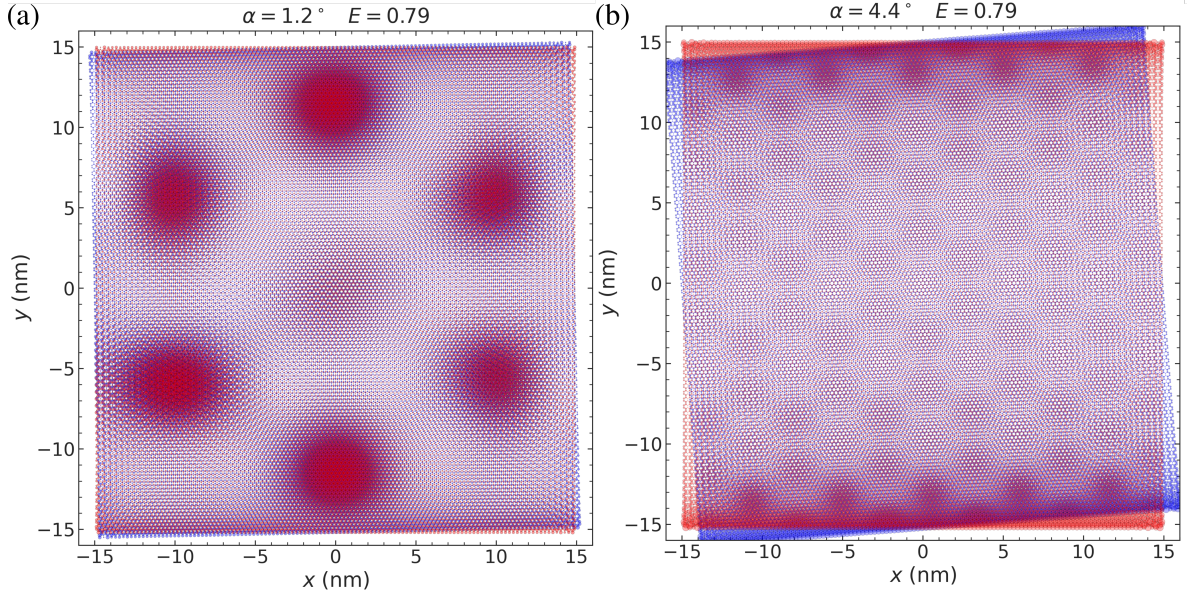
obstante, esta interpretación debe entenderse como una propiedad de la geometría, el etiquetado de contactos y la ventana energética analizada, no como una regla universal para cualquier configuración multiterminal.

3.4. Patrones de moiré y efectos del tamaño

El análisis anterior se realizó para dispositivos finitos de $10 \text{ nm} \times 10 \text{ nm}$. Esta escala permite capturar rasgos relevantes de la rotación entre capas con un costo computacional manejable, pero también puede introducir efectos de tamaño finito. En sistemas rotados, la longitud de moiré puede ser comparable o incluso mayor que el tamaño lateral del dispositivo, de modo que la formación completa de la superred no siempre queda representada. Por esta razón se repite el análisis para un sistema de $30 \text{ nm} \times 30 \text{ nm}$, manteniendo el mismo modelo *tight-binding*, la misma geometría de contactos y la misma terminación *armchair*.

La figura 17 muestra la DOS para $\alpha = 1.2^\circ$ y 4.4° en el sistema de 30 nm . Para 1.2° persiste un pico pronunciado cerca de $E \approx 0.79 \text{ eV}$, lo cual indica que el aumento de peso espectral observado en el sistema pequeño no es simplemente un artefacto de tamaño finito. La posición del máximo se mantiene aproximadamente en la misma región energética; sin embargo, la estructura de la DOS se vuelve más definida al

Figura 18. LDOS normalizada ρ_i^{norm} para una bicapa de grafeno rotada de dimensiones $W = L = 30 \text{ nm}$, evaluada en $E = 0.79 \text{ eV}$ para (a) $\alpha = 1.2^\circ$ y (b) $\alpha = 4.4^\circ$. Los puntos azules y rojos corresponden a las capas inferior y superior, respectivamente; el tamaño de los puntos representa la LDOS normalizada dentro de cada panel.

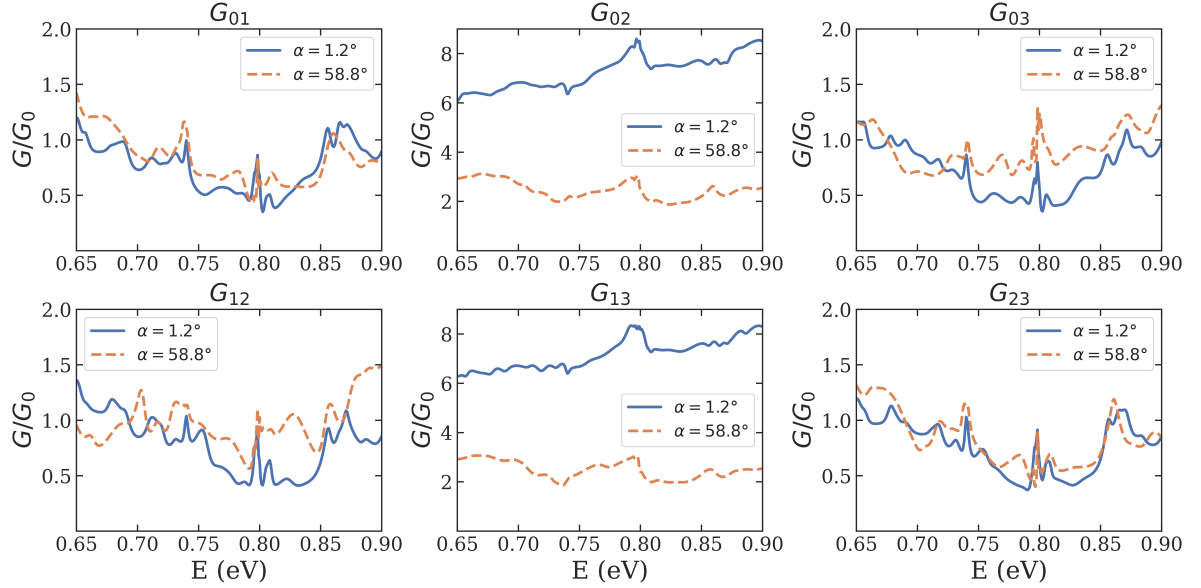


aumentar el tamaño, porque el sistema contiene más regiones de moiré y resuelve mejor los estados asociados a la modulación espacial.

En el mismo panel se aprecian rasgos adicionales alrededor de $E \approx 0.74 \text{ eV}$ y $E \approx 0.86 \text{ eV}$ para $\alpha = 1.2^\circ$. Estos rasgos son compatibles con resonancias asociadas a puntos silla o singularidades de Van Hove inducidas por la rotación, aunque una identificación concluyente requeriría el análisis de la estructura de bandas. Para $\alpha = 4.4^\circ$, la DOS permanece mucho más suave alrededor del CNP, lo que concuerda con una hibridación intercapa más débil y con una longitud de moiré menor.

La figura 18 evidencia que el incremento del tamaño permite visualizar con mayor claridad el patrón espacial de moiré. Para $\alpha = 1.2^\circ$ aparecen varias regiones de alta LDOS, organizadas de acuerdo con los dominios AA del patrón. Esta distribución es consistente con la tendencia de los estados cercanos al CNP a concentrarse en regiones AA cuando el ángulo es pequeño. Para $\alpha = 4.4^\circ$, en cambio, la LDOS está menos concentrada y muestra una modulación más débil, con contribuciones apreciables cerca de los bordes. La diferencia entre ambos casos confirma que

Figura 19. Comparación de los elementos independientes de la matriz de conductancia G/G_0 para $\alpha = 1.2^\circ$ y $\alpha = 58.8^\circ$ en una bicapa de grafeno rotada con dimensiones $W = L = 30$ nm.



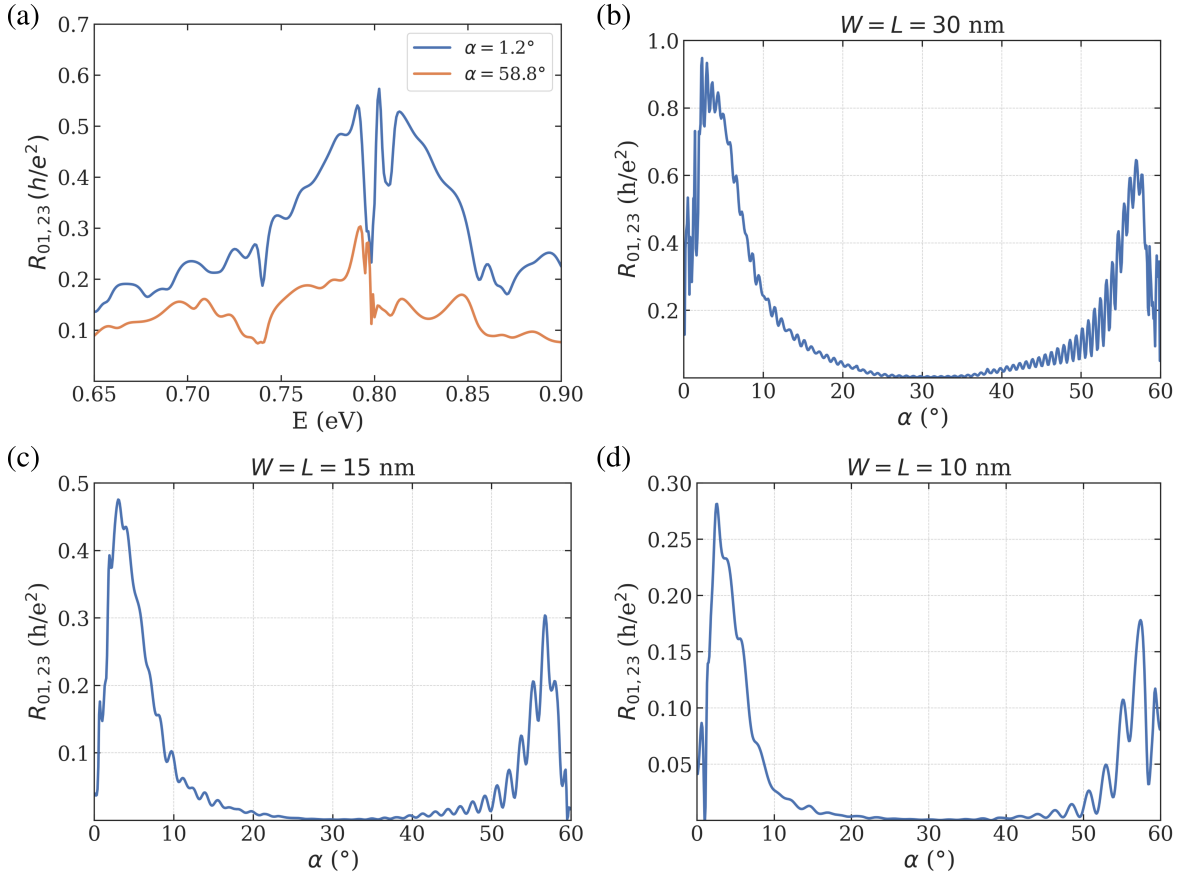
la longitud de moiré y el tamaño del dispositivo son variables inseparables en la interpretación de la localización espacial.

La figura 19 compara la conductancia del sistema de 30 nm para $\alpha = 1.2^\circ$ y 58.8° . Aunque ambos ángulos están próximos a configuraciones de alta simetría, las curvas no son equivalentes. En particular, los canales intercapa G_{02} y G_{13} presentan diferencias notables a lo largo de la ventana energética. Esta diferencia refuerza una idea central del análisis: la respuesta de transporte de un dispositivo finito no está determinada únicamente por el tipo de apilamiento local, sino también por la forma en que los contactos seleccionan modos propagantes de cada capa.

Alrededor de $E \approx 0.8$ eV se observan estructuras resonantes en varios elementos de conductancia para $\alpha = 1.2^\circ$. Estas estructuras son compatibles con la apertura de canales de transmisión asociados a la alta DOS cerca del CNP. Sin embargo, no todas las resonancias de la DOS aparecen con la misma intensidad en la conductancia, porque esta última pondera solo los estados que conectan eficientemente los contactos. Por ello, la comparación entre DOS, LDOS y conductancia debe hacerse canal por canal y no mediante una correspondencia directa uno a uno.

La figura 20(a) muestra que la resistencia $R_{01,23}$ para $\alpha = 1.2^\circ$ es más intensa y

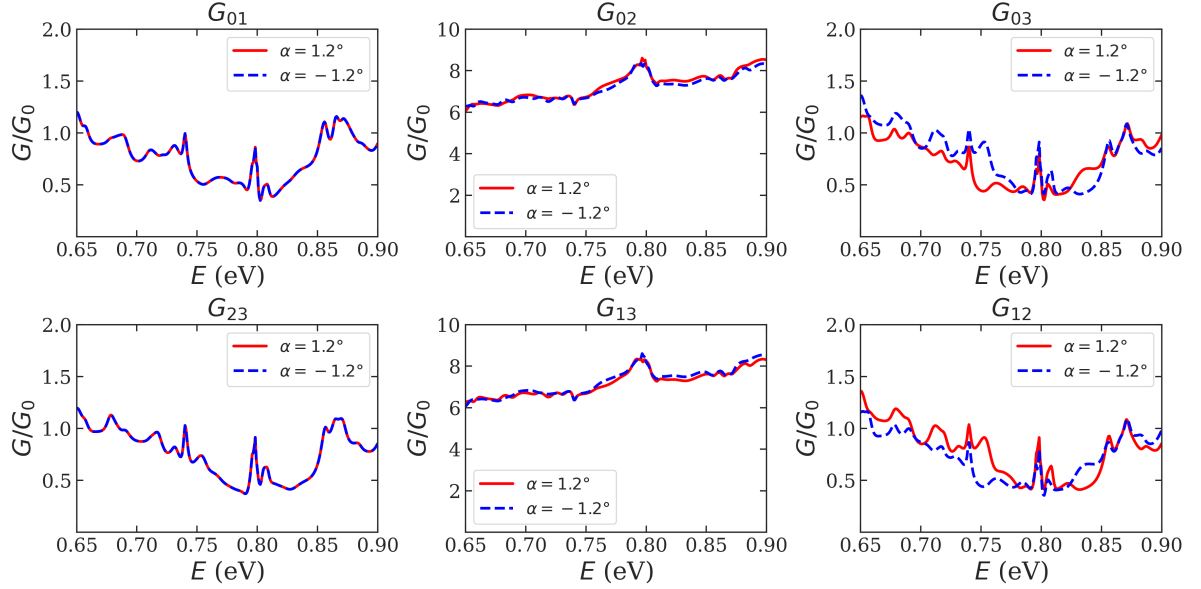
Figura 20. (a) Resistencia no local $R_{01,23}$ en función de la energía para una bicapa con $W = L = 30$ nm y ángulos $\alpha = 1.2^\circ$ y 58.8° . (b)–(d) Resistencia $R_{01,23}$ evaluada en $E = 0.79$ eV como función del ángulo de rotación para sistemas de dimensiones (b) $W = L = 30$ nm, (c) $W = L = 15$ nm y (d) $W = L = 10$ nm. Los valores angulares y las posiciones de máximos se interpretan como estimaciones obtenidas a partir de las gráficas.



más estructurada que para 58.8° en el sistema de 30 nm. Esto indica que, aunque ambos ángulos están cerca de configuraciones de alta simetría, el transporte no local inducido en la capa superior es más sensible al patrón de moiré del ángulo pequeño. Las variaciones alrededor del CNP pueden entenderse como cambios en la diferencia $V_2 - V_3$ producidos por la redistribución de la transmisión entre los contactos superiores.

Las figuras 20(b)–20(d) muestran $R_{01,23}$ en función de α para tres tamaños. En los

Figura 21. Comparación de los elementos independientes de la matriz de conductancia G/G_0 para los ángulos de rotación opuestos $\alpha = 1.2^\circ$ y $\alpha = -1.2^\circ$ en el sistema de $W = L = 30$ nm. Las curvas rojas continuas corresponden a $\alpha = 1.2^\circ$ y las curvas azules discontinuas a $\alpha = -1.2^\circ$.



tres casos se distinguen regiones angulares con respuestas cualitativamente diferentes. Cerca de 0° y de 60° la resistencia aumenta debido al restablecimiento del acoplamiento intercapa. En el intervalo intermedio, especialmente alrededor de 20° – 40° , la respuesta se reduce de forma significativa, en acuerdo con la supresión de las conductancias intercapa observada previamente. La comparación entre tamaños muestra que las oscilaciones angulares se vuelven más finas al aumentar el tamaño lateral del sistema. Se determino la separación entre máximos locales lo cuales son del orden de 0.7° para $W = L = 30$ nm, 1.5° para $W = L = 15$ nm y 2.2° para $W = L = 10$ nm. La tendencia es consistente con un comportamiento de interferencia mesoscópica, en el cual la escala angular característica disminuye al aumentar la longitud efectiva de propagación.

3.5. Efecto de la quiralidad en la bicapa de grafeno rotada

Después de caracterizar la respuesta para rotaciones positivas, se analiza el efecto de invertir el sentido de rotación. Las configuraciones $+\alpha$ y $-\alpha$ son imágenes

especulares entre sí y, por tanto, representan enantiómeros geométricos de la bicapa rotada. En ausencia de campo magnético, esta inversión de quiralidad no debe confundirse con una ruptura de la reciprocidad de Onsager–Casimir: la matriz de conductancia sigue satisfaciendo $G_{pq} = G_{qp}$. No obstante, para un dispositivo finito con contactos fijos, la inversión del patrón de moiré puede redistribuir el acoplamiento entre canales específicos.

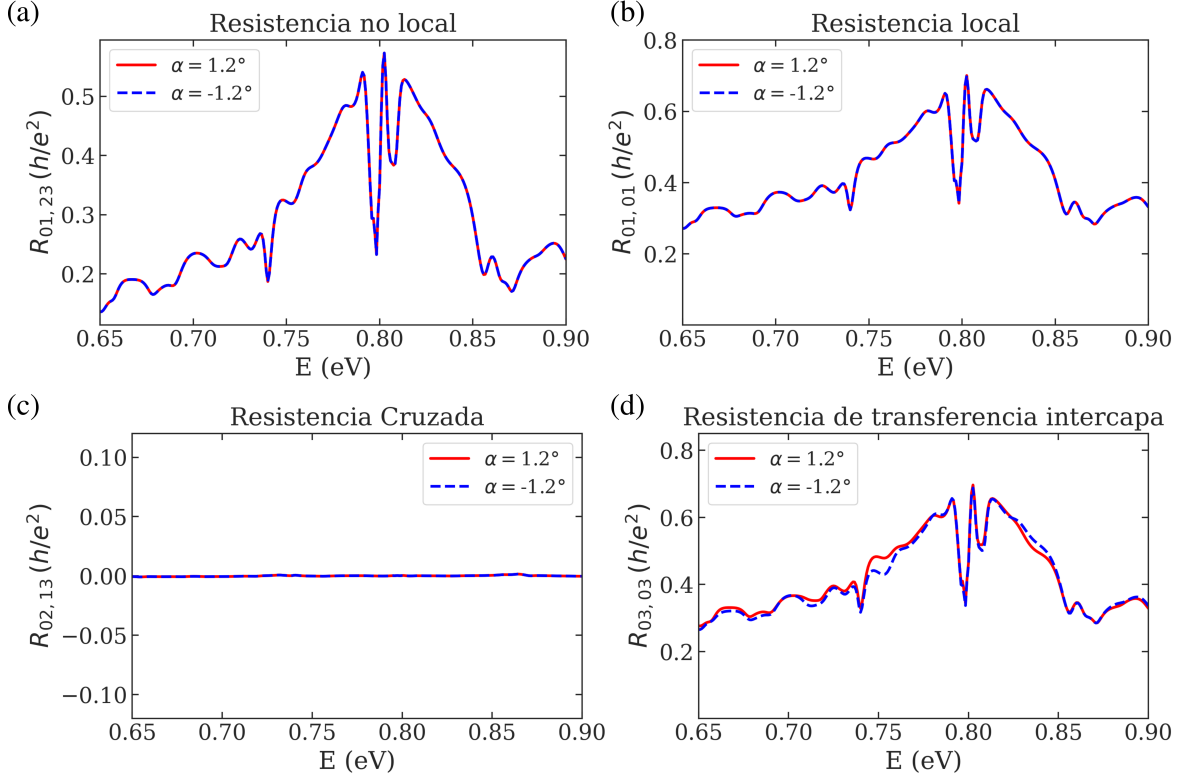
La figura 21 muestra que los elementos intracapa G_{01} y G_{23} son prácticamente indistinguibles para $\alpha = 1.2^\circ$ y -1.2° dentro de la resolución de la gráfica. Esto indica que la propagación dentro de cada capa es poco sensible al cambio de enantiómero cuando no se aplica campo magnético. Los canales intercapa, en cambio, presentan diferencias más visibles, especialmente en G_{03} y G_{12} en ciertos intervalos de energía. Esta sensibilidad no implica una violación de la reciprocidad, sino una redistribución geométrica de la transmisión entre pares de contactos al reflejar el patrón de moiré.

Los elementos G_{02} y G_{13} , aunque son intercapa, permanecen muy próximos entre sí para los dos sentidos de rotación. Esto sugiere que no todos los canales intercapa son igualmente sensibles a la quiralidad geométrica. La respuesta depende de la posición relativa de los contactos y de la forma en que los estados de la región central conectan con cada terminal. Por ello, la quiralidad se manifiesta como una modulación selectiva de canales, más que como un cambio global de toda la matriz de conductancia.

A partir de las matrices de conductancia se calculan las resistencias $R_{01,23}$, $R_{01,01}$, $R_{02,13}$ y $R_{03,03}$, mostradas en la figura 22. La resistencia local $R_{01,01}$ mide la caída de potencial entre los contactos 0 y 1 cuando la corriente circula por la capa inferior. La resistencia no local $R_{01,23}$ mide la respuesta inducida entre los contactos 2 y 3 de la capa superior. La resistencia cruzada $R_{02,13}$ evalúa una configuración en la que la corriente se inyecta entre capas y el voltaje se mide entre contactos opuestos. Finalmente, $R_{03,03}$ corresponde a una configuración efectiva de transferencia intercapa entre los contactos 0 y 3.

En la escala de la figura 22, las resistencias para $+1.2^\circ$ y -1.2° son casi coincidentes. La diferencia más apreciable se presenta en la resistencia de transferencia intercapa $R_{03,03}$, aunque sigue siendo moderada. Este resultado es coherente con la figura 21: en ausencia de campo magnético, la quiralidad geométrica puede modificar algunos canales intercapa, pero la respuesta resistiva global permanece fuertemente

Figura 22. Comparación de las resistencias (a) $R_{01,23}$, (b) $R_{01,01}$, (c) $R_{02,13}$ y (d) $R_{03,03}$ para los ángulos $\alpha = 1.2^\circ$ (línea continua roja) y $\alpha = -1.2^\circ$ (línea discontinua azul), en función de la energía $E \in [0.65, 0.9]$ eV.

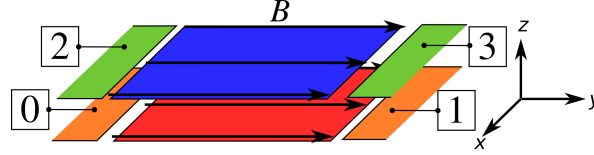


restringida por la reciprocidad y por las simetrías efectivas del dispositivo. Por tanto, la señal quiral sin campo externo debe describirse como una modulación débil y dependiente de la geometría de contactos, no como una respuesta no recíproca en sentido estricto.

3.6. Efectos del campo magnético y la quiralidad

3.6.1. Campo magnético *in-plane* Con el propósito de examinar si la señal quiral identificada en ausencia de campo puede modificarse mediante una perturbación externa, se introduce un campo magnético aplicado en el plano de la bicapa. En esta configuración se recalculan las matrices de conductancia y las resistencias $R_{01,23}$, $R_{01,01}$, $R_{02,13}$ y $R_{03,03}$ para los ángulos $\alpha = 1.2^\circ$ y $\alpha = -1.2^\circ$. El objetivo es deter-

Figura 23. Esquema de la bicapa de grafeno rotada bajo un campo magnético externo *in-plane* $\mathbf{B} = B\hat{y}$. Las flechas negras indican la dirección del campo aplicado en la región de dispersión. Los contactos se mantienen como electrodos ideales sin campo magnético externo.



minar si la ruptura de simetría de inversión temporal, combinada con la quiralidad geométrica del patrón de moiré, produce diferencias observables entre ambas configuraciones enantioméricas.

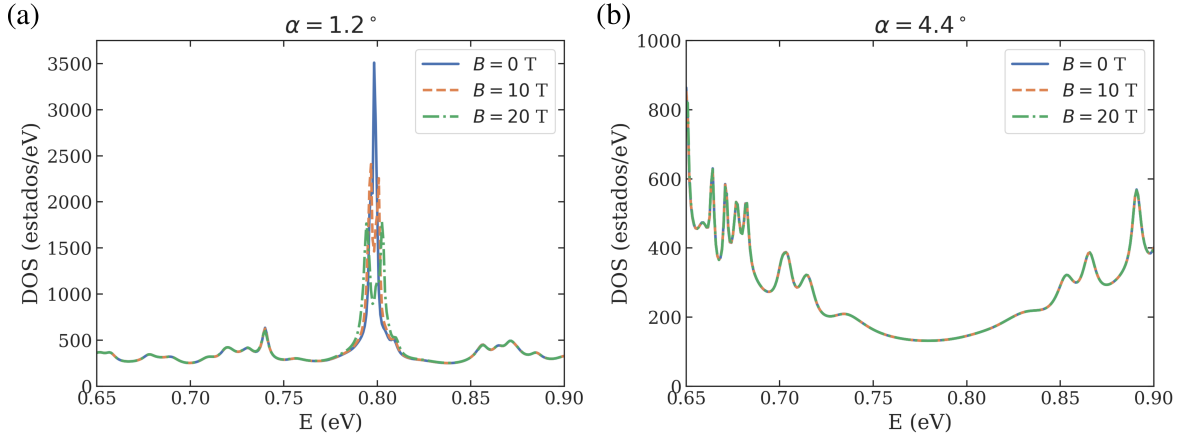
En una monocapa estrictamente bidimensional, un campo magnético paralelo al plano produce un acoplamiento orbital despreciable. En una bicapa de grafeno, en cambio, la separación finita entre las capas ($z_0 = 0.335$ nm) introduce un grado de libertad adicional que permite que el campo *in-plane* afecte los términos de acoplamiento intercapa. Este mecanismo es consistente con la idea de que un campo paralelo puede generar desplazamientos relativos entre los conos de Dirac de capas distintas y modificar la respuesta orbital del sistema²². Por esta razón, el campo *in-plane* se emplea aquí como una perturbación controlada para explorar respuestas quirales de transporte sin alterar la geometría de los contactos.

En el modelo utilizado se considera una geometría plana, sin corrugación. Bajo esta aproximación, el campo magnético *in-plane* $\mathbf{B} = \pm B\hat{y}$ se incorpora mediante el potencial vectorial $\mathbf{A} = \mp Bx\hat{z}$, de modo que su efecto aparece principalmente en los *hoppings* intercapa a través de la fase de Peierls (véase la sección 1.2). El potencial vectorial se aplica únicamente en la región de dispersión, mientras que los contactos se mantienen ideales y libres de campo magnético. Esta elección evita modificar artificialmente los modos propagantes de los electrodos y permite atribuir los cambios observados a la región activa de la bicapa.

El modelo es, además, un modelo sin espín. Por tanto, no se incluye acoplamiento de Zeeman. Esta decisión permite aislar la contribución orbital asociada a la fase de Peierls y al acoplamiento intercapa. En consecuencia, las modificaciones espectrales y de transporte discutidas en esta sección no deben interpretarse como efectos de espín, sino como respuestas orbitales de la red bajo campo magnético²³.

La figura 24 presenta la DOS total para dos ángulos de rotación, $\alpha = 1.2^\circ$ y $\alpha = 4.4^\circ$,

Figura 24. Densidad de estados (DOS) de la bicapa de grafeno rotada bajo campo magnético externo *in-plane* para $B = 0, 10$ y 20 T: (a) $\alpha = 1.2^\circ$ y (b) $\alpha = 4.4^\circ$. La DOS se evalúa en el intervalo energético $E \in [0.65, 0.9]$ eV, alrededor del CNP (≈ 0.8 eV). En ambos casos se considera un sistema de $30 \text{ nm} \times 30 \text{ nm}$ con contactos ideales semi-infinitos de borde *armchair*.

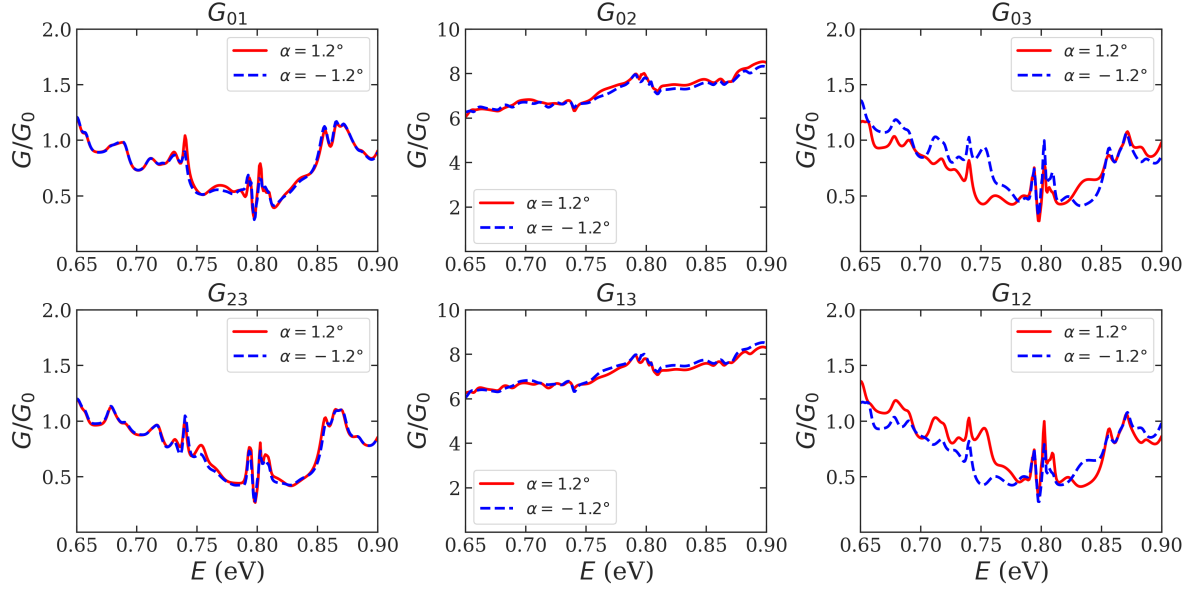


bajo campos magnéticos *in-plane* de $B = 0, 10$ y 20 T. La comparación se realiza en el intervalo $E \in [0.65, 0.9]$ eV, alrededor del punto de neutralidad de carga, ubicado aproximadamente en $E \approx 0.8$ eV.

Para $\alpha = 1.2^\circ$, la figura 24(a) muestra que el pico principal de la DOS cercano al CNP se reduce y se ensancha al aumentar el campo magnético. Además, aparece una estructura compatible con un desdoblamiento parcial de estados híbridos intercapa. Esta interpretación es razonable porque, cerca del ángulo mágico, los estados de baja energía presentan fuerte hibridación entre capas y, por tanto, son más sensibles al acoplamiento orbital inducido por el campo. No obstante, a partir de la DOS global no es posible afirmar de manera concluyente que las bandas se dividan en dos conos de Dirac independientes; para ello sería necesario analizar la estructura de bandas o la distribución de estados resuelta en momento. Por esta razón, el resultado se interpreta aquí como una señal espectral compatible con una redistribución orbital de estados intercapa bajo campo *in-plane*. Este comportamiento se encuentra en línea con trabajos que muestran que campos paralelos o efectos pseudomagnéticos pueden modificar el espectro de bicapas de grafeno desalineadas²³²⁴.

Para $\alpha = 4.4^\circ$, figura 24(b), las curvas para $B = 0, 10$ y 20 T permanecen casi super-

Figura 25. Elementos de la parte triangular superior de la matriz de conductancia para la bicapa de grafeno rotada bajo un campo magnético *in-plane* uniforme $B = 20$ T. Se comparan dos configuraciones de quiralidad opuesta: $\alpha = 1.2^\circ$ (curvas sólidas) y $\alpha = -1.2^\circ$ (curvas discontinuas). El campo se aplica únicamente en la región de dispersión, como se indica en la figura 23, y se introduce mediante la fase de Peierls.



puestas en la escala de la gráfica. La diferencia máxima normalizada entre los casos $B = 0$ T y $B = 20$ T es cercana a 0.05, de modo que cualquier variación inducida por el campo es menor al 5 % dentro del intervalo considerado. Este resultado sugiere que, para este ángulo, los estados relevantes poseen menor hibridación intercapa y se aproximan más al comportamiento de dos monocapas débilmente acopladas. En consecuencia, el acoplamiento orbital producido por el campo *in-plane* resulta menos eficiente que en el caso de $\alpha = 1.2^\circ$.

La figura 25 muestra los elementos de la parte triangular superior de la matriz de conductancia para $B = 20$ T. En contraste con el caso de campo nulo, la inversión $\alpha \rightarrow -\alpha$ produce diferencias visibles en algunos canales, principalmente en las cercanías del CNP. Para G_{01} , la diferencia máxima normalizada punto a punto alcanza aproximadamente 0.15, valor superior al nivel de ruido numérico estimado para la conductancia ($\sim 10^{-5}$). En los canales intercapa se observan respuestas de distinta magnitud: G_{02} presenta una diferencia aproximada de 0.039, mientras que

G_{03} alcanza una diferencia cercana a 0.37. Por tanto, el efecto del campo *in-plane* no es uniforme en toda la matriz de conductancia; algunos canales permanecen casi invariantes, mientras que otros son claramente sensibles a la combinación entre quiralidad y campo magnético.

Estos resultados son compatibles con las relaciones generales de reciprocidad del formalismo de Landauer–Büttiker⁴³. Para un campo magnético externo, la relación de Onsager–Casimir exige comparar el sistema con el campo invertido, es decir,

$$G_{pq}(\alpha, B) = G_{qp}(\alpha, -B). \quad (27)$$

Esta ecuación no significa que el Hamiltoniano a campo fijo sea invariante bajo reversión temporal; por el contrario, el campo magnético rompe dicha simetría. Lo que se conserva es la reciprocidad al invertir simultáneamente el campo y los terminales de entrada y salida.

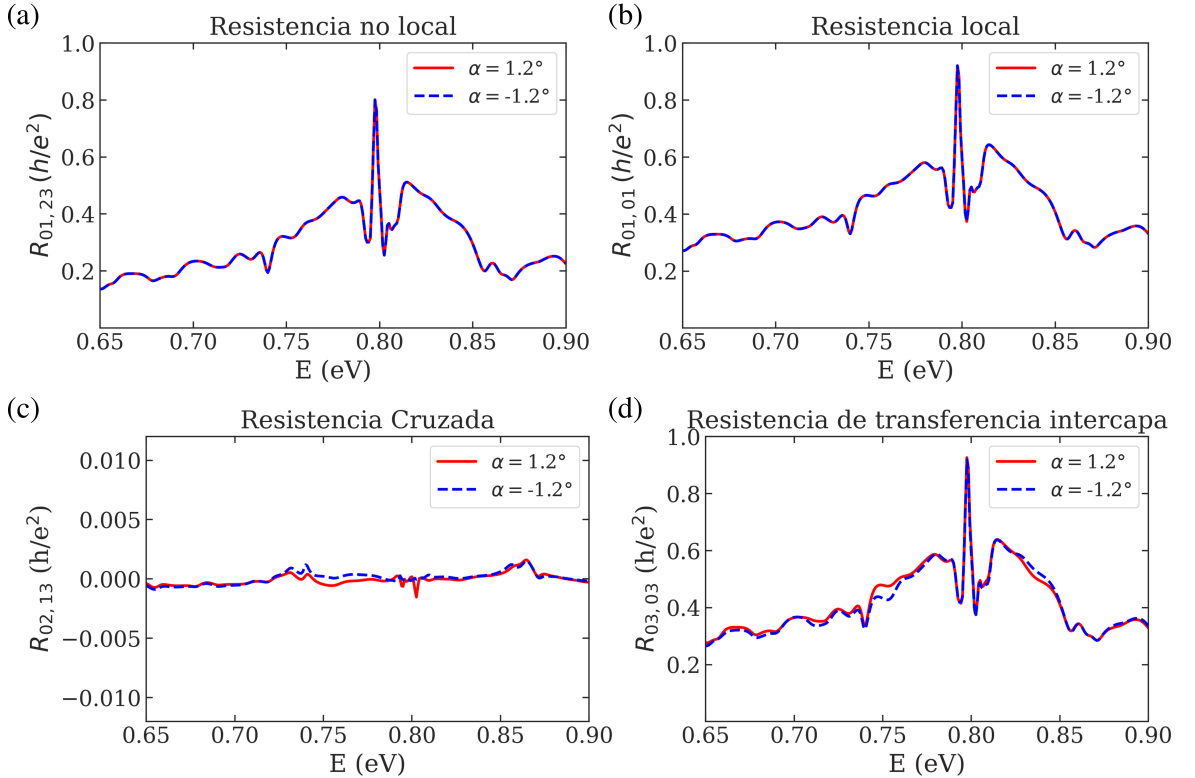
A partir de las conductancias se calculan las resistencias de cuatro terminales $R_{pq,kl}$. En presencia de campo magnético, no se debe asumir en general la igualdad $G_{pq}(\alpha, B) = G_{qp}(\alpha, B)$; por ello, las resistencias se obtienen resolviendo el sistema multiterminal completo. Las figuras 26(a) y 26(b) muestran que $R_{01,23}$ y $R_{01,01}$ son prácticamente invariantes frente a la inversión del ángulo de rotación. Dentro de la resolución de la gráfica, ambas curvas se superponen en todo el intervalo de energía. Esto sugiere que, para estas configuraciones de medición, los procesos dominantes de transmisión no distinguen de forma apreciable entre las dos quiralidades.

La situación cambia para la resistencia cruzada $R_{02,13}$, mostrada en la figura 26(c). Aunque su magnitud absoluta es menor que la de $R_{01,23}$ y $R_{01,01}$, la diferencia relativa entre $\alpha = 1.2^\circ$ y $\alpha = -1.2^\circ$ es grande, con una diferencia máxima normalizada cercana a 0.93. La resistencia de transferencia intercapa $R_{03,03}$, figura 26(d), presenta diferencias más moderadas, del orden de 0.05. Estos resultados indican que la resistencia cruzada es una magnitud particularmente sensible a la combinación de campo *in-plane*, geometría multiterminal y quiralidad estructural.

La figura 27(a) muestra $R_{02,13}$ evaluada a $E = 0.79$ eV como función del campo magnético *in-plane* en el intervalo $B \in [-15, 15]$ T. Las curvas para $\alpha = 1.2^\circ$ y

⁴³ BUTTIKER, M. Symmetry of electrical conduction. En: IBM Journal of Research and Development. 1988. Vol. 32, No. 3. p. 317-334. DOI: 10.1147/rd.323.0317.

Figura 26. (a) Resistencia no local $R_{01,23}$, (b) resistencia local $R_{01,01}$, (c) resistencia cruzada $R_{02,13}$ y (d) resistencia de transferencia intercapa $R_{03,03}$ para $\alpha = 1.2^\circ$ (curva continua roja) y $\alpha = -1.2^\circ$ (curva discontinua azul), en función de la energía $E \in [0.65, 0.9]$ eV. Las resistencias se evalúan bajo un campo magnético *in-plane* uniforme de magnitud 20 T, con $\mathbf{B} \parallel \hat{y}$.



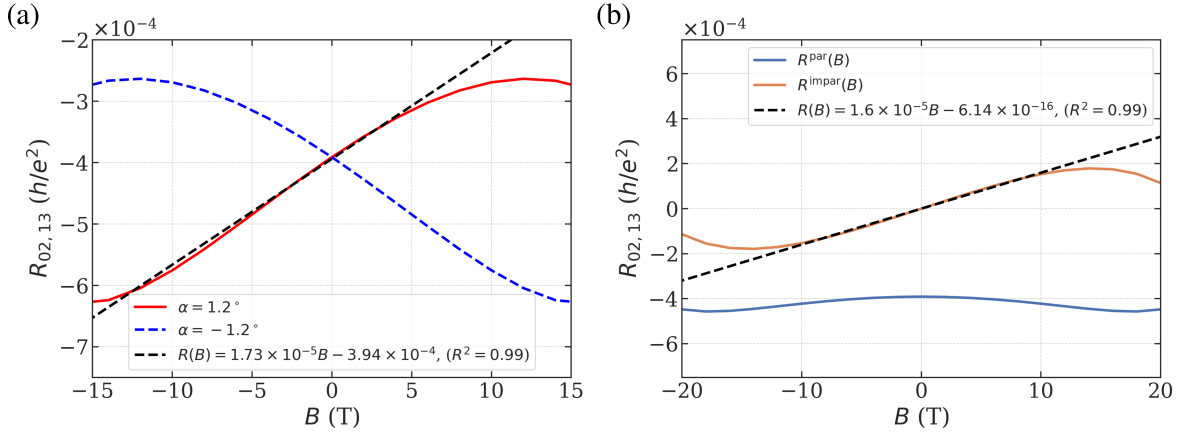
$\alpha = -1.2^\circ$ presentan signos opuestos y se cruzan cerca de $B = 0$. Esta tendencia es compatible con una contribución impar en el campo cuyo signo depende de la quiralidad del patrón de moiré. La relación aproximada

$$R_{02,13}(\alpha, B) \simeq R_{02,13}(-\alpha, -B) \quad (28)$$

resume la simetría observada en el rango de campo analizado. La igualdad debe entenderse dentro de la precisión numérica del cálculo y bajo la geometría de contactos empleada.

En el intervalo de campo débil $B \in [-5, 5]$ T, $R_{02,13}$ presenta una dependencia aproximadamente lineal con B . El ajuste mostrado en la figura indica que las contribucio-

Figura 27. (a) Resistencia cruzada no local $R_{02,13}$ en función del campo magnético *in-plane* para una bicapa de grafeno rotada con $\alpha = \pm 1.2^\circ$, evaluada en $E = 0.79$ eV. La curva roja corresponde a $\alpha = 1.2^\circ$ y la curva azul a $\alpha = -1.2^\circ$. La línea discontinua negra representa el ajuste lineal en el intervalo $B \in [-5, 5]$ T. (b) Descomposición de $R_{02,13}$ en componentes par e impar respecto al campo magnético. La curva azul muestra $R^{\text{par}}(B)$ y la curva naranja $R^{\text{impar}}(B)$. La línea punteada corresponde al ajuste lineal de la componente impar en el intervalo $B \in [-10, 10]$ T.



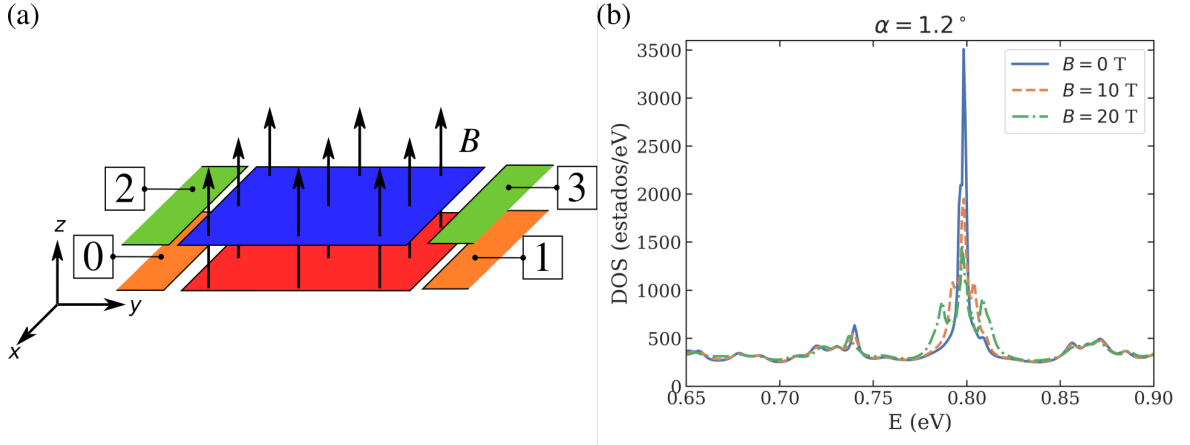
nes de orden superior son pequeñas en ese rango. Físicamente, esta linealidad es consistente con una respuesta orbital de primer orden, asociada a la fase de Peierls acumulada por los portadores durante su propagación en la red.

La figura 27(b) muestra la descomposición de la resistencia en componentes par e impar respecto al campo magnético, definidas como

$$R^{\text{par}}(B; \alpha) = \frac{R_{02,13}(\alpha, B) + R_{02,13}(\alpha, -B)}{2}, \quad R^{\text{impar}}(B; \alpha) = \frac{R_{02,13}(\alpha, B) - R_{02,13}(\alpha, -B)}{2}. \quad (29)$$

La componente impar domina la señal en el intervalo considerado y puede aproximarse como $R^{\text{impar}}(B) \approx \chi(\alpha)B$. La pendiente $\chi(\alpha)$ tiene unidades de $(h/e^2)/\text{T}$ y cambia de signo al invertir la quiralidad, mientras que su magnitud se mantiene aproximadamente constante. La componente par permanece cercana a un fondo casi constante. Este comportamiento es compatible con una respuesta magnetoquiral de origen orbital; sin embargo, no se interpreta como una prueba directa de un efecto Hall de valle, porque el cálculo no resuelve explícitamente las contribuciones

Figura 28. (a) Esquema de la bicapa de grafeno rotada bajo campo magnético perpendicular $B = B\hat{z}$. Las flechas negras indican la dirección del campo aplicado en la región de dispersión, mientras que los contactos permanecen ideales y libres de campo. (b) DOS de una bicapa de grafeno rotada con $W = L = 30$ nm y $\alpha = 1.2^\circ$, calculada para $B = 0, 10$ y 20 T.



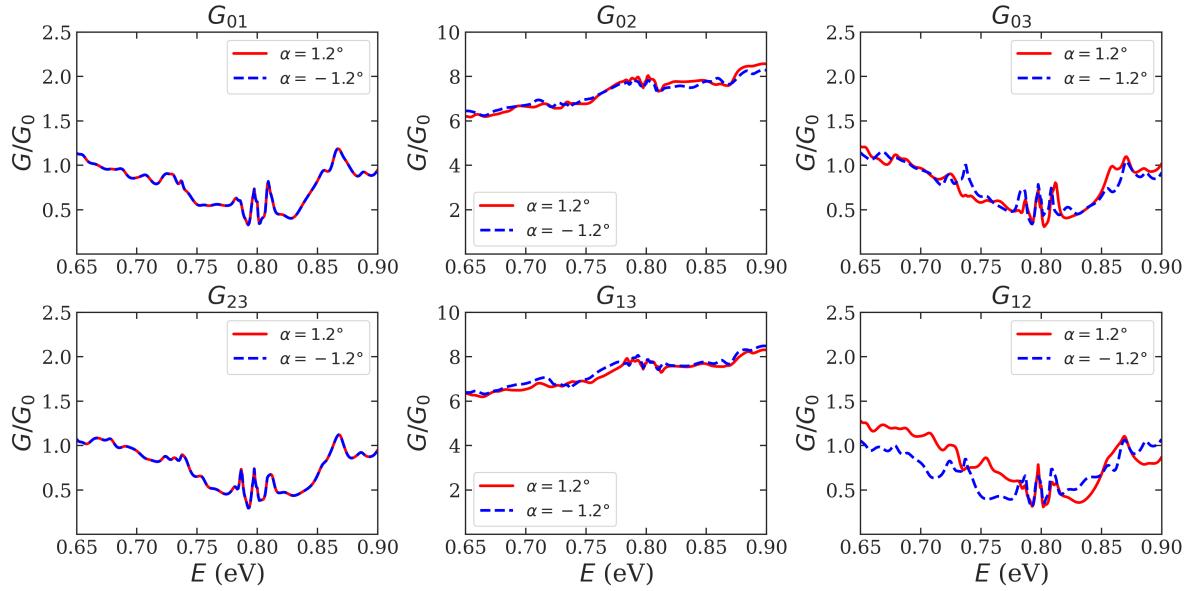
de valle.

Los cálculos no introducen explícitamente un término de regularización η en la energía; por tanto, los resultados corresponden al límite numérico $\eta \rightarrow 0$. La estabilidad de las curvas fue contrastada mediante un barrido pequeño en energía, $\Delta E = 10^{-8}$ eV. La variación máxima observada en $R_{0,13}$ fue de 1.54×10^{-7} , lo que indica que las diferencias discutidas superan el nivel de fluctuación numérica estimado.

3.6.2. Campo magnético perpendicular Una vez discutido el caso de campo *in-plane*, se analiza un campo magnético perpendicular al plano de la bicapa, como se muestra en la figura 28(a). A diferencia del caso anterior, un campo perpendicular genera un acoplamiento orbital directo dentro de cada capa y modifica las trayectorias electrónicas en el plano. Por ello, esta configuración permite examinar la redistribución espectral asociada al campo y su posible efecto sobre las diferencias entre $\alpha = 1.2^\circ$ y $\alpha = -1.2^\circ$.

El campo perpendicular $B = \pm B\hat{z}$ se introduce mediante el potencial vectorial $A = \pm Bx\hat{y}$, que modifica los *hoppings* mediante la fase de Peierls (sección 1.2). Al igual que en el caso *in-plane*, el campo se aplica únicamente en la región de dispersión y los contactos se mantienen como electrodos ideales.

Figura 29. Elementos de la parte triangular superior de la matriz de conductancia para la bicapa de grafeno rotada bajo campo magnético perpendicular uniforme $B = 20$ T. Se comparan $\alpha = 1.2^\circ$ (curvas sólidas) y $\alpha = -1.2^\circ$ (curvas discontinuas). El campo se aplica únicamente en la región de dispersión, como se indica en la figura 28(a), y se introduce mediante fase de Peierls.

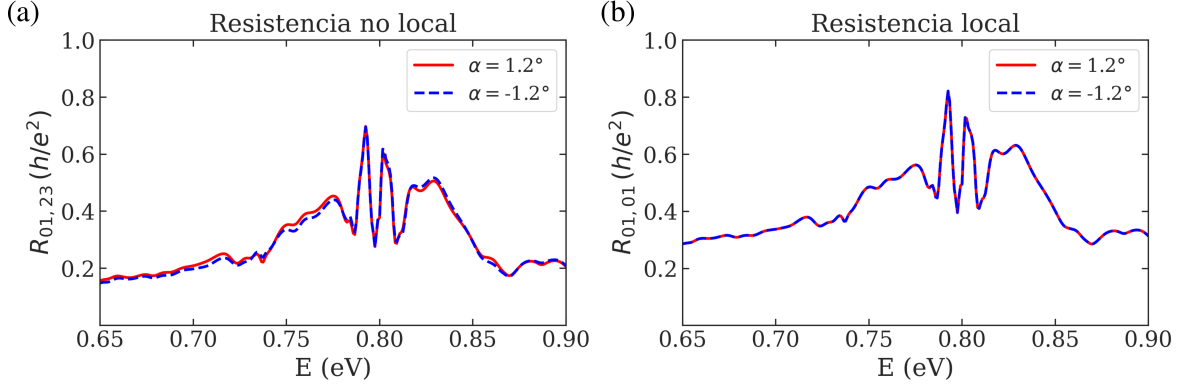


La figura 28(b) muestra la DOS para $\alpha = 1.2^\circ$ bajo $B = 0, 10$ y 20 T. Al aumentar el campo, el pico principal cercano al CNP disminuye y se redistribuye hacia energías vecinas. Para $B = 20$ T, esta redistribución se vuelve más visible y aparecen estructuras laterales alrededor del máximo principal. Este comportamiento es compatible con una reorganización orbital de los estados inducida por el campo perpendicular. Aunque dicha redistribución puede estar relacionada con una cuantización tipo Landau⁴⁴, la DOS global por sí sola no permite identificar inequívocamente niveles de Landau ni asignar índices cuánticos. Por tanto, la interpretación debe mantenerse como una lectura espectral aproximada, que requeriría un análisis adicional de bandas, LDOS o estados propios para una identificación completa.

La figura 29 presenta la matriz de conductancia bajo campo perpendicular $B = 20$ T.

⁴⁴ BIGEARD, Gaëlle y CRESTI, Alessandro. Magic-angle twisted bilayer graphene under orthogonal and in-plane magnetic fields. En: Journal of Physics: Condensed Matter. 2024. Vol. 36, No. 32. p. 325502. DOI: 10.1088/1361-648X/ad4431.

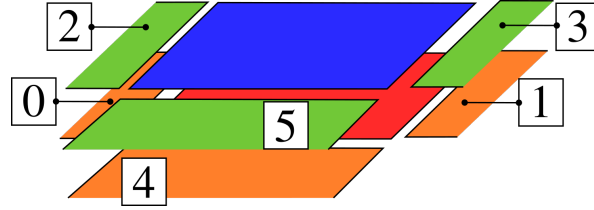
Figura 30. (a) Resistencia no local $R_{01,23}$ y (b) resistencia local $R_{01,01}$ para $\alpha = 1.2^\circ$ (curva continua roja) y $\alpha = -1.2^\circ$ (curva discontinua azul), en función de la energía $E \in [0.65, 0.9]$ eV. Las resistencias se evalúan bajo un campo magnético perpendicular uniforme de magnitud 20 T.



El elemento intracapa G_{01} permanece prácticamente invariante al cambiar $\alpha \rightarrow -\alpha$ en la ventana energética analizada. En contraste, los elementos intercapa G_{02} , G_{03} , G_{12} y G_{13} muestran diferencias de distinta magnitud entre ambas quiralidades. A partir de la lectura de la gráfica, las diferencias más notorias se concentran cerca del CNP y en los canales que conectan contactos de capas distintas o posiciones geométricamente no equivalentes. Esto sugiere que el campo perpendicular, al modificar las fases orbitales dentro de la región de dispersión, puede amplificar parcialmente la sensibilidad quiral de algunos canales de transmisión.

La figura 30 muestra las resistencias $R_{01,23}$ y $R_{01,01}$ bajo campo perpendicular. En $R_{01,23}$ se observan diferencias pequeñas pero sistemáticas entre $\alpha = 1.2^\circ$ y $\alpha = -1.2^\circ$, con una magnitud relativa del orden de unos pocos por ciento. Alrededor del CNP, la diferencia máxima normalizada es aproximadamente 2.3 %. Esta diferencia indica que la resistencia no local conserva cierta sensibilidad al sentido de rotación cuando la simetría de inversión temporal se rompe mediante un campo perpendicular. En cambio, $R_{01,01}$ permanece prácticamente superpuesta para ambas quiralidades, lo que sugiere que la respuesta local longitudinal está dominada por la transmisión directa entre los contactos de inyección y drenaje.

Figura 31. Esquema de la bicapa de grafeno rotada con seis contactos. Los contactos adicionales 4 y 5 consisten en redes de grafeno ideal, con acoplamiento de primeros vecinos t_0 y ancho $L = 30$ nm.



3.7. Bicapa de grafeno rotada con seis contactos

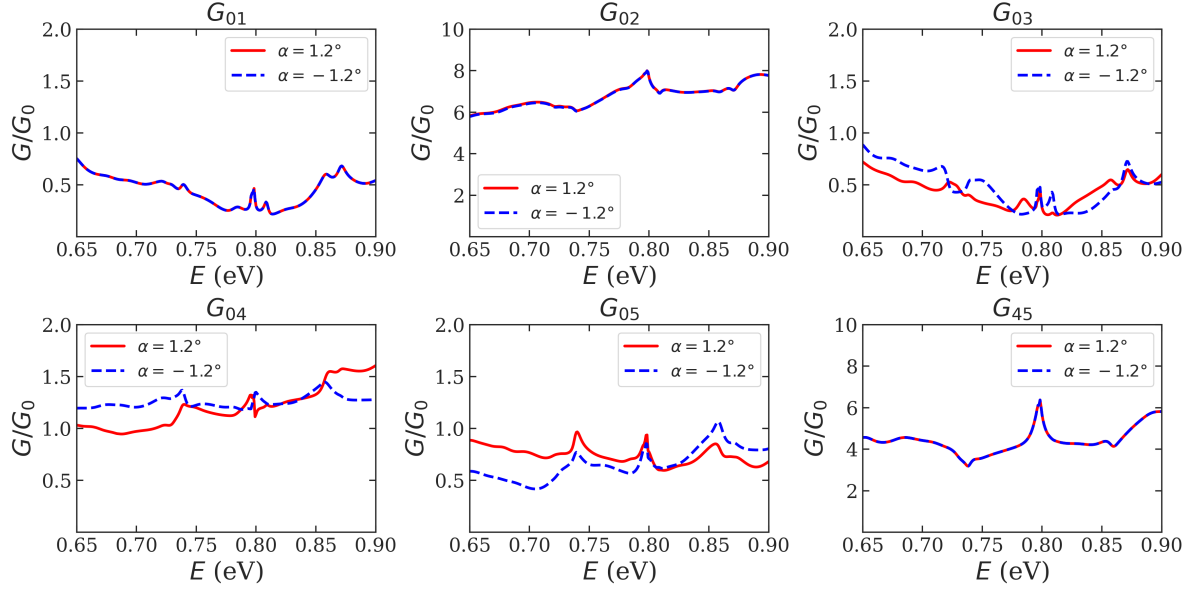
Dado que la señal quiral puede depender de la geometría de medición, se estudia una configuración con seis contactos. Esta geometría permite sondear canales de transmisión adicionales y evaluar resistencias no locales que involucran contactos con distinta ubicación y terminación cristalográfica. El propósito es establecer si la diferencia entre $\alpha = 1.2^\circ$ y $\alpha = -1.2^\circ$ persiste en ausencia de campo magnético cuando se modifica la disposición de terminales.

El dispositivo considerado tiene dimensiones $W = L = 30$ nm. Los contactos 0, 1 y 4 se acoplan a la capa inferior, mientras que los contactos 2, 3 y 5 se acoplan a la capa superior (figura 31). Todos los contactos se modelan como redes de grafeno ideales con acoplamiento de primeros vecinos t_0 . Los contactos 0, 1, 2 y 3 presentan bordes *armchair*, mientras que los contactos 4 y 5 corresponden a terminaciones *zigzag*.

La figura 32 muestra elementos de la matriz de conductancia para $\alpha = 1.2^\circ$ y $\alpha = -1.2^\circ$. Los canales G_{01} , G_{02} y G_{45} presentan curvas prácticamente equivalentes para ambas quiralidades. En cambio, G_{03} , G_{04} y G_{05} exhiben diferencias máximas normalizadas aproximadas de 0.25, 0.23 y 0.32, respectivamente. Estas diferencias indican que la respuesta quiral no se distribuye de manera homogénea entre todos los canales, sino que depende de la posición relativa de los contactos y del tipo de trayectoria que conecta terminales de capas distintas.

También se observan resonancias alrededor del CNP. Dentro de la resolución energética de la gráfica, la posición de los picos se conserva al invertir el signo de α , mientras que su amplitud puede cambiar en los canales sensibles a la quiralidad. Esto sugiere que las resonancias están asociadas a estados propios de la región de dispersión, pero el acoplamiento de dichos estados a los contactos depende de la orientación relativa entre las capas.

Figura 32. Elementos seleccionados de la matriz de conductancia en función de la energía $E \in [0.65, 0.9]$ eV para la bicapa de grafeno rotada con seis contactos. Se comparan las configuraciones $\alpha = 1.2^\circ$ y $\alpha = -1.2^\circ$ en ausencia de campo magnético externo.



La figura 33(a) muestra que $R_{01,23}$ es prácticamente idéntica para $\alpha = 1.2^\circ$ y $\alpha = -1.2^\circ$ en todo el intervalo de energía. Esta invariancia es coherente con la simetría observada en los canales de conductancia dominantes que participan en esta configuración de medida. En contraste, la resistencia $R_{01,45}$, figura 33(b), cambia de signo al invertir la quiralidad y alcanza valores aproximados de $\pm 0.05 h/e^2$. Esta respuesta antisimétrica indica que el par de contactos 4–5 actúa como una sonda sensible a la orientación quiral del patrón de moiré. La diferencia es más clara en la región de resonancias, lo que refuerza la conexión entre estados resonantes de la bicapa y transporte no local dependiente de quiralidad.

3.8. Configuración Hall

Hasta ahora se han considerado configuraciones en las que los contactos se distribuyen entre ambas capas. En esta sección se analiza una geometría tipo Hall en la que los cuatro contactos se acoplan exclusivamente a la capa inferior, como se ilustra en la figura 34. Los contactos 0 y 1 están orientados a lo largo de bordes *arm-*

Figura 33. (a) Resistencia no local $R_{01,23}$ y (b) resistencia $R_{01,45}$ en función de la energía $E \in [0.65, 0.9]$ eV para la bicapa de grafeno rotada con seis contactos. Se comparan $\alpha = 1.2^\circ$ (curva continua roja) y $\alpha = -1.2^\circ$ (curva discontinua azul).

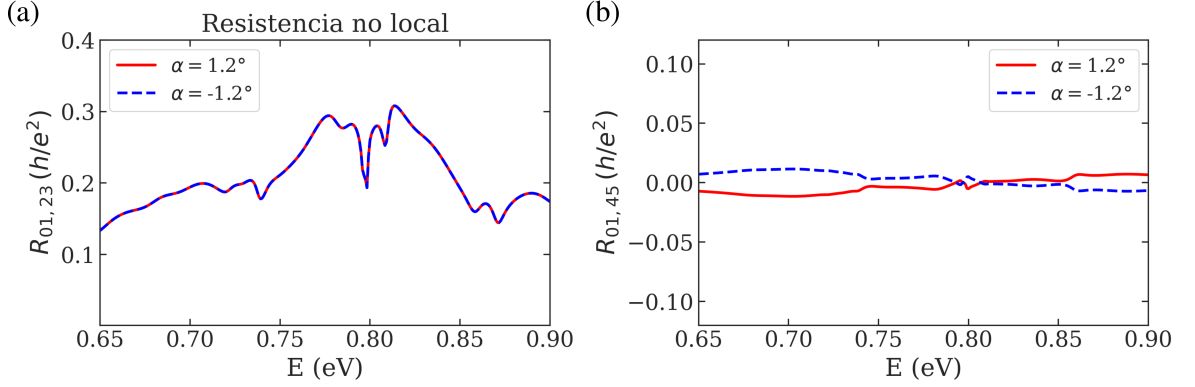
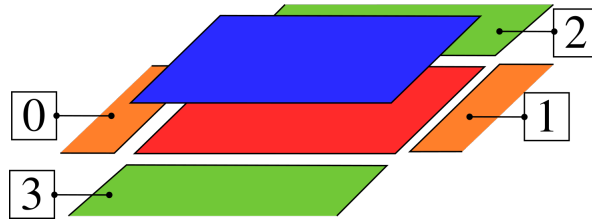


Figura 34. Geometría tipo Hall de la bicapa de grafeno rotada. Los cuatro contactos se acoplan a la capa inferior: los contactos 0 y 1 tienen bordes *armchair*, mientras que los contactos 2 y 3 tienen bordes *zigzag*. Los bordes *zigzag* de la capa superior se dopan con energías de sitio $U_i = 1000$ eV para desplazar los estados de borde fuera de la ventana energética de interés.

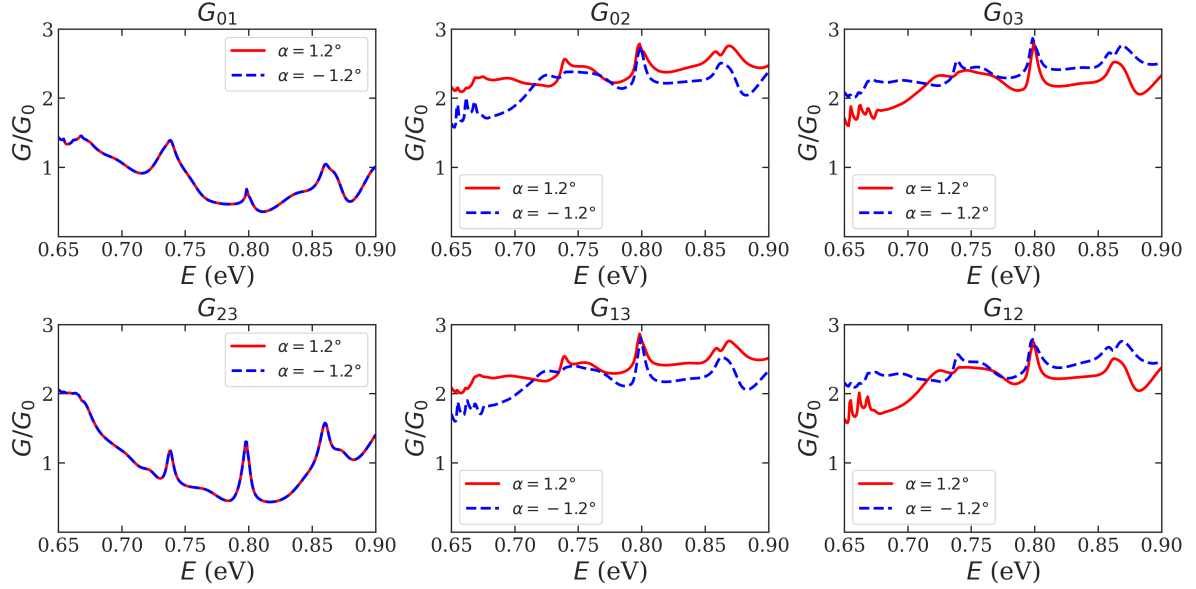


chair, mientras que los contactos 2 y 3 se ubican sobre bordes *zigzag*. Para evitar que estados de borde de la capa superior dominen la respuesta en la ventana energética estudiada, se introduce una energía de sitio $U_i = 1000$ eV en dichos bordes. Este potencial desplaza esos estados fuera del intervalo $E \in [0.65, 0.9]$ eV.

Se calcula la matriz de conductancia para $\alpha = 1.2^\circ$ y $\alpha = -1.2^\circ$ en ausencia de campo magnético externo. La finalidad es determinar si la sola quiralidad geométrica del patrón de moiré, combinada con una geometría de contactos que no es equivalente bajo reflexión, produce una respuesta transversal sensible al signo de α .

La figura 35 muestra que los elementos G_{01} y G_{23} permanecen prácticamente invariantes al invertir el ángulo de rotación. En cambio, G_{02} , G_{03} , G_{12} y G_{13} presentan diferencias visibles en amplitud y en forma espectral. Por ejemplo, para G_{02} la di-

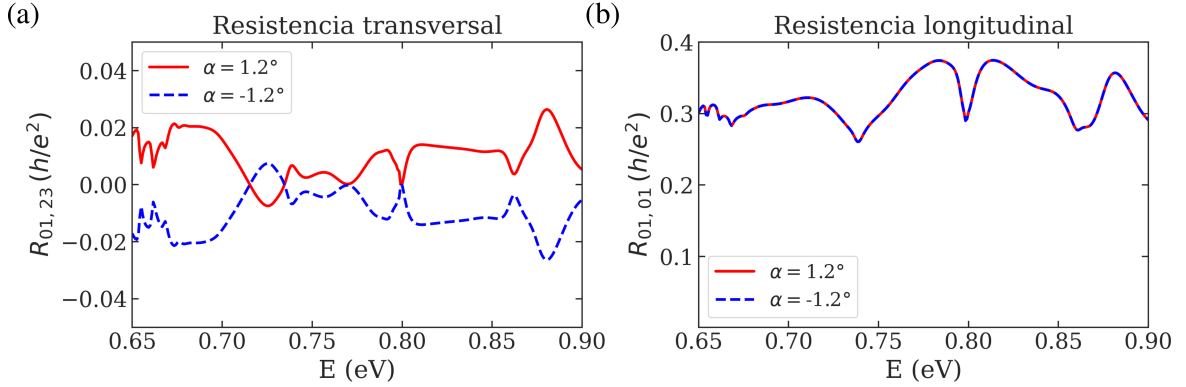
Figura 35. Comparación de los elementos de la parte triangular superior de la matriz de conductancia G en función de la energía $E \in [0.65, 0.9]$ eV para la geometría Hall de la figura 34, con campo magnético nulo ($B = 0$ T). Se muestran los resultados para $\alpha = 1.2^\circ$ y $\alpha = -1.2^\circ$.



ferencia máxima normalizada es cercana a 0.12. Esta diferencia puede atribuirse a que estos canales conectan contactos con orientaciones cristalográficas distintas o trayectorias geométricamente no equivalentes dentro de la región de dispersión. La posición energética de las resonancias principales no cambia de manera apreciable al invertir α , lo que indica que su origen está asociado a estados propios de la bicapa. Sin embargo, la amplitud de esas resonancias sí depende de la quiralidad en los canales asimétricos, lo que sugiere que el acoplamiento entre los estados resonantes y los contactos es sensible a la orientación del patrón de moiré.

3.8.1. Resistencia transversal y longitudinal La figura 36 presenta la resistencia transversal $R_{01,23} = (V_2 - V_3)/I_{01}$ y la resistencia longitudinal $R_{01,01} = (V_0 - V_1)/I_{01}$ para la configuración Hall. Se considera una corriente inyectada por el contacto 0 y extraída por el contacto 1, con $I_0 = -I_1 = I$, mientras que los contactos 2 y 3 actúan como sondas de voltaje, de modo que $I_2 = I_3 = 0$. En esta geometría, $R_{01,23}$ no corresponde a una respuesta de la capa superior ante una corriente en la ca-

Figura 36. (a) Resistencia transversal $R_{01,23}$ y (b) resistencia longitudinal $R_{01,01}$ en función de la energía $E \in [0.65, 0.9]$ eV para la bicapa de grafeno rotada con cuatro contactos acoplados a la capa inferior. Se comparan $\alpha = 1.2^\circ$ y $\alpha = -1.2^\circ$ en la geometría Hall de la figura 34.



pa inferior; más bien, es la resistencia transversal natural de la configuración Hall definida sobre la capa inferior.

La resistencia transversal $R_{01,23}$, figura 36(a), cambia de signo al invertir α . Este resultado indica que la respuesta transversal es sensible a la quiralidad de la bicapa. Desde el punto de vista geométrico, la transformación $\alpha \rightarrow -\alpha$ equivale a reflejar el patrón de moiré, pero no necesariamente deja invariante el dispositivo completo formado por región de dispersión y contactos. Por ello, la respuesta transversal puede ser antisimétrica aun en ausencia de campo magnético externo.

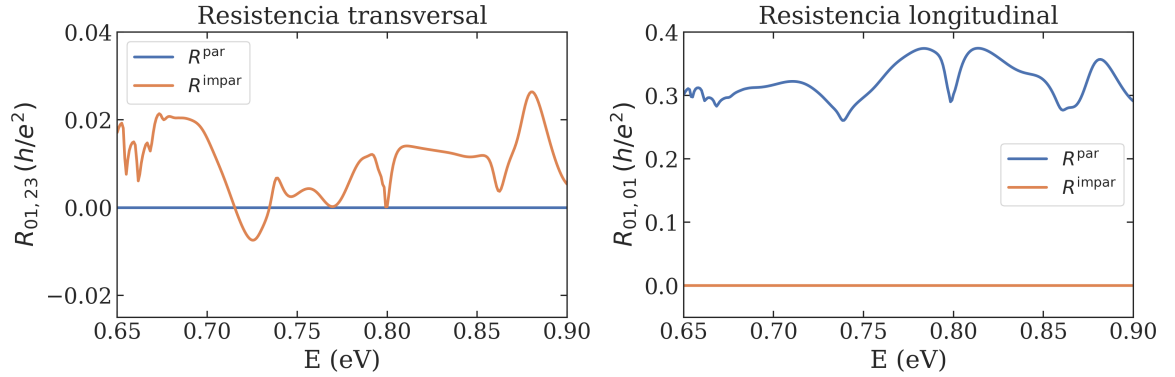
Por el contrario, la resistencia longitudinal $R_{01,01}$, figura 36(b), permanece prácticamente igual para $\alpha = 1.2^\circ$ y $\alpha = -1.2^\circ$. Esta invariancia es coherente con la superposición observada en G_{01} y sugiere que la respuesta local entre los contactos de inyección y drenaje está dominada por transmisión directa, menos sensible al sentido de rotación.

La resistencia puede descomponerse en una contribución par y una contribución impar bajo la inversión de quiralidad,

$$R^{\text{par}}(E; \alpha) = \frac{R(E; \alpha) + R(E; -\alpha)}{2}, \quad R^{\text{impar}}(E; \alpha) = \frac{R(E; \alpha) - R(E; -\alpha)}{2}. \quad (30)$$

Esta descomposición permite distinguir entre la parte que permanece invariante y la parte que cambia de signo al transformar $\alpha \rightarrow -\alpha$.

Figura 37. Descomposición par e impar de (a) la resistencia transversal $R_{01,23}$ y (b) la resistencia longitudinal $R_{01,01}$ en función de la energía $E \in [0.65, 0.9]$ eV para una bicapa de grafeno rotada con $\alpha = \pm 1.2^\circ$ en geometría Hall. La curva azul muestra la componente par $R^{\text{par}}(E)$ y la curva naranja la componente impar $R^{\text{impar}}(E)$.



La figura 37(a) muestra que la resistencia transversal $R_{01,23}$ está dominada por la componente impar bajo $\alpha \rightarrow -\alpha$, mientras que la componente par permanece cercana a cero. En cambio, la figura 37(b) muestra que la resistencia longitudinal $R_{01,01}$ está dominada por la componente par, con una componente impar despreciable. Esta separación confirma que, en la geometría Hall, la quiralidad se manifiesta principalmente como una redistribución transversal de potenciales, no como una modificación apreciable de la resistencia local longitudinal.

3.9. Discusión de resultados

3.9.1. Acoplamiento intercapa y estructura electrónica de la bicapa de grafeno

La caracterización inicial de la DOS permitió aislar el papel de los diferentes términos del Hamiltoniano *tight-binding*. Con primeros vecinos intracapa t_0 , la bicapa presenta una simetría electrón–hueco aproximada alrededor de $E = 0$ eV, coherente con la descripción usual del grafeno en el régimen de bajas energías⁸. Al incluir el siguiente vecino intracapa t_1 , el punto de neutralidad de carga se desplaza hasta aproximadamente 0.8 eV y la simetría electrón–hueco se rompe. Esta modificación es esperable porque t_1 conecta sitios de la misma subred y añade términos que

corrigen la dispersión efectiva⁴⁵.

El acoplamiento intercapa $t_0^\perp$ introduce canales adicionales de hibridación entre capas y enriquece la estructura espectral. Por tanto, antes de analizar la rotación, el modelo ya muestra que la posición del CNP y la aparición de resonancias dependen de los términos de *hopping* incluidos. Esta referencia energética es fundamental para interpretar los resultados posteriores, centrados en el intervalo cercano a $E \approx 0.8$ eV.

3.9.2. Efecto del ángulo de rotación sobre la DOS y la conductancia El efecto más notable de la rotación aparece para $\alpha = 1.2^\circ$, donde la DOS cerca del CNP aumenta de forma pronunciada. Este incremento es compatible con la formación de bandas casi planas asociadas al patrón de moiré cerca del primer ángulo mágico¹². A partir de las gráficas, la DOS para $\alpha = 1.2^\circ$ es varias veces mayor que para $\alpha = 4.4^\circ$ en la misma ventana energética, aunque el valor exacto debe entenderse como una estimación visual.

Al aumentar el ángulo de rotación, por ejemplo hacia 4.4° y 9.4° , la DOS se vuelve más suave y pierde el pico pronunciado cercano al CNP. Esto sugiere un debilitamiento progresivo del acoplamiento de moiré en la ventana de energía considerada. La conductancia no reproduce de manera automática todos los rasgos de la DOS, porque solo contribuyen de forma efectiva los estados que acoplan con los contactos y participan en canales propagantes³². Por ello, los picos espectrales deben relacionarse con el transporte de manera cuidadosa, considerando la geometría de contactos y la distribución espacial de la LDOS.

3.9.3. Resistencia y transporte no local La resistencia $R_{01,23}$ funciona como una sonda no local del acoplamiento entre capas cuando la corriente se inyecta en la capa inferior y el voltaje se mide en la capa superior. Los resultados muestran que esta resistencia es distinta de cero para ángulos cercanos a 0° y 60° , mientras que tiende a valores pequeños en el rango intermedio de ángulos. Esta tendencia es consistente con una hibridación intercapa más fuerte cerca de configuraciones

⁴⁵ WRIGHT, A R, LIU, Feng y ZHANG, C. The effect of next nearest neighbor coupling on the optical spectra in bilayer graphene. eng. En: Nanotechnology. England. 2009. Vol. 20, No. 40. p. 405203-405203.

de apilamiento equivalentes y con un desacoplamiento más efectivo en ángulos intermedios.

La dependencia con el tamaño del sistema indica que las oscilaciones de $R_{01,23}$ cambian de periodicidad angular al modificar las dimensiones laterales. Esta observación es compatible con efectos de interferencia coherente en una región finita, similares en espíritu a oscilaciones de Fabry-Pérot⁴⁶. Las oscilaciones dependen de la geometría, los contactos y la ventana energética estudiada.

Para sistemas de 30 nm, la mayor resolución espectral permite distinguir rasgos que pueden asociarse con singularidades de Van Hove alrededor de $E \approx 0.74$ eV y $E \approx 0.86$ eV para $\alpha = 1.2^\circ$. La asignación es compatible con la física esperada en bicapas rotadas¹², pero debe formularse de manera prudente, porque la DOS global y la conductancia no contienen por sí solas toda la información de dispersión en el espacio recíproco.

3.9.4. Efectos de la quiralidad en ausencia de campo magnético La quiralidad se analiza comparando configuraciones con α y $-\alpha$. En ausencia de campo magnético se cumple la reciprocidad $G_{pq} = G_{qp}$, pero esta simetría no obliga a que $G_{pq}(\alpha) = G_{pq}(-\alpha)$ para una geometría de contactos fija. En otras palabras, la reciprocidad bajo intercambio de terminales y la invariancia bajo inversión de quiralidad son propiedades diferentes.

Los elementos intracapa G_{01} y G_{23} son prácticamente idénticos para $\alpha = 1.2^\circ$ y $\alpha = -1.2^\circ$. En cambio, algunos elementos intercapa y diagonales, como G_{02} , G_{03} y G_{13} , muestran diferencias apreciables. Esta tendencia indica que la quiralidad afecta con mayor intensidad los procesos que involucran propagación entre capas o trayectorias geométricamente no equivalentes. En las resistencias, la sensibilidad quiral depende de la configuración de medición: $R_{01,23}$ y $R_{01,01}$ pueden ser invariantes en una geometría, mientras que $R_{03,03}$, $R_{01,45}$ o la resistencia transversal Hall pueden mostrar componentes impares bajo $\alpha \rightarrow -\alpha$.

Por tanto, el signo del ángulo de rotación actúa como un parámetro geométrico que modifica los patrones de interferencia y el acoplamiento de los estados de moiré con los contactos. Este efecto no debe presentarse como una ruptura general de la

⁴⁶ PORTOLÉS, Elías et al. Fabry-Pérot Cavities and Quantum Dot Formation at Gate-Defined Interfaces in Twisted Double Bilayer Graphene. En: arXiv preprint arXiv:2107.14299. 2021.

reciprocidad de Onsager–Casimir, sino como una asimetría geométrica dependiente de la quiralidad y de la configuración multiterminal.

3.9.5. Efectos del campo magnético externo El campo magnético *in-plane* permite explorar una respuesta magnetoquiral de origen orbital. Debido a la separación finita entre capas, la fase de Peierls en los términos intercapa genera una perturbación que puede distinguir entre configuraciones α y $-\alpha$. En la DOS, este efecto es más visible para $\alpha = 1.2^\circ$ que para $\alpha = 4.4^\circ$, lo cual es consistente con una mayor hibridación intercapa cerca del ángulo mágico.

En la conductancia, el campo *in-plane* produce diferencias dependientes del canal: algunos elementos permanecen casi invariantes y otros presentan contrastes claros entre quiralidades opuestas. La resistencia cruzada $R_{02,13}$ es la magnitud más sensible en esta configuración, pues muestra una componente aproximadamente lineal e impar en B cuyo signo cambia al invertir α . Esta respuesta es compatible con un efecto magnetoquiral orbital en el régimen lineal de transporte, dentro de las limitaciones del modelo sin espín.

El campo perpendicular, por su parte, reorganiza la DOS y modifica las conductancias mediante fases orbitales dentro del plano. Las diferencias entre α y $-\alpha$ son más moderadas en las resistencias analizadas, del orden de unos pocos por ciento para $R_{01,23}$, mientras que la resistencia longitudinal $R_{01,01}$ permanece casi invariante. En conjunto, los resultados muestran que la quiralidad no se manifiesta como una única señal universal, sino como una respuesta dependiente del campo aplicado, del canal de transmisión y de la geometría multiterminal seleccionada.

4. PUBLICACIONES Y EVENTOS

4.1. MATERIAL PUBLICADO Y EVENTOS

Como resultado de esta investigación, se presentaron los resultados en la modalidad de ponencia *XII Congreso Internacional de Materiales* (Medellin, Colombia-2024) y en modalidad de poster en el *31st International Materials Research Congress* (México-2023).

5. CONCLUSIONES

En esta tesis se estudió el transporte electrónico en bicapas de grafeno rotadas mediante un modelo *tight-binding* con acoplamientos dependientes de la distancia, introducidos en una forma tipo Slater–Koster, y mediante el formalismo multiterminal de Landauer–Büttiker. A partir de este marco se calcularon la densidad de estados (DOS), la densidad local de estados (LDOS), las matrices de conductancia y distintas resistencias multiterminales. El propósito central fue establecer cómo el acoplamiento intercapa, el ángulo de rotación, la geometría de los contactos y los campos magnéticos externos determinan la respuesta quiral de la bicapa. En conjunto, los resultados muestran que la quiralidad geométrica no produce una señal universal independiente de la medición, sino una respuesta selectiva que depende del canal de transporte, de la configuración multiterminal y de la forma en que se rompe la simetría de inversión temporal.

El análisis inicial de la bicapa sin rotación permitió fijar la referencia física para interpretar los resultados posteriores. Cuando se considera únicamente el acoplamiento intracapa de primeros vecinos, la DOS conserva la simetría electrón–hueco y el punto de neutralidad de carga se ubica en $E = 0$ eV. La inclusión de acoplamientos de segundos vecinos intracapa rompe esta simetría aproximada y desplaza el punto de neutralidad de carga hacia $E_{\text{CNP}} \approx 0.8$ eV, valor estimado a partir de las curvas de DOS reportadas en el capítulo de resultados. En consecuencia, la energía $E = 0.79$ eV empleada en varios mapas de LDOS y en el análisis de resistencias debe entenderse como una energía cercana al CNP dentro de la resolución numérica y gráfica del estudio. Por su parte, el acoplamiento intercapa $t_0^\perp$ introduce canales adicionales de hibridación entre capas, modifica la estructura espectral y permite que la respuesta de transporte distinga entre procesos intracapa e intercapa.

El ángulo de rotación α se identificó como el parámetro geométrico que controla de manera más directa la DOS, la LDOS y la matriz de conductancia. Para $\alpha = 1.2^\circ$, cercano al primer ángulo mágico del modelo de Bistritzer–MacDonald¹², la DOS presenta un aumento pronunciado alrededor del CNP, compatible con la acumulación de estados asociada a bandas casi planas. La LDOS evaluada cerca de $E = 0.79$ eV muestra que, en este régimen, el peso espectral se concentra preferentemente en dominios de apilamiento AA del patrón de moiré, cuya longitud característica es

grande en comparación con la escala atómica. Al aumentar el ángulo hacia 4.4° , 5.09° y 9.4° , la DOS se suaviza y las conductancias intercapa disminuyen, lo que es consistente con una reducción progresiva de la hibridación entre los conos de Dirac de ambas capas. En particular, para 9.4° los términos intercapa se reducen de forma marcada frente al caso de 1.2° , indicando un desacoplamiento efectivo dentro de la ventana energética estudiada.

Los resultados también muestran que la física relevante no se limita al entorno de 0° . En el intervalo de ángulos intermedios, incluyendo 27.795° , 30° y 38.21° , los elementos intercapa de la matriz de conductancia son pequeños, del orden de 10^{-3} en las curvas reportadas, pero no estrictamente nulos. El caso $\alpha = 30^\circ$ debe interpretarse con especial cuidado, porque corresponde a una estructura inconmensurable o cuasicristalina y no a una supercelda periódica ordinaria. Por otro lado, al aproximarse a 60° el acoplamiento intercapa reaparece, como se observa para ángulos como 58.8° , debido a la cercanía geométrica con configuraciones locales tipo AB/BA. Sin embargo, la respuesta no reproduce de manera idéntica el caso cercano a 0° , ya que cambian el apilamiento local dominante y la orientación relativa entre los contactos y las redes cristalinas de cada capa.

El estudio de tamaño finito permitió distinguir rasgos intrínsecos del sistema de posibles artefactos geométricos. Al comparar sistemas de $W = L = 10$ nm, 15 nm y 30 nm, se encontró que la acumulación de DOS cerca del CNP para $\alpha = 1.2^\circ$ persiste al aumentar el tamaño, lo que respalda su origen en la estructura electrónica de la bicapa rotada. Para $W = L = 30$ nm se identificaron, además, resonancias compatibles con singularidades de Van Hove alrededor de $E \approx 0.74$ eV y $E \approx 0.86$ eV. Estos valores provienen de la lectura de las curvas reportadas y, por tanto, deben considerarse aproximados. La resistencia no local $R_{01,23}$ mostró una dependencia angular no monótona y oscilatoria: la separación entre máximos locales se estimó como $\Delta\alpha \approx 2.2^\circ$ para 10 nm, $\Delta\alpha \approx 1.5^\circ$ para 15 nm y $\Delta\alpha \approx 0.7^\circ$ para 30 nm. Esta disminución de la escala angular con el tamaño es consistente con una interpretación de interferencia mesoscópica tipo Fabry–Pérot, en la cual la fase acumulada por los portadores depende de la longitud efectiva de propagación.

La comparación entre las configuraciones $+\alpha$ y $-\alpha$ permitió caracterizar la quiralidad geométrica de la bicapa. En ausencia de campo magnético se verificó la reciprocidad $G_{pq} = G_{qp}$, de acuerdo con las relaciones de Onsager–Casimir⁶⁷. Esta reciprocidad no implica, sin embargo, que cada elemento de conductancia sea idéntico.

tico al invertir el signo del ángulo. Para $\alpha = \pm 1.2^\circ$, los elementos intracapa G_{01} y G_{23} permanecen invariantes dentro de la precisión numérica, mientras que los canales intercapa muestran una sensibilidad dependiente de la geometría: G_{02} y G_{13} presentan diferencias leves, del orden de 4 %, y el canal diagonal G_{03} alcanza una diferencia máxima normalizada cercana a 0.35 en el intervalo energético analizado. En términos de resistencias, $R_{01,23}$, $R_{01,01}$ y $R_{02,13}$ permanecen prácticamente invariantes ante $\alpha \rightarrow -\alpha$, mientras que $R_{03,03}$ presenta diferencias pequeñas asociadas a la transferencia intercapa. Por tanto, en ausencia de campo externo la quiralidad actúa principalmente como una modulación geométrica selectiva de ciertos canales intercapa, sin constituir por sí sola una violación de la reciprocidad.

La aplicación de un campo magnético *in-plane* permitió amplificar parcialmente la sensibilidad quiral del sistema. En el modelo empleado, el campo se introduce mediante la fase de Peierls y afecta de manera orbital los acoplamientos intercapa debido a la separación finita entre las capas, $z_0 = 0.335$ nm. Como el Hamiltoniano usado es sin espín, no se incluye acoplamiento de Zeeman; por ello, las conclusiones asociadas al campo deben interpretarse como respuestas orbitales y no como efectos de polarización de espín. Para $\alpha = 1.2^\circ$, la DOS bajo campo *in-plane* desarrolla una estructura de doble pico que es consistente con el desdoblamiento orbital de estados híbridos intercapa. En cambio, para $\alpha = 4.4^\circ$ la diferencia máxima normalizada entre las DOS calculadas a $B = 0$ T y $B = 20$ T es menor que aproximadamente 5 %, lo que confirma la menor sensibilidad de este ángulo al acoplamiento orbital inducido por el campo.

Bajo un campo *in-plane* de 20 T, la matriz de conductancia presenta diferencias entre $\alpha = 1.2^\circ$ y $\alpha = -1.2^\circ$ en canales específicos. Cerca del CNP, el elemento G_{01} alcanza una diferencia máxima normalizada cercana a 0.15, mientras que algunos canales intercapa muestran diferencias aproximadas de 0.039 y 0.37, según el elemento considerado. En las resistencias, $R_{01,23}$ y $R_{01,01}$ permanecen casi invariantes frente al cambio de quiralidad, mientras que $R_{03,03}$ muestra una diferencia pequeña, cercana a 0.05 en la medida normalizada reportada. La magnitud más sensible fue la resistencia cruzada $R_{02,13}$: para $B = 20$ T presenta una diferencia máxima normalizada de aproximadamente 0.93 entre los dos enantiómeros, aunque su valor absoluto es menor que el de las demás resistencias analizadas. Al evaluarse en $E = 0.79$ eV como función de B , $R_{02,13}$ exhibe una dependencia aproximadamente lineal en el régimen de campo débil y satisface, dentro de la precisión numérica, la

relación $R_{02,13}(\alpha, B) \approx R_{02,13}(-\alpha, -B)$. Este comportamiento es consistente con una respuesta magnetoquiral orbital en el régimen lineal de transporte²²²¹.

El campo magnético perpendicular modifica el sistema por un mecanismo distinto. En este caso, las fases de Peierls actúan sobre trayectorias dentro del plano de las capas y reorganizan la DOS de forma compatible con una redistribución orbital asociada a niveles de Landau. Para $\alpha = 1.2^\circ$ y $B = 20$ T se observan diferencias entre las respuestas de $+\alpha$ y $-\alpha$, pero las resistencias muestran una sensibilidad quiral más moderada que en la resistencia cruzada bajo campo *in-plane*. En particular, $R_{01,23}$ presenta diferencias relativas del orden de pocos puntos porcentuales, con valores cercanos a 3 % en el intervalo analizado y alrededor de 2.3 % cerca del CNP, mientras que $R_{01,01}$ permanece prácticamente invariante. Este contraste indica que la orientación del campo externo y la elección del observable son determinantes para revelar o suprimir la señal quiral.

La extensión a una geometría de seis contactos confirmó que la detección de quiralidad depende fuertemente de la disposición de terminales. En esa configuración, los elementos G_{01} , G_{02} y G_{45} son esencialmente equivalentes para $\alpha = \pm 1.2^\circ$, mientras que G_{03} , G_{04} y G_{05} presentan diferencias máximas normalizadas aproximadas de 0.25, 0.23 y 0.32, respectivamente. La resistencia $R_{01,23}$ se mantiene simétrica frente al cambio de quiralidad, pero $R_{01,45}$ cambia de signo y alcanza valores aproximados de $\pm 0.05 h/e^2$. Esto muestra que la adición de contactos no solo incrementa el número de canales disponibles, sino que permite seleccionar combinaciones de terminales más sensibles a la asimetría geométrica del patrón de moiré.

La geometría tipo Hall proporcionó una prueba adicional de la relación entre quiralidad, contactos y respuesta transversal. En esta configuración, los cuatro contactos se acoplan a la capa inferior, con terminales longitudinales tipo *armchair* y terminales transversales tipo *zigzag*; además, se emplea una energía de sitio grande en los bordes zigzag de la capa superior para desplazar los estados de borde fuera de la ventana de transporte. Los resultados muestran que G_{01} y G_{23} son invariantes bajo $\alpha \rightarrow -\alpha$, mientras que los elementos que conectan contactos de terminación distinta, como G_{02} , G_{03} , G_{12} y G_{13} , son sensibles al signo de la rotación. De forma consistente, la resistencia transversal $R_{01,23}$ resulta predominantemente impar bajo $\alpha \rightarrow -\alpha$, mientras que la resistencia longitudinal $R_{01,01}$ es esencialmente par. Esta separación entre respuesta transversal impar y respuesta longitudinal par confirma que la quiralidad se manifiesta de manera más clara cuando la geometría de medi-

ción transforma la asimetría estructural en una señal de voltaje transversal.

Los resultados de esta tesis deben interpretarse dentro de las limitaciones del modelo considerado. Se trabajó con un Hamiltoniano de partícula independiente, sin interacciones electrón–electrón explícitas, sin espín, sin acoplamiento de Zeeman, sin relajación estructural, sin corrugación, sin desorden y con contactos ideales. Además, los campos magnéticos se aplicaron únicamente en la región de dispersión, manteniendo los contactos libres de campo. Estas decisiones fueron adecuadas para aislar el papel orbital de la quiralidad geométrica y de las fases de Peierls, pero delimitan el alcance cuantitativo de los resultados. Por esta razón, las diferencias porcentuales, energías características y periodicidades angulares leídas de las figuras deben entenderse como valores aproximados dentro de las configuraciones numéricas estudiadas, no como constantes universales del material.

Como perspectivas, resulta natural extender el modelo hacia sistemas con relajación de red, corrugación, desorden de borde, potencial electrostático autoconsistente, interacciones electrón–electrón y términos de espín, incluyendo Zeeman y posibles acoplamientos espín–órbita inducidos por sustratos. También sería útil analizar corrientes locales de enlace para conectar de manera más directa las señales multiterminales con trayectorias de propagación dentro del patrón de moiré. Desde el punto de vista experimental, los resultados sugieren que las mediciones más prometedoras para detectar quiralidad en TBG deben enfocarse en configuraciones no locales o transversales cuidadosamente diseñadas, en particular aquellas análogas a $R_{02,13}$ bajo campo magnético *in-plane* y a $R_{01,23}$ en geometría Hall.

En síntesis, la tesis muestra que la bicapa de grafeno rotada funciona como una plataforma mesoscópica en la que la geometría de moiré, el acoplamiento intercapa y la simetría de los contactos determinan la forma observable de la quiralidad. La señal quiral no aparece como una propiedad escalar única del sistema, sino como una respuesta de transporte dependiente del canal, del campo y de la configuración de medida. Esta conclusión refuerza la necesidad de interpretar las matrices de conductancia y las resistencias multiterminales de manera conjunta: solo así es posible distinguir entre reciprocidad, sensibilidad geométrica al enantiómero y respuesta magnetoquiral orbital.

BIBLIOGRAFÍA

- ANDREI, Eva Y y MACDONALD, Allan H. Graphene bilayers with a twist. En: Nature materials. 2020. Vol. 19, No. 12. p. 1265-1275 (vid. pág. 25).
- BAHAMON, Dario A., GÓMEZ-SANTOS, G. y STAUBER, T. Emergent magnetic texture in driven twisted bilayer graphene. En: Nanoscale. 2020. Vol. 12, No. 28. p. 15383–15392. DOI: 10.1039/d0nr02786c (vid. pág. 32).
- BAHAMON, Dario A. et al. Chirality Probe of Twisted Bilayer Graphene in the Linear Transport Regime. En: Nano Letters. 2024. Vol. 24, No. 15. PMID: 38584591. p. 4478-4484. DOI: 10.1021/acs.nanolett.4c00371. eprint: <https://doi.org/10.1021/acs.nanolett.4c00371> (vid. págs. 28, 85).
- BARRON, Laurence D. Chirality and life. En: Space Science Reviews. 2008. Vol. 135, No. 1. p. 187-201 (vid. pág. 23).
- BIGEARD, Gaëlle y CRESTI, Alessandro. Magic-angle twisted bilayer graphene under orthogonal and in-plane magnetic fields. En: Journal of Physics: Condensed Matter. 2024. Vol. 36, No. 32. p. 325502. DOI: 10.1088/1361-648X/ad4431 (vid. pág. 70).
- BISTRITZER, Rafi y MACDONALD, Allan H. Moiré bands in twisted double-layer graphene. En: Proceedings of the National Academy of Sciences of the United States of America. 2011. Vol. 108, No. 30. p. 12233-12237 (vid. págs. 25, 47, 78, 79, 82).
- BOWERS, K J, ALBRIGHT, J y YIN, L. Kwant: a software package for quantum transport. En: 2014. DOI: 10.1088/1367-2630/16/6/063065 (vid. pág. 29).
- BRIHUEGA, I. et al. Unraveling the Intrinsic and Robust Nature of van Hove Singularities in Twisted Bilayer Graphene by Scanning Tunneling Microscopy and Theoretical Analysis. En: Physical Review Letters. 2012. Vol. 109, No. 19. DOI: 10.1103/physrevlett.109.196802 (vid. pág. 31).

- BÜTTIKER, M. Four-Terminal Phase-Coherent Conductance. En: Phys. Rev. Lett. 1986. Vol. 57. p. 1761-1764. DOI: 10.1103/PhysRevLett.57.1761 (vid. pág. 34).
- BUTTIKER, M. Symmetry of electrical conduction. En: IBM Journal of Research and Development. 1988. Vol. 32, No. 3. p. 317-334. DOI: 10.1147/rd.323.0317 (vid. pág. 66).
- CAMPANERA, J. M. et al. Density functional calculations on the intricacies of Moiré patterns on graphite. En: Phys. Rev. B. 2007. Vol. 75. p. 235449. DOI: 10.1103/PhysRevB.75.235449 (vid. pág. 42).
- CAO, Yuan et al. Correlated insulator behaviour at half-filling in magic-angle graphene superlattices. En: Nature. 2018. Vol. 556, No. 7699. p. 80–84. DOI: 10.1038/nature26154 (vid. pág. 25).
- CASIMIR, H. B. G. On Onsager's Principle of Microscopic Reversibility. En: Rev. Mod. Phys. 1945. Vol. 17. p. 343-350. DOI: 10.1103/RevModPhys.17.343 (vid. págs. 24, 36, 83).
- CASTRO NETO, A. H. et al. The electronic properties of graphene. En: Rev. Mod. Phys. 2009. Vol. 81. p. 109-162. DOI: 10.1103/RevModPhys.81.109 (vid. págs. 24, 47, 77).
- CHU, Kai-Long et al. Transport properties in monolayer–bilayer–monolayer graphene planar junctions. En: Chinese Physics B. 2017. Vol. 26, No. 6. p. 067202. DOI: 10.1088/1674-1056/26/6/067202 (vid. págs. 36, 37).
- CRESTI, Alessandro. Convenient Peierls phase choice for periodic atomistic systems under magnetic field. En: Phys. Rev. B. 2021. Vol. 103. p. 045402. DOI: 10.1103/PhysRevB.103.045402 (vid. pág. 33).
- DATTA, Supriyo. Electronic Transport in Mesoscopic Systems. Cambridge Studies in Semiconductor Physics and Microelectronic Engineering. Cambridge University Press, 1995. DOI: 10.1017/CB09780511805776 (vid. págs. 33, 35, 36, 38-40, 78).

- ECONOMOU, Eleftherios N y CRETE, University of. Green's Functions in Quantum Physics. eng. Third Edition. Vol. 7. Springer Series in Solid-State Sciences. Berlin, Heidelberg: Springer-Verlag, 2006 (vid. pág. 38).
- FELSER, C. y GOOTH, J. Topology and Chirality. En: *Chiral Matter*. World Scientific, 2023. p. 115-141. DOI: 10.1142/9789811265068_0010. eprint: https://www.worldscientific.com/doi/pdf/10.1142/9789811265068_0010 (vid. pág. 23).
- FERRY, David K., GOODNICK, Stephen M. y BIRD, Jonathan. Transport in Nanostructures. 2.^a ed. Cambridge University Press, 2009 (vid. pág. 38).
- HE, Wen-Yu et al. Creating in-plane pseudomagnetic fields in excess of 1000 T by misoriented stacking in a graphene bilayer. En: Phys. Rev. B. 2014. Vol. 89. p. 125418. DOI: 10.1103/PhysRevB.89.125418 (vid. págs. 28, 63, 64).
- HUANG, Shengqiang et al. Topologically Protected Helical States in Minimally Twisted Bilayer Graphene. En: Physical Review Letters. 2018. Vol. 121, No. 3. DOI: 10.1103/physrevlett.121.037702 (vid. pág. 26).
- IDEUE, Toshiya e IWASA, Yoshihiro. Symmetry Breaking and Nonlinear Electric Transport in van der Waals Nanostructures. En: Annual Review of Condensed Matter Physics. 2021. Vol. 12, No. Volume 12. p. 201-223. DOI: <https://doi.org/10.1146/annurev-conmatphys-060220-100347> (vid. pág. 25).
- LAISSARDIÈRE, G. Trambly de, MAYOU, D. y MAGAUD, L. Localization of Dirac Electrons in Rotated Graphene Bilayers. En: Nano Letters. 2010. Vol. 10, No. 3. PMID: 20121163. p. 804-808. DOI: 10.1021/nl902948m. eprint: <https://doi.org/10.1021/nl902948m> (vid. pág. 40).
- LEWENKOPF, Caio H. y MUCCIOLO, Eduardo R. The recursive Green's function method for graphene. En: Journal of Computational Electronics. 2013. Vol. 12, No. 2. p. 203-231. DOI: 10.1007/s10825-013-0458-7 (vid. pág. 30).

- LIU, Yizhou, HOLDER, Tobias y YAN, Binghai. Chirality-Induced Giant Unidirectional Magnetoresistance in Twisted Bilayer Graphene. En: The Innovation. 2021. Vol. 2, No. 1. p. 100085. DOI: 10.1016/j.xinn.2021.100085 (vid. págs. 28, 63, 85).
- MOON, Pilkyung y KOSHINO, Mikito. Energy spectrum and quantum Hall effect in twisted bilayer graphene. En: Physical Review B. 2012. Vol. 85, No. 19. DOI: 10.1103/physrevb.85.195458 (vid. pág. 31).
- MOON, Pilkyung, KOSHINO, Mikito y SON, Young-Woo. Quasicrystalline electronic states in 30° rotated twisted bilayer graphene. En: Phys. Rev. B. 2019. Vol. 99. p. 165430. DOI: 10.1103/PhysRevB.99.165430 (vid. págs. 26, 97, 100).
- ONSAGER, Lars. Reciprocal Relations in Irreversible Processes. I. En: Phys. Rev. 1931. Vol. 37. p. 405-426. DOI: 10.1103/PhysRev.37.405 (vid. págs. 24, 36, 50, 83).
- Reciprocal Relations in Irreversible Processes. I. En: Phys. Rev. 1931. Vol. 37. p. 405-426. DOI: 10.1103/PhysRev.37.405 (vid. pág. 93).
- PERSHOGUBA, Sergey S. y YAKOVENKO, Victor M. Energy spectrum of graphene multilayers in a parallel magnetic field. En: Phys. Rev. B. 2010. Vol. 82. p. 205408. DOI: 10.1103/PhysRevB.82.205408 (vid. págs. 28, 64).
- PORTOLÉS, Elías et al. Fabry-Pérot Cavities and Quantum Dot Formation at Gate-Defined Interfaces in Twisted Double Bilayer Graphene. En: arXiv preprint arXiv:2107.14299. 2021 (vid. pág. 79).
- QIAN, You et al. The effects of interlayer mismatch on electronic properties of bilayer armchair graphene nanoribbons. En: Carbon. 2012. Vol. 50, No. 4. p. 1659-1666. DOI: <https://doi.org/10.1016/j.carbon.2011.12.007> (vid. pág. 37).
- REN, Ya-Ning et al. Twistronics in graphene-based van der Waals structures. En: Chinese Physics B. 2020. Vol. 29, No. 11. p. 117303. DOI: 10.1088/1674-1056/abbbe2 (vid. pág. 26).

- SANJUAN CIEPIELEWSKI, Aleksander et al. Transport signatures of Van Hove singularities in mesoscopic twisted bilayer graphene. En: Phys. Rev. Res. 2022. Vol. 4. p. 043145. DOI: 10.1103/PhysRevResearch.4.043145 (vid. pág. 27).
- SANTOS, J. M. B. Lopes dos, PERES, N. M. R. y CASTRO NETO, A. H. Graphene Bilayer with a Twist: Electronic Structure. En: Phys. Rev. Lett. 2007. Vol. 99. p. 256802. DOI: 10.1103/PhysRevLett.99.256802 (vid. págs. 48, 51).
- SLATER, J. C. y KOSTER, G. F. Simplified LCAO Method for the Periodic Potential Problem. eng. En: Physical review. 1954. Vol. 94, No. 6. p. 1498-1524 (vid. pág. 32).
- STONE, A. Douglas y SZAFER, Aaron. What is measured when you measure a resistance?—The Landauer formula revisited. En: IBM Journal of Research and Development. 1988. Vol. 32, No. 3. p. 384-413. DOI: 10.1147/rd.323.0384 (vid. pág. 38).
- UTAMA, M. Iqbal Bakti et al. Visualization of the flat electronic band in twisted bilayer graphene near the magic angle twist. eng. En: Nature physics. London. 2021. Vol. 17, No. 2. p. 184-188 (vid. pág. 26).
- WANG, Jing y ZHANG, Shou-Cheng. Topological states of condensed matter. En: Nature materials. 2017. Vol. 16, No. 11. p. 1062-1067 (vid. pág. 23).
- WRIGHT, A R, LIU, Feng y ZHANG, C. The effect of next nearest neighbor coupling on the optical spectra in bilayer graphene. eng. En: Nanotechnology. England. 2009. Vol. 20, No. 40. p. 405203-405203 (vid. pág. 78).
- XU, S. G. et al. Giant oscillations in a triangular network of one-dimensional states in marginally twisted graphene. En: Nature Communications. 2019. Vol. 10, No. 1. DOI: 10.1038/s41467-019-11971-7 (vid. pág. 26).
- YAN, Binghai. Structural Chirality and Electronic Chirality in Quantum Materials. En: Annual Review of Materials Research. 2024. Vol. 54, No. Volume 54, 2024. p.

97-115. DOI: <https://doi.org/10.1146/annurev-matsci-080222-033548> (vid. pág. 23).

YANANOSE, Kunihiro et al. Chirality-induced spin texture switching in twisted bilayer graphene. En: Phys. Rev. B. 2021. Vol. 104. p. 075407. DOI: 10.1103/PhysRevB.104.075407 (vid. pág. 25).

YANG, See-Hun et al. Chiral spintronics. En: Nature Reviews Physics. 2021. Vol. 3, No. 5. p. 328-343. DOI: 10.1038/s42254-021-00302-9 (vid. pág. 23).

ZHANG, Shuai et al. Abnormal conductivity in low-angle twisted bilayer graphene. En: Science Advances. 2020. Vol. 6, No. 47. p. eabc5555. DOI: 10.1126/sciadv.abc5555. eprint: <https://www.science.org/doi/pdf/10.1126/sciadv.abc5555> (vid. pág. 27).

ZHENG, Jiaxin et al. Interfacial Properties of Bilayer and Trilayer Graphene on Metal Substrates. English. En: Scientific Reports (Nature Publisher Group). jun. de 2013. Vol. 3. Copyright - Copyright Nature Publishing Group Jun 2013; Última actualización - 2024-10-04; SubjectsTermNotLitGenreText - Environmental. p. 2081 (vid. pág. 37).

ANEXOS

Anexo A. RELACIONES DE RECIPROCIDAD

Simetría en la matriz de conductancia

En el cuerpo principal de este trabajo, se ha presentado la relación de reciprocidad propuesta por Onsager⁴⁷, la cual establece que, en ausencia de campos magnéticos y bajo condiciones de equilibrio, los coeficientes de conductancia satisfacen la relación

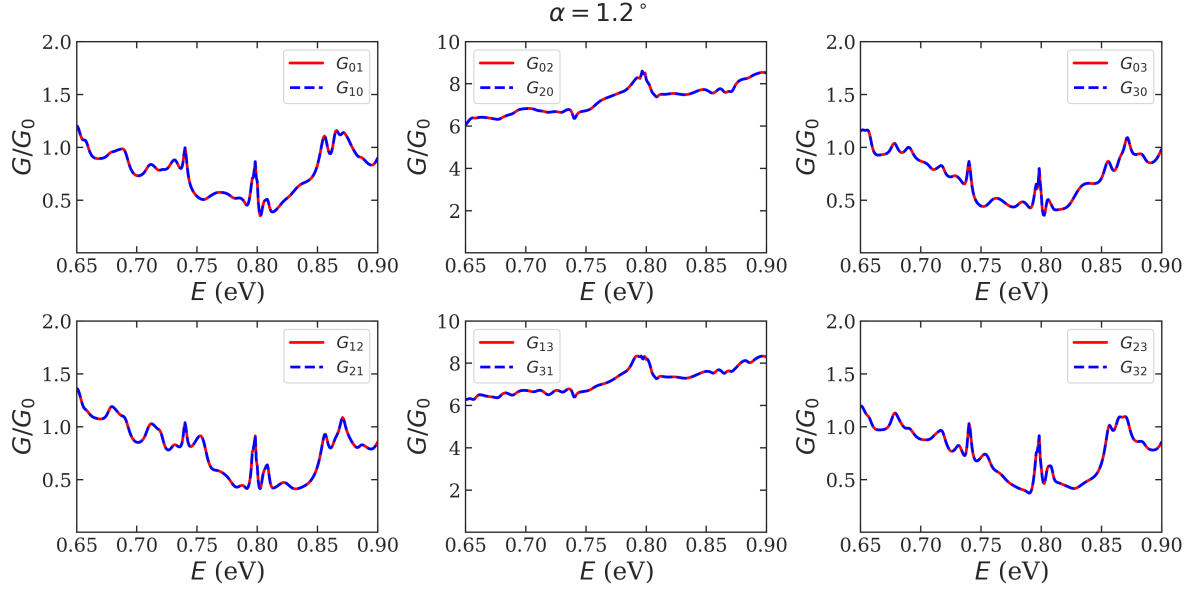
$$G_{pq} = G_{qp}.$$

A continuación, se demuestra numéricamente esta relación de reciprocidad, con el fin de validar la aproximación *tight-binding* implementada en este trabajo. En primer lugar, la figura 38 muestra los elementos de la matriz de conductancia G en función de la energía $E \in [0.65, 0.9]$ eV, para la bicapa de grafeno con ángulo de rotación $\alpha = 1.2^\circ$, en ausencia de campo magnético y cuatro contactos con terminación cristalográfica armchair (véase la figura 9(a)). Se observa cualitativamente que las curvas de conductancia G_{pq} (líneas rojas) se superponen sobre las curvas G_{qp} (líneas azules). La diferencia máxima normalizada entre las curvas en todos los casos es 0, lo que evidencia la naturaleza simétrica de la matriz de conductancia y confirma el cumplimiento de la relación de reciprocidad $G_{pq}(\alpha) = G_{qp}(\alpha)$.

Además se determinó la validez de la simetría en la matriz de conductancia para dos configuraciones más, estudiadas en el cuerpo del trabajo. La figura 39 muestra los elementos de la matriz de conductancia G en función de la energía $E \in [0.65, 0.9]$ eV, para la bicapa de grafeno con ángulo de rotación $\alpha = 1.2^\circ$, en ausencia de campo magnético y cuatro contactos en configuración Hall (véase la figura 34). Se observa que las curvas para G_{pq} son equivalentes a G_{qp} , es decir, $G_{pq}(\alpha) = G_{qp}(\alpha)$. En la figura 40 se presentan los resultados de conductancia para el sistema de bicapa de grafeno de seis contactos con ángulo de rotación $\alpha = 1.2^\circ$, donde se verifica

⁴⁷ ONSAGER, Lars. Reciprocal Relations in Irreversible Processes. I. En: Phys. Rev. 1931. Vol. 37. p. 405-426. DOI: 10.1103/PhysRev.37.405.

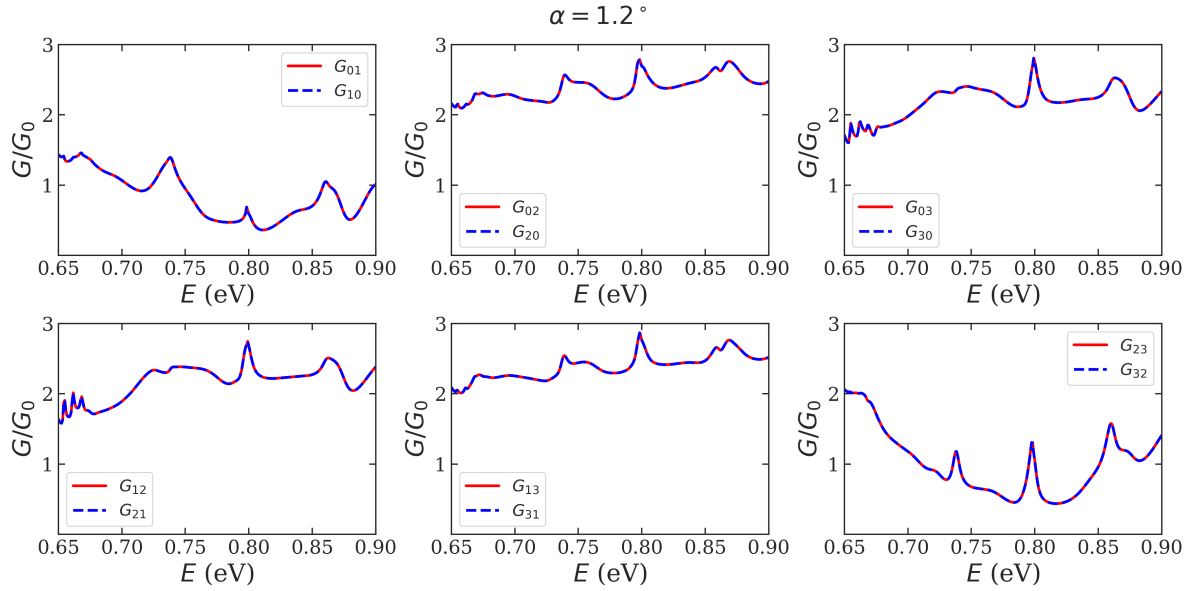
Figura 38. Elementos de la matriz de conductancia en función de la energía $E \in [0.65, 0.9]$ eV, para la bicapa de grafeno con ángulo de rotación $\alpha = 1.2^\circ$, de dimensiones $W = L = 30$ nm, con cuatro contactos cuya terminación cristalográfica es armchair (véase la figura 9(b)), en ausencia de campo magnético. Se cumple la relación simétrica de reciprocidad $G_{pq}(\alpha) = G_{qp}(\alpha)$ en ausencia de campo magnético.



la relación de reciprocidad $G_{pq} = G_{qp}$ para distintos pares de contactos. Cada panel muestra la conductancia normalizada G/G_0 en función de la energía E (eV) en el rango de 0.65 a 0.90 eV, comparando los coeficientes de transmisión entre pares de terminales: $G_{01}(G_{10})$, $G_{02}(G_{20})$, $G_{03}(G_{30})$, $G_{04}(G_{40})$, $G_{05}(G_{50})$ y $G_{45}(G_{54})$. En todos los paneles, la curva roja sólida y la curva azul discontinua se superponen perfectamente a lo largo de todo el intervalo de energía analizado (diferencia máxima normalizada punto a punto 0), lo que constituye una verificación numérica robusta del teorema de reciprocidad de Onsager en el transporte electrónico del sistema.

Cabe destacar que los distintos pares de contactos exhiben valores y perfiles de conductancia notablemente diferentes entre sí. En todos los casos se observan fluctuaciones y resonancias pronunciadas en la conductancia como función de la energía, características que son propias del régimen de transporte mesoscópico en sistemas de grafeno de ángulo mágico, donde la presencia de bandas planas cerca del nivel de Fermi favorece procesos de dispersión múltiple y la aparición de estados

Figura 39. Elementos de la matriz de conductancia en función de la energía $E \in [0.65, 0.9]$ eV, para la bicapa de grafeno con ángulo de rotación $\alpha = 1.2^\circ$, de dimensiones $W = L = 30$ nm, con configuración Hall (véase la figura 34), en ausencia de campo magnético. Se cumple la relación simétrica de reciprocidad $G_{pq}(\alpha) = G_{qp}(\alpha)$ en ausencia de campo magnético.



cuasi-localizados.

Relaciones de reciprocidad con campo magnético

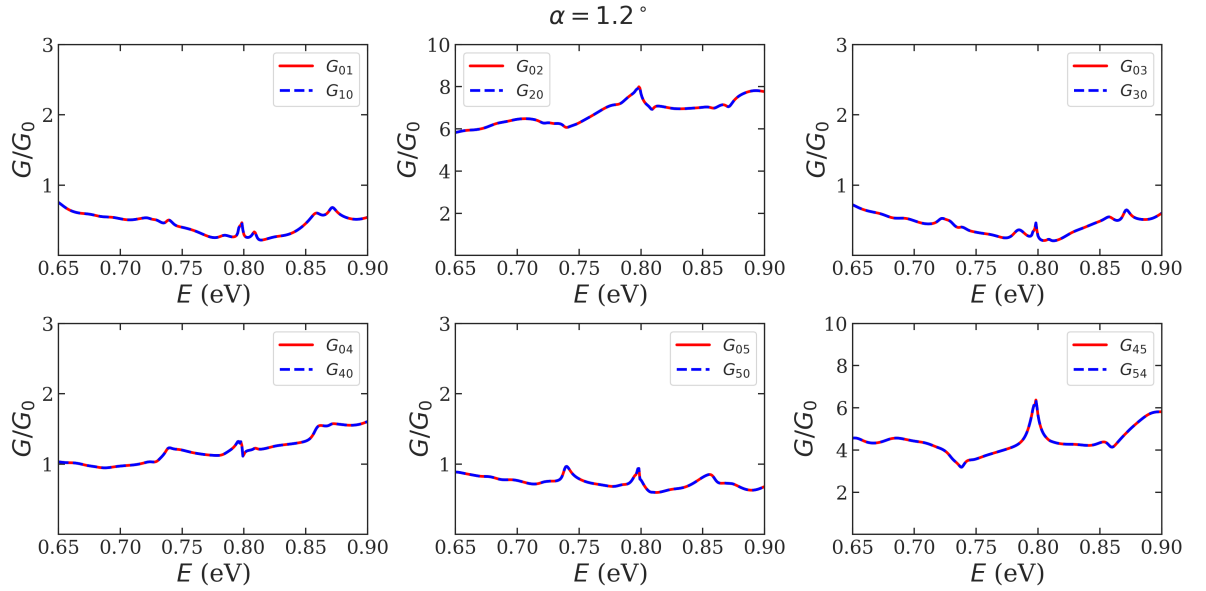
Cuando se aplica un campo magnético externo a la bicapa de grafeno rotada, la simetría de inversión temporal se rompe, y en consecuencia la relación de reciprocidad adopta la forma

$$G_{pq}(\alpha, B) = G_{qp}(\alpha, -B).$$

La figura 41 muestra los elementos representativos de la conductancia intracapa e intercapa de la bicapa de grafeno rotada con bordes armchair, para el ángulo de rotación $\alpha = 1.2^\circ$, bajo el efecto de dos campos magnéticos opuestos *in-plane* $B = \pm 20$ T. Se observa que las curvas se superponen en todo el espectro energético considerado al aplicar la transformación $B \rightarrow -B$, lo que confirma numéricamente el cumplimiento de la relación de reciprocidad generalizada.

Finalmente, La figura 42 muestra dos paneles que verifican la relación de reciproci-

Figura 40. Elementos de la matriz de conductancia en función de la energía $E \in [0.65, 0.9]$ eV, para la bicapa de grafeno con ángulo de rotación $\alpha = 1.2^\circ$, de dimensiones $W = L = 30$ nm, con seis contactos (véase la figura 31), en ausencia de campo magnético. Se cumple la relación simétrica de reciprocidad $G_{pq}(\alpha) = G_{qp}(\alpha)$ en ausencia de campo magnético.

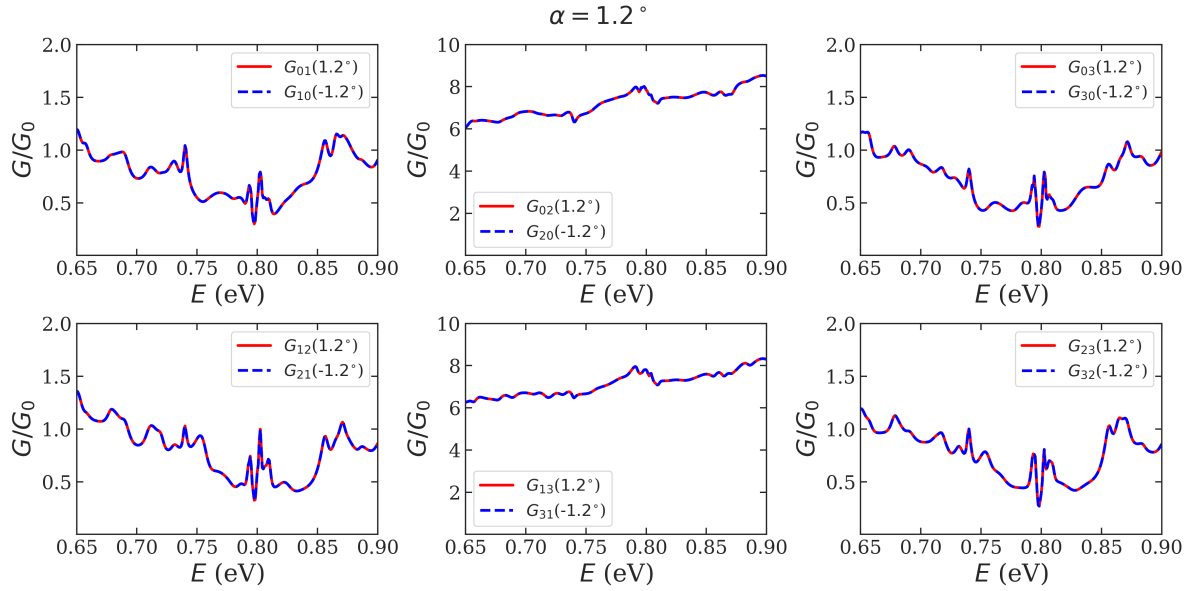


dad en medidas de resistencia de cuatro terminales, en un sistema de grafeno de doble capa con ángulo de giro $\alpha = 1.2^\circ$ y bajo campo magnético *in-plane*. La figura 42(a) muestra las resistencias no locales $R_{01,23}(20 \text{ T})$ y $R_{23,01}(-20 \text{ T})$. Ambas curvas se superponen casi perfectamente en todo el rango de energía (0.65–0.90 eV), lo que confirma la relación de reciprocidad para esta configuración de contactos. Por otro lado, la figura 42(b) muestra las resistencias cruzadas $R_{02,13}(20 \text{ T})$ y $R_{13,02}(-20 \text{ T})$. Nuevamente, las dos curvas coinciden con gran precisión. La superposición entre ambas curvas en los dos paneles verifica numéricamente que:

$$R_{pq,kl}(\alpha, B) = R_{kl,pq}(\alpha, -B),$$

que es la forma general del teorema de reciprocidad de Onsager en presencia de campo magnético. La excelente concordancia entre las curvas roja y azul en ambos paneles valida la consistencia del cálculo y la correcta implementación de la simetría de inversión temporal en el formalismo de transporte utilizado.

Figura 41. Elementos de la matriz de conductancia en función de la energía $E \in [0.65, 0.9]$ eV, para la bicapa de grafeno con ángulo de rotación $\alpha = 1.2^\circ$, de dimensiones $W = L = 30$ nm, con cuatro contactos (véase la figura 9(b)), en presencia de un campo magnético *in-plane* de magnitud $B = 20$ T. Se cumple la relación simétrica de reciprocidad $G_{pq}(\alpha, B) = G_{qp}(\alpha, -B)$.



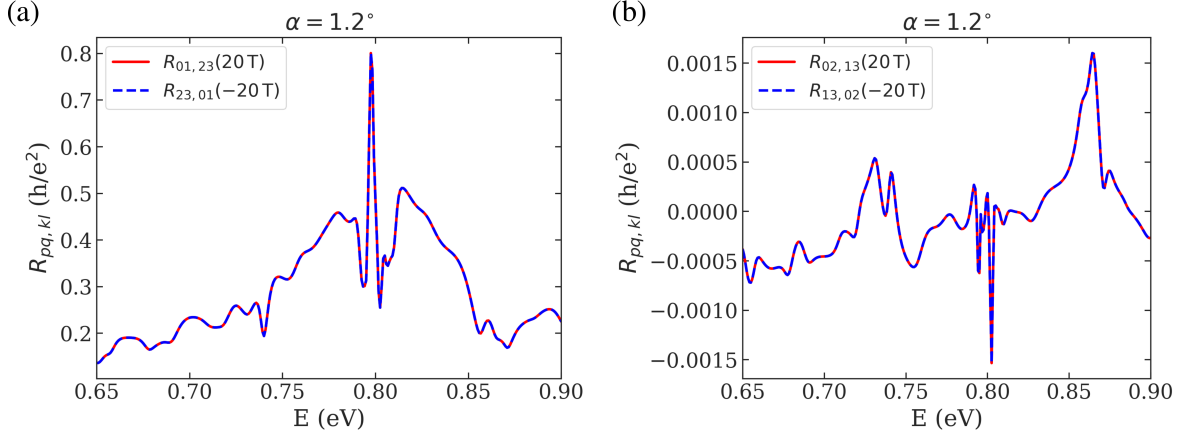
Anexo B. ÁNGULOS INCONMENSURABLES

Cuasicristales basados en bicapas de grafeno rotadas

En el trabajo principal se han caracterizado los ángulos conmensurables; sin embargo, resulta pertinente considerar el caso de ángulos de rotación inconmensurables. Como se mencionó anteriormente corresponden a configuraciones para las cuales no es posible definir una estructura periódica y que no se pueden definir a partir de la ecuación 20. En particular, cuando las capas poseen un ángulo de rotación relativo $\alpha = 30^\circ$ emerge un comportamiento cuasi-cristalino, es decir, los patrones de moiré no poseen ningún tipo de periodicidad de traslación, pero sí poseen simetría rotacional de orden 12¹⁸.

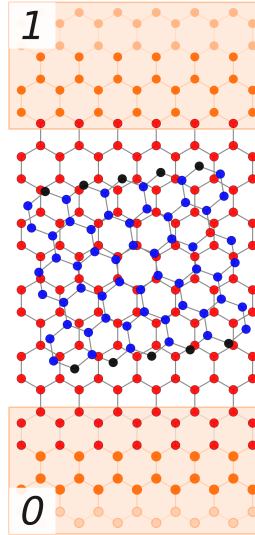
Para estudiar el efecto de este régimen cuasi-cristalino, se considera una bicapa de grafeno rotada en la que la capa inferior tiene dimensiones aproximadas de $\sim 20 \times 20$ nm², mientras que la capa superior presenta dimensiones de $\sim 14 \times 14$

Figura 42. Relación de reciprocidad $R_{pq,kl}(B) = R_{kl,pq}(-B)$ para la bicapa de grafeno rotada con contactos armchair bajo un campo magnético *in-plane* uniforme B . Los resultados se muestran para el ángulo de rotación $\alpha = 1.2^\circ$ bajo la acción de un campo magnético orientado en diferentes direcciones $\mathbf{B} = 20\hat{y}$ y $-20\hat{y}$.



nm^2 . El sistema incorpora dos contactos metálicos ideales (enumerados como 0 y 1) acoplados en los bordes, tal como se ilustra en la Figura 43. Cada contacto se modela como un electrodo de grafeno semi-infinito con bordes armchair y ancho 20 nm. En la geometría adoptado, la capa inferior de la bicapa se alinea de modo que sus bordes armchair queden paralelos a dichos contactos, mientras que la capa superior se rota un ángulo α respecto a esa orientación fija. El apilamiento entre las capas es tipo AA, cuando el ángulo de rotación $\alpha = 0^\circ$. Adicionalmente, los bordes zigzag de la capa superior están sometidos a una energía de sitio $U_i = 1000$ eV en el hamiltoniano *tight-binding*, con el fin de suprimir los estados de borde. Este potencial desplaza los estados electrónicos asociados al borde fuera de la ventana de energía relevante para el transporte, suprimiendo así la contribución de los estados de borde. Finalmente, en todo el sistema (región de dispersión + contactos) se incluyeron los parámetros de hopping correspondientes a vecinos j cuya distancia al sitio i satisface $d_{ij} \leq 4a$ (aproximadamente 0.568 nm; véase la figura 4(b)).

Figura 43. Esquema del dispositivo considerado para el cálculo de transporte en estructuras cuasi-cristalinas. Una bicapa de grafeno rotada, donde la capa inferior tiene dimensiones aproximadas de $\sim 20 \times 20 \text{ nm}^2$, mientras que la capa superior tiene dimensiones de $\sim 14 \times 14 \text{ nm}^2$. Se conectan dos contactos metálicos ideales, etiquetados como 0 y 1, acoplados en los bordes inferior y superior, respectivamente. Los contactos se modelan como electrodos de grafeno semi-infinitos, mientras que la región central corresponde a la bicapa rotada. Los colores distinguen los átomos pertenecientes a cada capa, y la numeración indica la asignación de los contactos utilizados para la inyección y recolección de corriente. La energía de sitio asignada a los bordes zigzag de la capa superior (puntos negros) es $U_i = 1000 \text{ eV}$.



Densidad de estados y conductancia

En secciones previas se analizó la conductancia del sistema en las proximidades del punto de neutralidad de carga, donde la baja densidad de estados conduce a un régimen de transporte característico de un sistema débilmente acoplado (ver sección 3.2). En este régimen, la respuesta conductiva está dominada por procesos de transmisión limitados y una reducida hibridación entre capas. En lo que sigue, se extiende el análisis de la conductancia a otros rangos de energía, con el fin de explorar cómo la evolución del acoplamiento intercapas y de los canales de transporte modifica la respuesta del sistema. En la figura 44, muestra la conductancias normalizada G/G_0 (panel superior) y la densidad de estados DOS (panel inferior) en función de la energía en el intervalo de energías $E \in [-1.3, -0.5]$, para dos configuraciones an-

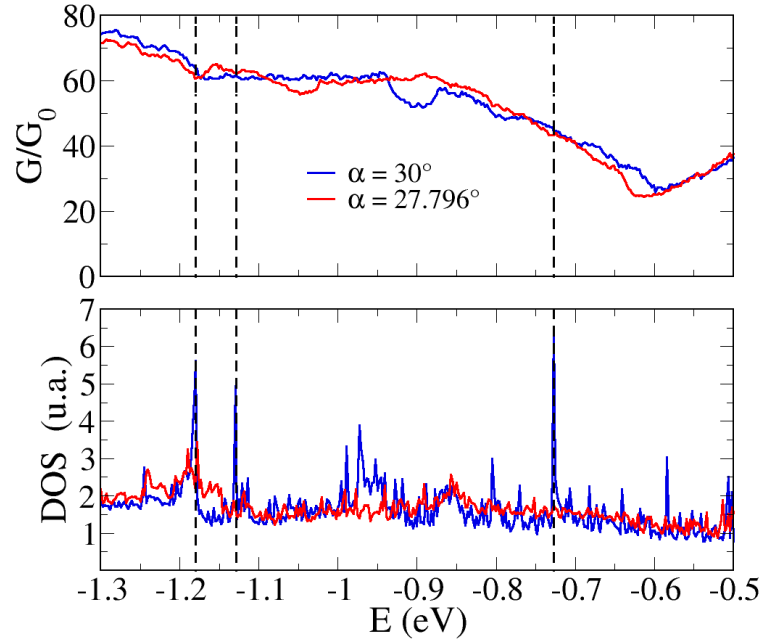
gulares: un ángulo inconmensurables $\alpha = 30^\circ$ y un ángulo conmensurable cercano $\alpha = 27.796^\circ$.

En el intervalo energético analizado, ambas configuraciones presentan una evolución global similar de la conductancia, lo que sugiere que el transporte está dominado por mecanismos comparables en ambos casos. No obstante, se observan diferencias locales asociadas a estructuras finas en la DOS. En particular, los picos pronunciados en la densidad de estados (señalados por las líneas verticales discontinuas) es más evidente para el ángulo inconmensurable, donde la DOS exhibe fluctuaciones más marcadas y picos más agudos, consistentes con la ausencia de periodicidad traslacional y con la naturaleza cuasicristalina del patrón de moiré. Cabe destacar que los picos agudos en la densidad de estados observados para el ángulo inconmensurable $\alpha = 30^\circ$ han sido evidenciados previamente en estudios teóricos de bicapas de grafeno cuasicristalinas. En dichos trabajos, estas singularidades espectrales se atribuyen a la interferencia cuasiperiódica entre los estados electrónicos de ambas capas y a la simetría rotacional de orden doce característica de esta configuración¹⁸.

A pesar de estas diferencias locales, la cercanía y similitud entre las curvas de conductancia para ambos ángulos sugiere que, en este régimen energético, la respuesta conductiva está gobernada principalmente por propiedades promedio del acoplamiento intercapas, más que por la conmensurabilidad exacta del ángulo de rotación. Esto indica que, lejos del punto de neutralidad de carga, el sistema transita hacia un régimen en el cual las diferencias entre configuraciones conmensurables e inconmensurables se atenúan en la respuesta de transporte, aun cuando persisten contrastes en la estructura espectral.

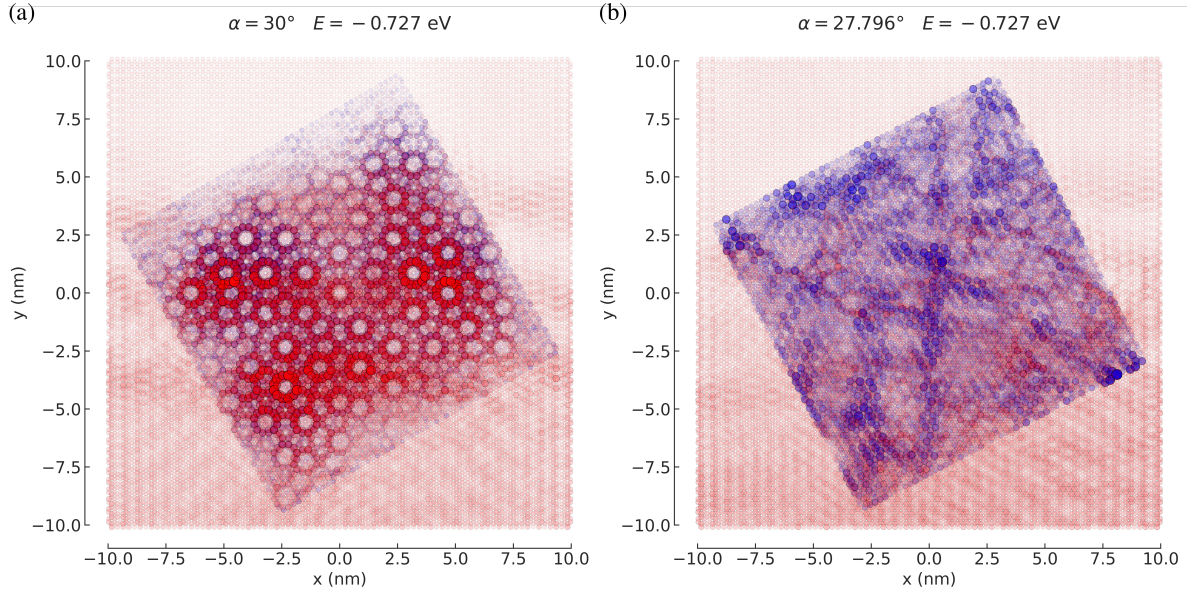
La Figura 45 muestra los mapas de la densidad local de estados normalizada (LDOS) calculados a la energía $E = -0.727$ eV, correspondiente a uno de los picos más pronunciados en la densidad de estados total (DOS), para (a) el ángulo inconmensurable $\alpha = 30^\circ$ y (b) el ángulo conmensurable cercano $\alpha = 27.796^\circ$. Un análisis cuantitativo de la distribución de la LDOS entre capas revela que, para $\alpha = 30^\circ$, aproximadamente el 30 % del peso espectral se localiza en la capa superior, mientras que el 70 % restante se concentra en la capa inferior. Esta marcada asimetría intercapas sugiere que los estados electrónicos asociados a este pico poseen un carácter predominantemente localizado y un acoplamiento efectivo reducido con la capa superior. En contraste, para el ángulo conmensurable $\alpha = 27.796^\circ$, la distribución

Figura 44. (Panel superior) Conductancia normalizada G/G_0 en función de la energía para una bicapa de grafeno rotada con un ángulo inconmensurable $\alpha = 30^\circ$ (línea azul) y un ángulo conmensurable cercano $\alpha = 27.796^\circ$ (línea roja). (Panel inferior) Densidad de estados total $DOS(E)$ correspondiente a las mismas configuraciones angulares. Las líneas verticales discontinuas indican energías seleccionadas donde la DOS presenta picos pronunciados. La DOS fue reducida en un factor de 10^3 para efectos de visualización.



de la LDOS resulta más equilibrada, con un 39.4 % del peso espectral localizado en la capa superior y un 60.6 % en la capa inferior, lo que indica una mayor hibridación intercapas y una extensión espacial más homogénea de los estados electrónicos. Estas diferencias en la localización intercapas permiten establecer una conexión directa con los resultados de conductancia discutidos previamente. En particular, aunque el sistema cuasicristalino presenta picos más pronunciados en la densidad de estados, estos están dominados por estados con mayor grado de localización espacial y menor participación de la capa superior, lo que limita su contribución efectiva al transporte electrónico. Como consecuencia, las singularidades observadas en la DOS no se traducen en variaciones proporcionales de la conductancia, la cual está principalmente determinada por estados más extendidos y mejor acoplados a los contactos metálicos.

Figura 45. LDOS (ρ_i^{norm}) calculados para la energía $E = -0.727$ eV, correspondiente a uno de los picos más pronunciados en la DOS total. (a) Ángulo inconmensurable $\alpha = 30^\circ$. (b) Ángulo conmensurable $\alpha = 27.976^\circ$. El tamaño e intensidad de los marcadores es proporcional a la LDOS, y los colores distinguen la contribución de cada capa. Los mapas se muestran sobre la geometría real del sistema.

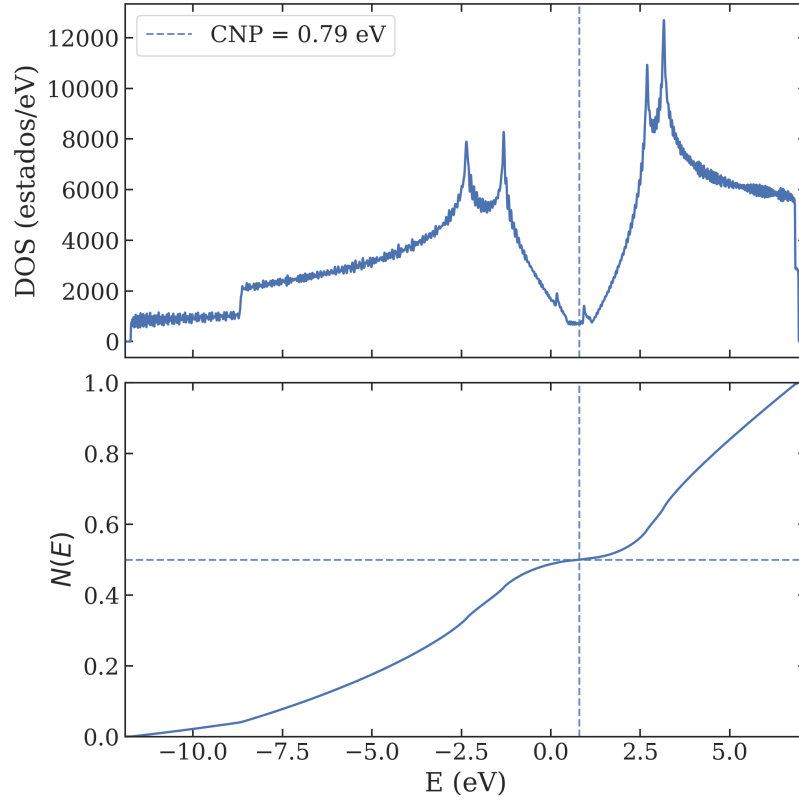


Anexo C. PUNTO DE NEUTRALIDAD DE CARGA

En este anexo se presentan y discuten las propiedades espectrales de la bicapa de grafeno en ausencia de electrodos o contactos externos, de modo que las características descritas corresponden al sistema intrínseco, sin perturbaciones inducidas por campos eléctricos aplicados ni dopaje por transferencia de carga desde materiales adyacentes. Se consideran dos monocapas de grafeno de dimensiones $W = L = 30$ nm con apilamiento vertical tipo AA, cuyos sitios atómicos se encuentran acoplados bajo la condición $d_{ij} \leq 4a$.

La DOS de la bicapa de grafeno en función de la energía es calculada mediante el método Kernel Polynomial Method (KPM), implementado en la librería kwant. Este método expande la DOS en términos de polinomios de Chebyshev $T_n(x)$ del Hamiltoniano escalado $\tilde{H}$, cuyo espectro se mapea al intervalo $[-1, 1]$, de modo que $\rho(E) \approx \sum_{n=0}^N \mu_n T_n(E)$, donde los momentos espectrales $\mu_n = \langle r | T_n(\tilde{H}) | r \rangle$ se estiman estocásticamente mediante vectores aleatorios $|r\rangle$. Para mitigar las oscilaciones de Gibbs propias de una expansión truncada en N momentos, se aplica

Figura 46. Panel superior: densidad de estados (DOS) de la bicapa de grafeno con apilamiento AA ($W = L = 30$ nm, $t = 2.7$ eV, $t_{\perp} = 0.48$ eV) calculada mediante el método KPM. La línea vertical punteada indica el punto de neutralidad de carga $E_{\text{CNP}} = 0.79$ eV. Panel inferior: DOS integrada acumulada $N(E)$ normalizada; la intersección con $N = 0.5$ (línea horizontal punteada) determina el CNP.



el kernel de Jackson, que pondera los coeficientes suprimiendo las contribuciones de alto orden. La complejidad computacional del método escala linealmente con el tamaño del sistema, $\mathcal{O}(N \cdot \dim H)$, lo que lo hace especialmente adecuado para Hamiltonianos dispersos de gran dimensión como el de la bicapa de grafeno considerada.

La figura 46 presenta la densidad de estados (DOS) y la DOS integrada acumulada $N(E)$ de la bicapa de grafeno AA de dimensiones $W = L = 30$ nm, en el rango de energía E . La DOS integrada acumulada se define como

$$N(E) = \frac{1}{N} \int_{-\infty}^E \rho(\varepsilon) d\varepsilon,$$

donde $\rho(\varepsilon)$ es la densidad de estados y $\mathcal{N} = \int_{-\infty}^{\infty} \rho(\varepsilon) d\varepsilon$ es el número total de estados del sistema, de modo que $N(E)$ queda normalizada en el intervalo $[0, 1]$ y es monótonamente creciente por construcción. El punto de neutralidad de carga (CNP) se determina como la energía a la cual exactamente la mitad de los estados del espectro están ocupados, es decir, mediante la condición $N(E_{\text{CNP}}) = 0.5$, lo que equivale a llenar el sistema hasta la mitad de su capacidad espectral total. En la figura, la intersección de $N(E)$ con la línea horizontal $N = 0.5$ determina $E_{\text{CNP}} = 0.79$ eV, valor que fija el nivel de Fermi intrínseco del sistema y que presenta un corrimiento respecto al punto de Dirac ideal ($E = 0$) atribuible a efectos de la adición del acoplamiento más allá del vecino más cercano. La DOS exhibe una estructura escalonada a energías bajas, consistente con la dispersión lineal de los conos de Dirac, así como picos pronunciados en las proximidades del CNP que se identifican como singularidades de Van Hove desdobladas por el acoplamiento intercapa $t_{\perp} = 0.48$, característica distintiva del apilamiento AA.