

Artículo original

Superceldas y patrones de Moiré gobernados por simetría: generalización para n redes cuadradas y hexagonales

Supercells and symmetry-governed Moiré patterns: Generalization for n square and hexagonal lattices

Freddy Mendoza-Villa¹, Kevin M. Amiquero-Bravo^{2,*}

¹Universidad Tecnológica del Perú, Lima, Perú.

²Unidad de Posgrado de Matemática, Universidad Nacional Mayor de San Marcos, Lima, Perú

Resumen

Los patrones de Moiré surgen al superponer redes periódicas con una rotación o traslación relativa, lo que produce periodicidades emergentes a escalas mayores. Desde el punto de vista matemático, dichos patrones constituyen ejemplos notables de simetrías discretas en el plano, donde la conmensurabilidad entre dos o más redes da lugar a superceldas de orden superior. Aunque el caso de los sistemas bicapa con simetría cuadrada o hexagonal se ha analizado en trabajos previos, no se había establecido de forma sistemática una descripción recursiva general para configuraciones de múltiples capas. En este trabajo presentamos un formalismo basado en ecuaciones en diferencias que permite generar de manera recursiva superceldas de Moiré para un número arbitrario de capas. El método se aplica a redes de Bravais cuadradas y hexagonales, capturando el crecimiento exponencial del área de la supercelda y preservando los ejes de simetría característicos de cada red. Con ejemplos numéricos se ilustra cómo el formalismo proporciona una descripción unificada y compacta de las condiciones de conmensurabilidad, lo que permite calcular propiedades estructurales intrínsecas como la densidad atómica y el área específica en materiales bidimensionales de longitud de enlace fija. Estos resultados subrayan el papel de la simetría discreta en la organización a gran escala de los patrones de Moiré y ofrecen un marco matemático sistemático para su extensión a sistemas multicapa.

Palabras clave: Patrón de Moiré; Ángulo conmensurable; Polígono regular.

Abstract

Moiré patterns arise from the superposition of periodic lattices with a relative rotation or translation, producing emergent periodicities at larger scales. From a mathematical perspective, these patterns represent remarkable examples of discrete symmetries in the plane, where the commensurability among two or more lattices gives rise to higher-order supercells. While the case of two-layer systems with square or hexagonal symmetry has been analyzed in previous works, a general recursive description for multilayer configurations has not been systematically established. In this paper, we present a formalism based on difference equations that generates Moiré supercells recursively for an arbitrary number of layers. The method applies to both square and hexagonal Bravais lattices, capturing the exponential growth of the supercell area while preserving the characteristic symmetry axes of each lattice. Numerical examples illustrate how the formalism provides a unified and compact description of commensurability conditions, enabling the calculation of intrinsic structural properties such as atomic density and specific area in two-dimensional materials with fixed bond length. These results highlight the role of discrete symmetry in governing the large-scale organization of Moiré patterns and provide a systematic mathematical framework for their extension to multilayer systems.

Keywords: Moiré pattern; Commensurate angle; Regular polygon.

Citación: Freddy Mendoza-Villa F & Amiquero-Bravo KM. Superceldas y patrones de Moiré gobernados por simetría: generalización para n redes cuadradas y hexagonales. Revista de la Academia Colombiana de Ciencias Exactas, Físicas y Naturales. 2026 May 21. doi: <https://doi.org/10.18257/raccefyn.4039>

Editor: María Elena Gómez

***Correspondencia:**

Kevin M. Amiquero-Bravo;
kevinamiquerobravo@gmail.com

Recibido: 5 de febrero de 2026

Aceptado: 14 de marzo de 2026

Publicado en línea: 21 de mayo de 2026



Este artículo está bajo una licencia de Creative Commons Reconocimiento-NoComercial-Compartir Igual 4.0 Internacional

Introducción

Los patrones de Moiré constituyen estructuras geométricas que emergen al superponer dos redes periódicas con una ligera rotación o traslación relativa (Wu & Sun, 2024). Desde una perspectiva matemática, representan manifestaciones notables de simetrías discretas en el plano, donde la interacción entre dos redes conmensurables genera una supercelda periódica de mayor escala. El interés en estos patrones trasciende las aplicaciones físicas y se enmarca en la teoría de redes, teselaciones y geometría discreta, donde las propiedades globales derivan directamente de las simetrías locales.

En dos dimensiones, las configuraciones más estudiadas corresponden a redes con simetría cuadrada y hexagonal (Carnevali, Marcantoni, & Peressi, 2021; Ospina Medina, 2017). Sus condiciones de conmensurabilidad han sido ampliamente descritas en la literatura mediante formulaciones que permiten identificar los ángulos especiales en los que aparecen superceldas periódicas, así como caracterizar parámetros básicos como el número de celdas primitivas incluidas y la relación de áreas (Li *et al.*, 2024). No obstante, cuando se consideran rotaciones sucesivas de múltiples capas, el problema adquiere una complejidad mayor: la construcción explícita de la supercelda correspondiente a un sistema de n capas. Hasta donde sabemos, no se había propuesto una formulación recursiva general que sistematice estos resultados de manera compacta.

El propósito de este trabajo es llenar dicho vacío. Presentamos un formalismo en ecuaciones en diferencias que extiende y unifica los resultados previamente conocidos para los casos cuadrado y hexagonal, permitiendo generar de manera recursiva las bases de la supercelda de Moiré para un número arbitrario de capas. Estas recurrencias capturan el crecimiento exponencial del área de la supercelda y preservan los ejes de simetría característicos de cada red. Finalmente, se incluyen ejemplos numéricos que ilustran la aplicabilidad del formalismo y se discuten sus propiedades estructurales desde el punto de vista de la simetría discreta.

Metodología

Este trabajo toma como punto de partida algunos resultados de la tesis de maestría de (Ospina Medina, 2017), pero introduce un formalismo distinto basado en ecuaciones en diferencias que permite generalizar la construcción de superceldas de Moiré a un número arbitrario de capas. En este marco, el problema consiste en rotar una red bidimensional de Bravais con respecto a sí misma, donde el ángulo de rotación debe tener un valor específico para generar un nuevo patrón periódico.

Para la red cuadrada y la cuadrada centrada, se obtiene el ángulo correspondiente a partir de la simetría de reflexión $y = \tan 45^\circ x$. La ecuación (1) muestra este ángulo en sentido horario (Bareño-Silva *et al.*, 2024; Ospina Medina, 2017).

$$\theta = \arccos\left(\frac{2rs}{r^2 + s^2}\right) \tag{1}$$

Donde $(r, s) = (x_0, y_0)$, el lado del cuadrado es $L = 2a$ y $x_0 > y_0 \wedge x_0 \geq 1$.

Para la red hexagonal y la red hexagonal centrada, el ángulo conmensurable se obtiene a partir de la simetría de reflexión $y = \tan 30^\circ x$. La ecuación (2) muestra este ángulo en sentido horario (Ospina Medina, 2017; Shallicross, Sharma, & Pankratov, 2008).

$$\theta = \arccos\left(\frac{r^2 + 6rs - 3s^2}{2(3s^2 + r^2)}\right) \tag{2}$$

Donde $(r, s) = (2x_0 + y_0, y_0)$, el lado del hexágono es $L = a$ y $x_0 > y_0 \wedge x_0 \geq 1$.

La Figura 1: Izquierda muestra la relación entre el número de cuadrados y hexágonos en función del ángulo commensurable (Shallcross *et al.*, 2010), y la Figura 1: Derecha muestra la superficie del número de átomos $N(x_0, y_0)$, las cuales tienen una regresión de tipo paraboloidal, respectivamente (Ospina Medina, 2017).

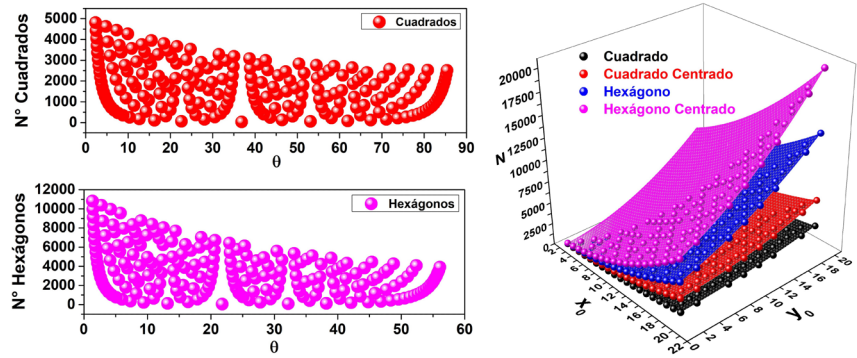


Figura 1. Izquierda: Número de cuadrados y hexágonos para una simulación numérica de 199 ángulos commensurables. Derecha: Superficie de número de átomos para las redes de Bravais-Moiré (cuadrada y hexagonal) para una simulación numérica de 127 ángulos commensurables.

Los resultados de Ospina (2017) (Ospina Medina, 2017) fueron validados mediante simulaciones en Python como en diversas investigaciones (Mendoza-Villa, Ramos-Guivar, & Espinoza-Bernardo, 2024; Mendoza-Villa *et al.*, 2024). Este trabajo extiende y generaliza dichos resultados, abordando configuraciones más específicas y complejas, lo que requirió modificaciones en los códigos y en la formulación matemática. Un punto clave es que, si uno de los patrones de las redes de Bravais se escala de manera proporcional, las ecuaciones (1) y (2) que definen los ángulos commensurables siguen garantizando la commensurabilidad, lo que muestra la robustez del formalismo. En particular, cuando $k > 1$, los vértices de la red de Bravais-Moiré se ajustan al patrón más grande, mientras que para $0 < k < 1$ coinciden con los obtenidos en el caso $k = 1$. Este último representa el escenario mínimo, donde la supercelda contiene la menor cantidad de átomos y vértices necesarios para describir la periodicidad del sistema como se muestra en las ecuaciones (3) y (4).

- Cuadrado y Cuadrado Centrado

$$\begin{aligned} V_1 &= (2kar, 2kas) \\ V_2 &= (-2kas, 2kar) \\ V_3 &= (-2kar, -2kas) \\ V_4 &= (2kas, -2kar) \end{aligned} \quad (3)$$

- Hexágono y Hexágono Centrado

$$\begin{aligned} V_1 &= \left(\sqrt{3}akr/2, 3aks/2 \right) \\ V_2 &= \left(-\sqrt{3}ak(3s-r)/4, 3ak(s+r)/4 \right) \\ V_3 &= \left(-\sqrt{3}ak(3s+r)/4, -3ak(s-r)/4 \right) \\ V_4 &= \left(-\sqrt{3}akr/2, -3aks/2 \right) \\ V_5 &= \left(\sqrt{3}ak(3s-r)/4, -3ak(s+r)/4 \right) \\ V_6 &= \left(\sqrt{3}ak(3s+r)/4, 3ak(s-r)/4 \right) \end{aligned} \quad (4)$$

Por último, cabe señalar que el cálculo de la supercelda puede extenderse de manera natural a los distintos casos de redes cuadradas y hexagonales, tanto centradas como no centradas, ya que todas ellas comparten la misma condición angular de conmensurabilidad.

Esta observación permite unificar la descripción de los patrones de Moiré en un marco común, donde la periodicidad emergente se entiende como consecuencia directa de la simetría subyacente, sin depender de las particularidades geométricas de cada una de estas redes.

- **Simetría Cuadrada:** Para esta simetría, recurrimos a lo definido anteriormente: $(r, s) = (x_0, y_0) = (z_1, w_1)$, con lo cual se forma la supercelda cuadrada para la red cuadrada.

Para una red no rotada y una red rotada θ_1 , la base de la supercelda cuadrada es la siguiente:

$$P_1 = \begin{bmatrix} P_{1x} \\ P_{1y} \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 2az_1 \\ 2aw_1 \end{bmatrix}$$

$$Q_1 = \begin{bmatrix} Q_{1x} \\ Q_{1y} \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} -2aw_1 \\ 2az_1 \end{bmatrix}$$

Para una red no rotada y dos redes rotadas θ_1 y θ_2 , la base de la supercelda cuadrada es la siguiente:

$$P_2 = \begin{bmatrix} P_{2x} \\ P_{2y} \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} z_2P_{1x} + w_2Q_{1x} \\ z_2P_{1y} + w_2Q_{1y} \end{bmatrix}$$

$$Q_2 = \begin{bmatrix} Q_{2x} \\ Q_{2y} \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} -z_2P_{1y} - w_2Q_{1y} \\ z_2P_{1x} + w_2Q_{1x} \end{bmatrix}$$

Para una red no rotada y n+1 redes rotadas $\theta_1, \theta_2, \theta_3, \dots, \theta_n, \theta_{n+1}$, la ecuación de recurrencia para hallar una base vectorial con los vértices de la supercelda cuadrada se muestran en las ecuaciones (5) y (6).

$$P_{n+1} = \begin{bmatrix} P_{(n+1)x} \\ P_{(n+1)y} \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} z_{n+1}P_{nx} + w_{n+1}Q_{nx} \\ z_{n+1}P_{ny} + w_{n+1}Q_{ny} \end{bmatrix} \tag{5}$$

$$Q_{n+1} = \begin{bmatrix} Q_{(n+1)x} \\ Q_{(n+1)y} \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} -z_{n+1}P_{ny} - w_{n+1}Q_{ny} \\ z_{n+1}P_{nx} + w_{n+1}Q_{nx} \end{bmatrix} \tag{6}$$

Donde (z_{n+1}, w_{n+1}) son los pares conmensurables de la red cuadrada rotada un ángulo θ_{n+1} . Los otros vértices de la supercelda cuadrada se pueden obtener aplicando una rotación de 90° a los puntos P_{n+1} y Q_{n+1} , respectivamente.

- **Simetría Hexagonal:** Para esta simetría, recurrimos a lo definido anteriormente: $(r, s) = (2x_0 + y_0, y_0) = (z_1, w_1)$, con lo cual se forma la supercelda hexagonal para la red hexagonal.

Para una red no rotada y una red rotada θ_1 , la base de la supercelda hexagonal es la siguiente:

$$P_1 = \begin{bmatrix} P_{1x} \\ P_{1y} \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} \sqrt{3}a(2z_1 + w_1)/2 \\ 3a(w_1)/2 \end{bmatrix}$$

$$Q_1 = \begin{bmatrix} Q_{1x} \\ Q_{1y} \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} -\sqrt{3}a(w_1 - z_1)/2 \\ 3a(w_1 + z_1)/2 \end{bmatrix}$$

Para una red no rotada y dos redes rotadas θ_1 y θ_2 , la base de la supercelda hexagonal es la siguiente:

$$P_2 = \begin{bmatrix} P_{2x} \\ P_{2y} \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} z_2 P_{1x} + w_2 Q_{1x} \\ z_2 P_{1y} + w_2 Q_{1y} \end{bmatrix}$$

$$Q_2 = \begin{bmatrix} Q_{2x} \\ Q_{2y} \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} P_{2x} \cos 60^\circ - P_{2y} \sin 60^\circ \\ P_{2x} \sin 60^\circ + P_{2y} \cos 60^\circ \end{bmatrix}$$

Para una red no rotada y $n+1$ redes rotadas $\theta_1, \theta_2, \theta_3, \dots, \theta_n, \theta_{n+1}$, la ecuación de recurrencia para hallar una base vectorial con los vértices de la supercelda hexagonal se muestran en las ecuaciones (7) y (8).

$$P_{n+1} = \begin{bmatrix} P_{(n+1)x} \\ P_{(n+1)y} \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} z_{n+1} P_{nx} + w_{n+1} Q_{nx} \\ z_{n+1} P_{ny} + w_{n+1} Q_{ny} \end{bmatrix} \quad (7)$$

$$Q_{n+1} = \begin{bmatrix} Q_{(n+1)x} \\ Q_{(n+1)y} \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} P_{(n+1)x} \cos 60^\circ - P_{(n+1)y} \sin 60^\circ \\ P_{(n+1)x} \sin 60^\circ + P_{(n+1)y} \cos 60^\circ \end{bmatrix} \quad (8)$$

Donde (z_{n+1}, w_{n+1}) son los pares conmensurables de la red hexagonal rotada un ángulo θ_{n+1} . Los otros vértices de la supercelda hexagonal se pueden obtener aplicando una rotación de 60° a los puntos P_{n+1} y Q_{n+1} , respectivamente.

La derivación detallada de las ecuaciones de recurrencia (5)–(8) asociadas a las superceldas se presenta de manera exhaustiva en el apéndice de este manuscrito, donde se exponen paso a paso los supuestos, manipulaciones algebraicas que conducen a dichas expresiones.

Resultados

La simulación numérica muestra que al variar el tamaño relativo de uno de los patrones, se observa un cambio significativo en el número total de átomos, ya que la supercelda correspondiente también crece proporcionalmente. Este comportamiento refleja la sensibilidad de los patrones de Moiré frente a escalas distintas de periodicidad y pone de manifiesto cómo la simetría discreta gobierna el modo en que se reorganizan las posiciones atómicas en el plano.

Este efecto es válido incluso si $k > 1$ o si $0 < k < 1$, mientras que para $k = 1$ se obtiene el valor mínimo posible del número de átomos en la supercelda. En los casos $0 < k < 1$ y $k > 1$, los patrones se repiten proporcionalmente dentro del otro patrón; la diferencia principal radica en que, en un caso, los vértices de la supercelda se preservan, mientras que en el otro se expanden de manera proporcional, generando un aumento en el área y en la cantidad de átomos incluidos. Este fenómeno evidencia que la estructura global de los patrones de Moiré no depende únicamente de la rotación relativa, sino también de la relación de escalas entre las redes superpuestas.

En la Tabla I se muestran los valores característicos de k y el número de átomos asociados, lo que permite cuantificar de manera explícita la relación entre escalamiento, simetría y crecimiento de la supercelda. Estos resultados refuerzan la idea de que la organización periódica emergente puede describirse mediante leyes recursivas simples, pero con consecuencias geométricas y estructurales de gran alcance.

En los resultados consignados en la Tabla 1 se observa de manera sistemática una relación funcional clara entre el logaritmo en base 10 de k y los parámetros propuestos N (Número de átomos), σ (Densidad de número de átomos) y γ_S (Área específica de número de átomos), lo que sugiere una dependencia estructurada y consistente entre dichas magnitudes.

k	Cuadrado	Cuadrado centrado	Hexágono	Hexágono centrado
1/10	2020	4086	7878	11852
1/5	520	1066	2028	3062
1/4	340	702	1326	2006
1/3	200	418	780	1184
1/2	100	214	390	596
1	40	90	156	242
2	100	214	390	596
3	200	418	780	1184
4	340	702	1326	2006
5	520	1066	2028	3062
10	2020	4086	7878	11852

Tabla 1. El número de átomos para las redes cuadrada y hexagonal a medida que varía el valor de k . Los ángulos commensurables son $\theta_2 = 53.13^\circ$ para la red cuadrada y $\theta_2 = 32.20^\circ$ para la red hexagonal. El valor de a es 1 para el cuadrado y el hexágono.

El uso de la escala logarítmica permite comparar de manera uniforme los regímenes $0 < k < 1$ y $k > 1$, resaltando la simetría entre ambos casos y suavizando la tendencia de los datos de los parámetros N , σ y γ_s . Para analizar estas dependencias se realizó una regresión no lineal, evaluando diferentes funciones de ajuste. En particular, se consideraron las ecuaciones del coseno hiperbólico, lorentziana y logística de ecuaciones (9)-(11), ya que proporcionan una descripción adecuada del comportamiento observado y alcanzan valores elevados del coeficiente de determinación R^2 (Huang & He, 2024).

$$Y = A \cdot \cosh(B \cdot \log_{10}(k)) + C \tag{9}$$

$$Y = \frac{A \cdot C}{(\log_{10}(k) - B)^2 + C^2} \tag{10}$$

$$Y = \frac{A}{1 + e^{-B \cdot (\log_{10}(k) - C)}} \tag{11}$$

Las ecuaciones (9)-(11) de regresión para las tres curvas propuestas en el estudio de los patrones de Bravais-Moiré de ángulos commensurables para la red cuadrada, la red cuadrada centrada, donde $\theta_2 = 53.13^\circ$, y la red hexagonal, la red hexagonal centrada, donde $\theta_2 = 32.20^\circ$, se muestran en las siguientes ecuaciones correspondientes.

• **Patrón Cuadrado**

$$N = 43.66 \cdot \cosh(4.5245 \cdot \log_{10}(k)) + 5.5616$$

$$\sigma = \frac{4.1691 \cdot 0.1605}{(\log_{10}(k) + 0.9741)^2 + 0.1605^2}$$

$$\gamma_s = \frac{4.00}{1 + e^{-4.60 \cdot (\log_{10}(k) - 0.00003)}}$$

• **Patrón Cuadrado Centrado**

$$N = 90.57 \cdot \cosh(4.4973 \cdot \log_{10}(k)) + 19.2599$$

$$\sigma = \frac{8.6239 \cdot 0.1663}{(\log_{10}(k) + 0.9794)^2 + 0.1663^2}$$

$$\gamma_s = \frac{1.99}{1 + e^{-4.31 \cdot (\log_{10}(k) - 0.04633)}}$$

• **Patrón Hexágono**

$$N = 170.27 \cdot \cosh(4.5245 \cdot \log_{10}(k)) + 21.6902$$

$$\sigma = \frac{12.8104 \cdot 0.1606}{(\log_{10}(k) + 0.9742)^2 + 0.1606^2}$$

$$\gamma_s = \frac{1.30}{1 + e^{-4.59 \cdot (\log_{10}(k) - 0.00005)}}$$

• **Patrón Hexágono Centrado**

$$N = 257.84 \cdot \cosh(4.5175 \cdot \log_{10}(k)) + 39.1579$$

$$\sigma = \frac{19.3993 \cdot 0.1622}{(\log_{10}(k) + 0.9757)^2 + 0.1622^2}$$

$$\gamma_s = \frac{0.86}{1 + e^{-4.53 \cdot (\log_{10}(k) - 0.0109)}}$$

En la Figura 2 se muestra el gráfico que relaciona el parámetro k con las tres magnitudes N , σ y γ_s para el caso una red sin rotar y una red rotada por θ_1 .

El ajuste obtenido presenta un coeficiente de correlación $R^2 = 0.99$, lo que confirma la existencia de una correspondencia muy sólida entre estas variables. De este resultado se concluye que la dependencia entre k y los tres parámetros N , σ y γ_s no es lineal.

Aquí se observa que el valor de $k = 1$ es el punto central en los gráficos. No obstante, este punto resulta más relevante para N al constituir el mínimo global, a diferencia de lo que ocurre con σ y γ_s .

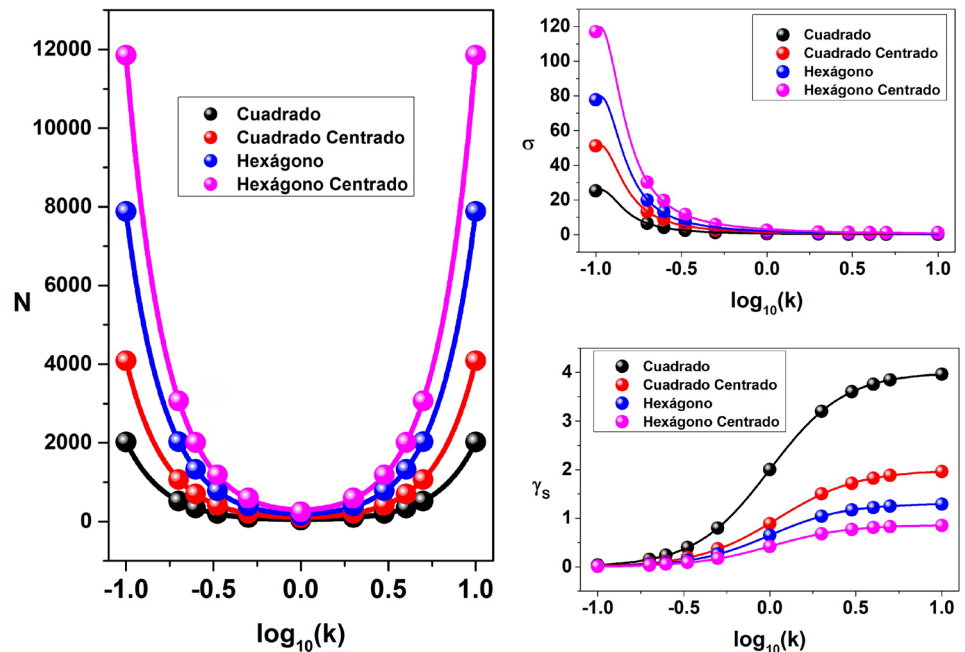


Figura 2. Regresión no lineal para la relación entre el N , σ y γ_s con respecto a k para los patrones cuadrado y hexagonal.

Para el análisis de los datos entre N (Número de átomos) y S (Área de la supercelda) en el patrón de Bravais-Moiré, se propone una función lineal, correspondiente a una regresión

lineal clásica. Además, se definen las funciones matemáticas $\sigma = N/S$ y $\gamma_s = S/N$ como magnitudes relevantes en los patrones de Moiré. Estos se aplican a los patrones de las redes de Bravais cuadrado, cuadrado centrado, hexagonal y hexagonal centrado, los cuales se muestran en la Figura 3.

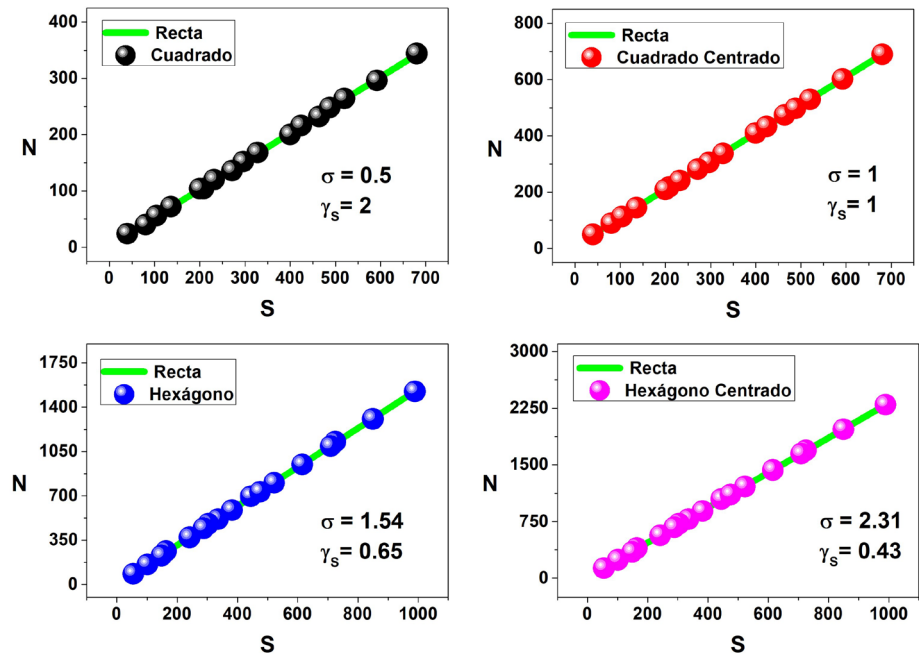


Figura 3. Relación lineal entre el número de átomos N y el área superficial S . Los parámetros para ambos patrones (cuadrado y hexágono) son $a = 1$ y $k = 1$

Los resultados de la Figura 3 muestran que existe una estricta relación lineal entre el número de átomos y el área de la supercelda, además de un coeficiente de correlación $R^2 = 0.99$. Estas simulaciones se realizaron para el patrón cuadrado y hexagonal con 17 ángulos commensurables obtenidos por las ecuaciones (1) y (2). No obstante, a mayor número de ángulos commensurables, se obtendrá una mayor precisión en el valor de σ y γ_s .

En la Figura 3 se observa que las imágenes de la izquierda tienen valores (σ , γ_s) diferentes a los de la derecha. Esto se debe a que la geometría es centrada, lo que provoca un incremento en el número de átomos, mientras que el área de la supercelda permanece constante. Es importante mencionar que estos parámetros dependen del valor de los parámetros a y k de los patrones respectivos.

En la Figura 4 se observa de manera clara cómo la supercelda crece considerablemente a medida que aumenta el número de redes, siendo mucho más grande que la supercelda correspondiente al caso anterior. Los resultados evidencian un crecimiento exponencial del tamaño de la supercelda, debido a que al incrementar el número de redes rotadas, los puntos comunes entre las redes se encuentran cada vez más separados entre sí. Por esa misma razón, el patrón de Moiré es más grande, respectivamente.

Este fenómeno se confirma al comparar el caso de una sola capa sin rotar con el de 32 capas rotadas, con ángulos commensurables $(z_k, w_k) = ([2, 33], 1)$, donde el tamaño resultante de la supercelda alcanza dimensiones tan enormes que, considerando un parámetro $a = 1$ nm, supera incluso la escala del universo observable, cuyo diámetro estimado es de 8.8×10^{35} nm. Esto ilustra no solo la complejidad geométrica que emerge en sistemas multicapa con

rotaciones sucesivas de ángulos conmensurables, sino también las limitaciones prácticas para la formación de superceldas manejables en aplicaciones reales.

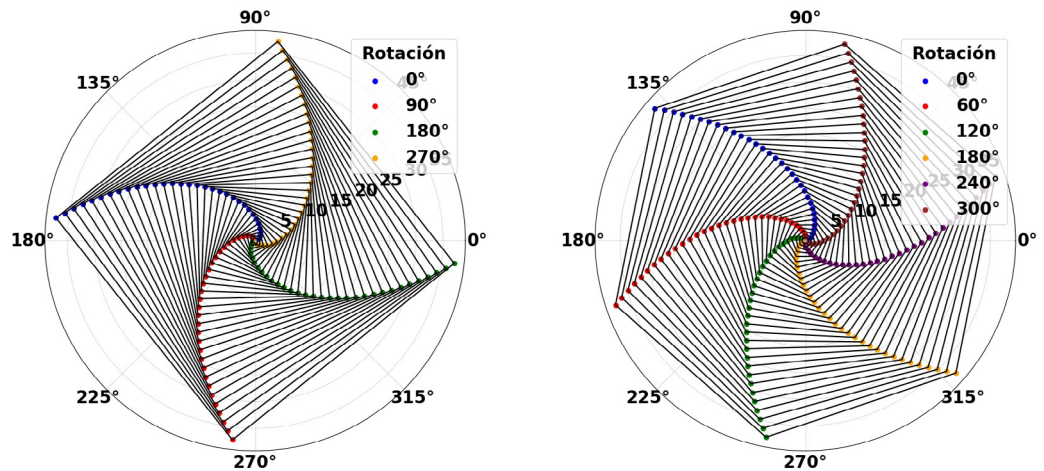


Figura 4. Superceldas con simetría cuadrada y hexagonal para 1 capa sin rotar y 32 capas rotadas. El valor de $a = 1$ para las redes cuadrada y hexagonal.

Discusión

Los resultados obtenidos para los patrones de Bravais-Moiré poseen una relevancia directa en el estudio de materiales bidimensionales. La aparición de nuevas familias de materiales 2D ha impulsado el análisis sistemático de redes de Bravais-Moiré, en particular aquellas con simetría cuadrada y hexagonal. Esto se debe a que la superposición de capas rotadas genera estructuras periódicas emergentes cuyas propiedades geométricas y físicas están gobernadas por la simetría subyacente del sistema, dando lugar a fenómenos colectivos que no están presentes en las capas individuales.

Estas configuraciones no solo dan lugar a patrones geométricos de notable interés dentro de la teoría de redes, teselaciones y simetrías cristalinas, sino que además constituyen el sustrato estructural sobre el cual, en contextos físicos específicos, pueden emerger propiedades fisicoquímicas inéditas. En particular, la organización periódica a gran escala inducida por los patrones de Moiré puede modificar de manera sustancial la estructura electrónica, las respuestas ópticas y las propiedades mecánicas del sistema, habilitando comportamientos colectivos que no se encuentran en los materiales constituyentes por separado.

En este contexto, nuestro formalismo permite identificar propiedades intrínsecas que dependen únicamente de la geometría de la red, tales como la densidad atómica y el área específica por átomo, para materiales 2D con una longitud de enlace constante $L = a$. Estas magnitudes, al estar determinadas únicamente por la estructura geométrica subyacente y no por detalles químicos particulares, constituyen descriptores universales que facilitan la comparación sistemática entre distintas redes y superredes Moiré.

En la Tabla 2 se presentan ejemplos representativos de materiales con estructura hexagonal, lo que ilustra la aplicabilidad del método y su capacidad de sistematizar de manera unificada la relación entre la simetría de la red y las propiedades estructurales derivadas.

Material 2D	Geometría	L (Å)	Referencia
P: Fósforo azul	Hexagonal	1.23	(Tani <i>et al.</i> , 2022)
C: Grafeno	Hexagonal	1.42	(García-Bello <i>et al.</i> , 2023)
BN: Nitruro de boro	Hexagonal	1.48	(Mei <i>et al.</i> , 2020)
Si: Siliceno	Hexagonal	2.34	(Stephan, Hanf, & Sonnet, 2015)
Ge: Germaneno	Hexagonal	2.38	(Chegel & Behzad, 2020)
MoS ₂ : Disulfuro de molibdeno	Hexagonal	2.43	(Li <i>et al.</i> , 2015)
As: Arseneno	Hexagonal	2.52	(Tian, Wang, & Gong, 2023)
Sn: Estaneno	Hexagonal	2.80	(Insad, Drissi, <i>et al.</i> , 2022)
Sb: Antimoneno	Hexagonal	2.88	(Mozvashi, Vishkayi, & Tagani, 2020)
Pb: Plumbeno	Hexagonal	3.00	(Das, Sarkar, & Singh, 2018)
Bi: Bismuteno	Hexagonal	3.03	(Mozvashi, Vishkayi, & Tagani, 2020)

Tabla 2. Información geométrica de materiales 2D con geometría hexagonal.

Los valores correspondientes en la Tabla 2 muestran los diferentes valores de $L = a$ para los materiales 2D. Esta variación provoca que los valores de (σ, γ_s) se vean modificados, ya que $a \propto S$ en el patrón de Bravais-Moiré. Así, se observa una relación directamente proporcional entre a y γ_s , e inversamente proporcional entre a y σ . Sin embargo, si modificamos el valor de la constante de proporcionalidad k , obtenemos dos posibilidades. Si $k > 1$, el área aumenta proporcionalmente, por lo que se tiene que $k \propto \gamma_s$. Si $k < 1$, el área se mantiene constante, por lo que se tiene que $k \propto \sigma$. Lo mencionado anteriormente se puede observar de manera cuantitativa en la Figura 5 para los materiales 2D de la Tabla 2, en la cual se ha realizado la simulación para tres casos de proporcionalidad. Estos resultados pueden extrapolarse a otros valores de k correspondientes, ya que existe una relación directa con el valor del área de los patrones de Bravais-Moiré.

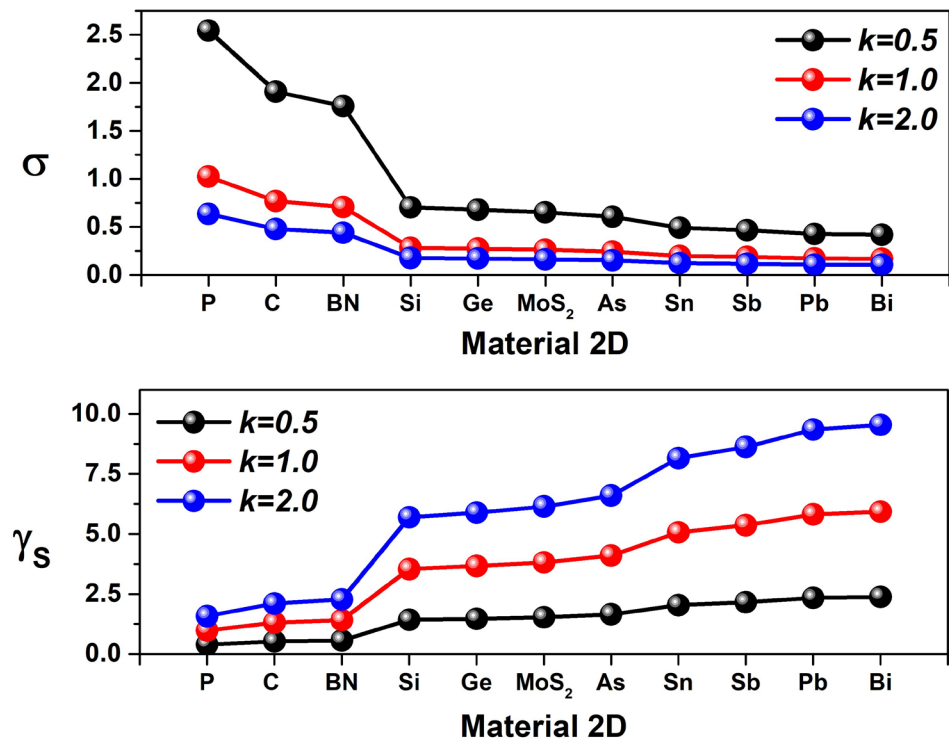


Figura 5. Parámetros (σ, γ_s) para diferentes materiales 2D con patrón de Bravais-Moiré hexagonal.

Cabe destacar que el vector de la red conmensurable puede expresarse en términos del par $\{P_n, Q_n\}$, el cual caracteriza la supercelda generalizada para el caso de múltiples capas (Chegel & Behzad, 2020; Li *et al.*, 2015; Tani *et al.*, 2022). En particular, cuando se considera un sistema de una red sin rotar y una red rotada por θ_1 , resulta suficiente trabajar con el primer par $\{P_1, Q_1\}$, que define de manera unívoca la periodicidad del patrón de Moiré (Insad, Drissi, *et al.*, 2022; Mozvashi, Vishkayi, & Tagani, 2020; Tian, Wang, & Gong, 2023). Para sistemas con una red sin rotar y n redes rotadas, en cambio, es necesario extender el análisis a $n > 1$, de modo que la formulación capture las relaciones adicionales de conmensurabilidad que surgen entre rotaciones sucesivas de las capas.

Una aplicación directa de los resultados obtenidos en este trabajo se encuentra en los estudios de simulación numérica basados en la teoría funcional de la densidad (DFT). En este tipo de cálculos es necesario definir una celda unidad que contenga el número adecuado de átomos para representar de manera consistente la periodicidad del sistema. La determinación precisa de esta celda resulta fundamental tanto para el cálculo de la estructura de bandas de energía como para la evaluación de otras propiedades físicas en materiales bidimensionales (Chegel & Behzad, 2020; Insad, Drissi, *et al.*, 2022; Li *et al.*, 2015; Mozvashi, Vishkayi, & Tagani, 2020; Tani *et al.*, 2022; Tian, Wang, & Gong, 2023).

Además, también es posible superponer las redes de hexágonos de diferentes materiales 2D. No obstante, realizar la simulación numérica conlleva un alto costo computacional para determinar los parámetros (N, σ, γ_S) en algunos materiales 2D. Esto se debe a que el valor del lado $L = a$ del patrón hexagonal tienen distintos valores. La ecuación (12) tiene la forma que debe satisfacerse la superposición de redes.

$$n_1 a_1 = n_2 a_2 \tag{12}$$

Por medio de las ecuaciones diofánticas lineales podemos deducir los valores mínimos de (n_1, n_2) necesarios para obtener un patrón de Bravais-Moiré (Gómez, 2004). La Tabla 3 muestra los valores mínimos correspondientes.

	P	C	BN	Si	Ge	MoS2	As	Sn	Sb	Pb	Bi
P	(1, 1)	(142, 123)	(148, 123)	(78, 41)	(238, 123)	(81, 41)	(84, 41)	(280, 123)	(96, 41)	(100, 41)	(101, 41)
C	(123, 142)	(1, 1)	(74, 71)	(117, 71)	(119, 71)	(243, 142)	(126, 71)	(140, 71)	(144, 71)	(150, 71)	(303, 142)
BN	(123, 148)	(71, 74)	(1, 1)	(119, 74)	(123, 74)	(243, 148)	(63, 37)	(70, 37)	(72, 37)	(75, 37)	(303, 148)
Si	(41, 78)	(71, 117)	(74, 117)	(1, 1)	(117, 119)	(27, 26)	(14, 13)	(140, 117)	(16, 13)	(50, 39)	(101, 78)
Ge	(123, 238)	(71, 119)	(74, 119)	(117, 119)	(1, 1)	(243, 238)	(18, 17)	(20, 17)	(144, 119)	(150, 119)	(303, 238)
MoS2	(41, 81)	(142, 243)	(148, 243)	(26, 27)	(238, 243)	(1, 1)	(28, 27)	(280, 243)	(32, 27)	(100, 81)	(101, 81)
As	(41, 84)	(71, 126)	(37, 63)	(13, 14)	(17, 18)	(27, 28)	(1, 1)	(10, 9)	(8, 7)	(25, 21)	(101, 84)
Sn	(123, 280)	(71, 140)	(37, 70)	(117, 140)	(17, 20)	(243, 280)	(9, 10)	(1, 1)	(36, 35)	(15, 14)	(303, 280)
Sb	(41, 96)	(71, 144)	(37, 72)	(13, 16)	(119, 144)	(27, 32)	(7, 8)	(35, 36)	(1, 1)	(25, 24)	(101, 96)
Pb	(41, 100)	(71, 150)	(37, 75)	(39, 50)	(119, 150)	(81, 100)	(21, 25)	(14, 15)	(24, 25)	(1, 1)	(101, 100)
Bi	(41, 101)	(142, 303)	(148, 303)	(78, 101)	(238, 303)	(81, 101)	(84, 101)	(280, 303)	(96, 101)	(100, 101)	(1, 1)

Tabla 3. Conjunto de valores de (n_1, n_2) para satisfacer la ecuación (12).

En la Figura A1 del apéndice se observan los patrones de Bravais-Moiré para varios materiales 2D distintos, identificados en color verde en la Tabla 3, donde se muestran los momentos en que los hexágonos se alinean y trasladan (Dunbrack & Cano, 2023). En comparación con otros materiales 2D, estos patrones no presentan un costo computacional más elevado. Aunque en la Tabla 3 no se muestran otros materiales 2D con diferentes geometrías, también existen algunos, como el telurio y el selenio, que presentan una geometría cuadrada centrada. Los valores de $L = 2a$ para estos materiales son 4.08 \AA y 3.65 \AA (Xian *et al.*, 2017). Los valores de (σ, γ_S) para estos materiales 2D se muestran en la Tabla 4.

Material 2D	Geometría	L (Å)	k	σ	γ_s
Tellureno	Cuadrado Centrado	4.08	$\begin{bmatrix} 1/2 \\ 1 \\ 2 \end{bmatrix}$	$\begin{bmatrix} 0.6848 \\ 0.3004 \\ 0.1712 \end{bmatrix}$	$\begin{bmatrix} 1.4602 \\ 3.3293 \\ 5.8408 \end{bmatrix}$
Seleneno	Cuadrado Centrado	3.65	$\begin{bmatrix} 1/2 \\ 1 \\ 2 \end{bmatrix}$	$\begin{bmatrix} 0.8557 \\ 0.3753 \\ 0.2139 \end{bmatrix}$	$\begin{bmatrix} 1.1686 \\ 2.6645 \\ 4.6746 \end{bmatrix}$

Tabla 4. Información de materiales 2D de geometría cuadrada centrado para un $\theta = 36.87^\circ$.

El conjunto mínimo de (n_1, n_2) para el patrón de Bravais-Moiré es $(365, 408)$, lo que satisface la ecuación (12). No obstante, si solo aproximamos los valores del lado del cuadrado L a un decimal sin redondeo $(4.0, 3.6)$, los valores de (n_1, n_2) se simplifican notablemente, siendo estos $(9, 10)$, lo que facilita la realización del patrón de Bravais-Moiré resultante de la Figura 6. En contraste, al redondear a $(4.1, 3.7)$, se obtienen $(37, 41)$.

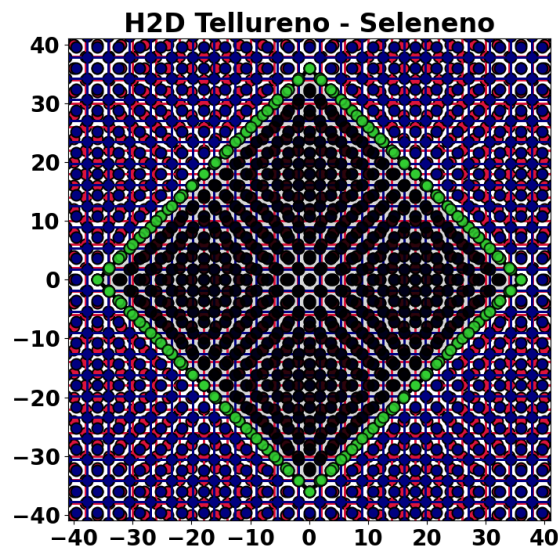


Figura 6. Patrón de Bravais-Moiré de la geometría cuadrada centrada para el tellureno y seleneno.

Por último, en el caso de las generalizaciones de superceldas con simetría cuadrada y hexagonal, el tamaño crece de forma exponencial. Esto se deduce a partir del cálculo del área que encierra la supercelda. Este cálculo se realiza a partir de la base $\{P_n, Q_n\}$ de la supercelda obtenida mediante las ecuaciones de recurrencia (5) – (8), las cuales presentan un crecimiento exponencial. La expresión del área de la supercelda es $A \propto \|P_n\|^2$, siendo la proporción de $C = 2$ para el cuadrado y $C = 3\sqrt{3}/2$ para el hexágono. ⁸

Debido a que el área depende del valor de $\|P_n\|^2$, entonces el factor de crecimiento del área de una supercelda con respecto a una supercelda anterior se puede obtener y confirmar este crecimiento exponencial debido a la base $\{P_n, Q_n\}$. La relación del factor de crecimiento esta dado por las ecuaciones (13) y (14).

• **Simetría cuadrada**

$$\frac{\|P_{n+1}\|^2}{\|P_n\|^2} = (z_{n+1})^2 + (w_{n+1})^2 \tag{13}$$

• **Simetría hexagonal**

$$\frac{\|P_{n+1}\|^2}{\|P_n\|^2} = (z_{n+1})^2 + (z_{n+1})(w_{n+1}) + (w_{n+1})^2 \tag{14}$$

Con las ecuaciones de área dependiendo de $\|P_n\|$ es posible calcular los parámetros σ y γ_S . No obstante, el cálculo del número de puntos N se vuelve demasiado costoso computacionalmente a medida que aumenta el número de redes. Además, es importante destacar que las ecuaciones en diferencias (5)-(8) que se usan para obtener la supercelda se construyen a partir de ángulos conmensurables distintos entre sí, por lo cual el análisis detallado de cada caso resulta excesivamente extenso abarcarlo. Sin embargo, con las ecuaciones (13) y (14) se puede calcular el número de superceldas N_k de $k + 1$ redes en una supercelda de $n + 1$ redes. Esto parte de la relación entre la norma de P_{n+1} con respecto a P_n . Las ecuaciones (15) y (16) muestran la relación anteriormente mencionada con respecto a la primera supercelda, respectivamente.

• **Simetría cuadrada**

$$N_k = \prod_{k=1}^{n+1} [(z_k)^2 + (w_k)^2] \tag{15}$$

• **Simetría hexagonal**

$$N_k = \prod_{k=1}^{n+1} [(z_k)^2 + (z_k)(w_k) + (w_k)^2] \tag{16}$$

Fácilmente se puede dar cuenta que las ecuaciones (13)-(16) tienen un comportamiento exponencial a medida que n empieza a crecer. Este comportamiento se aprecia claramente en la Figura 4, donde se muestran las superceldas concéntricas correspondientes. Asimismo, es posible predecir el número máximo de capas dentro de la región de una circunferencia con un radio de una longitud determinada, como se resume en la tabla 5.

Radio	Simetría cuadrada	Simetría hexagonal
10^1 nm	(1,2)	(1,2)
10^2 nm	(3,4)	(3,4)
10^3 nm	(4,5)	(4,5)
10^6 nm	(7,8)	(8,9)
10^9 nm	(10,11)	(11,12)
10^{12} nm	(12,13)	(14,15)
10^{15} nm	(14,15)	(17,18)
10^{20} nm	(18,19)	(22,23)
10^{25} nm	(21,22)	(27,28)
10^{50} nm	(37,38)	(49,50)
10^{100} nm	(64,65)	(87,88)

Tabla 5. (Número máximo de superceldas, Redes dentro del radio). El valor del parámetro es $a = 1nm$, respectivamente.

Los valores presentados en la Tabla 5 se han calculado de forma aproximada considerando el parámetro a constante en un rango de $(z, w) \in ([1, 00], [1, 100])$. Si, en cambio, se emplean valores reales. Por ejemplo, para el tellureno $L = 2a = 4.08\text{\AA}$ y para el grafeno con $L = a = 1.42\text{\AA}$. Se determina que una supercelda constituida aproximadamente por 30 planos en el primer caso, y 39 planos en el segundo, alcanzaría dimensiones que exceden teóricamente la escala del universo observable, cuyo diámetro estimado es de 8.8×10^{35} nm. Este resultado debe interpretarse únicamente como una extrapolación matemática sin aplicabilidad física. La situación es comparable al conocido ejemplo de una hoja de papel de 0.1 mm de espesor: si fuera posible doblarla 103 veces, su grosor también superaría el tamaño del universo observable, aunque dicho proceso es físicamente inviable.

La relevancia de estos cálculos radica en que, a medida que aumenta el número de redes superpuestas, el estudio de las propiedades físicas de los materiales se vuelve extremadamente complejo, tanto desde el punto de vista experimental como computacional (Kolář *et al.*, 2023). En la mayoría de trabajos recientes sobre estructuras de Moiré en materiales bidimensionales, la identificación de la supercelda conmensurable se realiza a través de simulaciones numéricas (Carnevali, Marcantoni, & Peressi, 2021). Esto implica un costo computacional elevado y, en algunos casos, la necesidad de aproximaciones adicionales para obtener celdas manejables.

Los resultados de la tabla 5 hacen que el costo computacional sea bajo, ya que el formalismo aquí propuesto constituye una alternativa analítica que permite determinar de manera directa los parámetros de la base $\{P_n, Q_n\}$ de la supercelda. De este modo, se proporciona una herramienta complementaria a los métodos de simulación, útil como paso previo para reducir la complejidad de los cálculos de primeros principios, el cálculo analítico de la celda conmensurable puede servir para optimizar el diseño de simulaciones numéricas más complejas para heteroestructuras de van der Waals.

Conclusiones

- En este trabajo se ha desarrollado un formalismo analítico que permite describir y calcular superceldas conmensurables en patrones de Moiré para redes cuadradas y hexagonales, tanto centradas como no centradas. Este enfoque unifica bajo un mismo marco matemático situaciones que usualmente se tratan de manera separada, evidenciando que la periodicidad emergente es consecuencia directa de la simetría subyacente.
- Más allá de su simplicidad conceptual, la propuesta tiene un valor práctico claro: posibilita anticipar el tamaño y la complejidad de las superceldas antes de recurrir a simulaciones numéricas de alto costo, como cálculos de estructura electrónica mediante DFT. De este modo, el formalismo se plantea como una herramienta complementaria que optimiza el diseño de estudios teóricos en materiales bidimensionales.
- Finalmente, una extensión natural de este marco es su aplicación a otras redes bidimensionales (rectangulares u oblicuas), así como la exploración de heteroestructuras con más de dos capas. Tales direcciones futuras podrían abrir nuevas vías para comprender y controlar los patrones de Moiré en materiales emergentes, consolidando el papel de este tipo de formulaciones analíticas en la investigación contemporánea de sistemas 2D.

Apéndice

Demostraciones matemáticas

Simetría Cuadrada

Esta demostración se realiza por medio de inducción, el ángulo entre los vectores base $\{P_n, Q_n\}$ es de 90°

- **Para 1 red sin rotar y 1 red rotada por θ_1 :**

En la literatura se conoce la base del vector de red de la primera supercelda, siendo estos mostrados en la ecuación (3):

$$P_1 = \begin{bmatrix} P_{1x} \\ P_{1y} \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 2az_1 \\ 2aw_1 \end{bmatrix} \quad Q_1 = \begin{bmatrix} Q_{1x} \\ Q_{1y} \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} -2aw_1 \\ 2az_1 \end{bmatrix}$$

- **Para 1 red sin rotar y 2 redes rotadas por θ_1 y θ_2 :**

La base de la supercelda para las superceldas de la intersección por separado de las 2 redes rotadas con la red sin rotar son las siguiente:

$$\begin{aligned} P_{r1} &= \begin{bmatrix} P_{r1x} \\ P_{r1y} \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 2az_1 \\ 2aw_1 \end{bmatrix} & Q_{r1} &= \begin{bmatrix} Q_{r1x} \\ Q_{r1y} \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} -2aw_1 \\ 2az_1 \end{bmatrix} \\ P_{r2} &= \begin{bmatrix} P_{r2x} \\ P_{r2y} \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 2az_2 \\ 2aw_2 \end{bmatrix} & Q_{r2} &= \begin{bmatrix} Q_{r2x} \\ Q_{r2y} \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} -2aw_2 \\ 2az_2 \end{bmatrix} \end{aligned}$$

Donde $T_1 = \mu_1 P_{r1} + \nu_1 Q_{r1}$ es el vector de la red de la intersección entre la red sin rotar con la red rotada θ_1 y $T_2 = \mu_2 P_{r2} + \nu_2 Q_{r2}$ es el vector de la red de la intersección entre la red sin rotar con la red rotada θ_2 . Dado que las dos redes son periódicas, los coeficientes $\{\mu_1, \nu_1, \mu_2, \nu_2\}$ deben ser enteros. Para garantizar la conmensurabilidad, los valores son $\{z_2, w_2, z_1, w_1\}$. Por lo tanto, la base del vector de red para la supercelda de la red sin rotar y las 2 redes rotadas es:

$$P_2 = \begin{bmatrix} P_{2x} \\ P_{2y} \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} z_2 P_{1x} + w_2 Q_{1x} \\ z_2 P_{1y} + w_2 Q_{1y} \end{bmatrix} \quad Q_2 = \begin{bmatrix} Q_{2x} \\ Q_{2y} \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} -z_2 P_{1y} - w_2 Q_{1y} \\ z_2 P_{1x} + w_2 Q_{1x} \end{bmatrix}$$

- **Para 1 red sin rotar y 3 redes rotadas por $\theta_1, \theta_2, \theta_3$:**

La base de la supercelda para las superceldas de la intersección por separado de las 3 redes rotadas con la red sin rotar son las siguientes:

$$\begin{aligned} P_{r1} &= \begin{bmatrix} P_{r1x} \\ P_{r1y} \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 2az_1 \\ 2aw_1 \end{bmatrix} & Q_{r1} &= \begin{bmatrix} Q_{r1x} \\ Q_{r1y} \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} -2aw_1 \\ 2az_1 \end{bmatrix} \\ P_{r2} &= \begin{bmatrix} P_{r2x} \\ P_{r2y} \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 2az_2 \\ 2aw_2 \end{bmatrix} & Q_{r2} &= \begin{bmatrix} Q_{r2x} \\ Q_{r2y} \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} -2aw_2 \\ 2az_2 \end{bmatrix} \\ P_{r3} &= \begin{bmatrix} P_{r3x} \\ P_{r3y} \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 2az_3 \\ 2aw_3 \end{bmatrix} & Q_{r3} &= \begin{bmatrix} Q_{r3x} \\ Q_{r3y} \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} -2aw_3 \\ 2az_3 \end{bmatrix} \end{aligned}$$

Utilizando el resultado anterior, ya se conoce el vector de red de la intersección entre una red sin rotar con 2 redes rotadas por θ_1 y θ_2 , siendo este $T_{12} = \mu_{12} P_2 + \nu_{12} Q_2$. Además también se conoce el vector de red de la intersección entre la red sin rotar con la red rotada por θ_3 , siendo este $T_3 = \mu_3 P_{r3} + \nu_3 Q_{r3}$. Para encontrar los puntos comunes se realiza por analogía lo mismo que se hizo para el caso anterior.

$$\begin{bmatrix} P_{2x} & Q_{2x} \\ P_{2y} & Q_{2y} \end{bmatrix} \cdot \begin{bmatrix} z_3 \\ w_3 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 2a\mu_3 & -2a\nu_3 \\ 2a\nu_3 & 2a\mu_3 \end{bmatrix} \cdot \begin{bmatrix} z_3 \\ w_3 \end{bmatrix}$$

Dado que las dos redes son periódicas, los coeficientes $\{\mu_{12}, \nu_{12}, \mu_3, \nu_3\}$ deben ser enteros. Para garantizar la conmensurabilidad, los valores son $\{z_3, w_3, P_{2x}/2a, P_{2y}/2a\}$.

Por lo tanto, la base del vector de red para la supercelda de la red sin rotar y las 2 redes rotadas es:

$$P_3 = \begin{bmatrix} P_{3x} \\ P_{3y} \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} z_3 P_{2x} + w_3 Q_{2x} \\ z_3 P_{2y} + w_3 Q_{2y} \end{bmatrix} \quad Q_3 = \begin{bmatrix} Q_{3x} \\ Q_{3y} \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} -z_3 P_{2y} - w_3 Q_{2y} \\ z_3 P_{2x} + w_3 Q_{2x} \end{bmatrix}$$

• **Para 1 red sin rotar y n redes rotadas por $\theta_1, \theta_2, \theta_3 \dots \theta_n, \theta_{n+1}$:**

Por medio de inducción se puede saber que la base de la intersección por separado de las n redes rotadas con la red sin rotar son las siguientes:

$$\begin{aligned} P_{r1} &= \begin{bmatrix} P_{r1x} \\ P_{r1y} \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 2az_1 \\ 2aw_1 \end{bmatrix} & Q_{r1} &= \begin{bmatrix} Q_{r1x} \\ Q_{r1y} \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} -2aw_1 \\ 2az_1 \end{bmatrix} \\ P_{r2} &= \begin{bmatrix} P_{r2x} \\ P_{r2y} \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 2az_2 \\ 2aw_2 \end{bmatrix} & Q_{r2} &= \begin{bmatrix} Q_{r2x} \\ Q_{r2y} \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} -2aw_2 \\ 2az_2 \end{bmatrix} \\ & \vdots & & \vdots \\ P_{rn} &= \begin{bmatrix} P_{rnx} \\ P_{rny} \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 2az_n \\ 2aw_n \end{bmatrix} & Q_{rn} &= \begin{bmatrix} Q_{rn} \\ Q_{rn} \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} -2aw_n \\ 2az_n \end{bmatrix} \\ P_{r(n+1)} &= \begin{bmatrix} P_{r(n+1)x} \\ P_{r(n+1)y} \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 2az_{n+1} \\ 2aw_{n+1} \end{bmatrix} & Q_{r(n+1)} &= \begin{bmatrix} Q_{r(n+1)} \\ Q_{r(n+1)} \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} -2aw_{n+1} \\ 2az_{n+1} \end{bmatrix} \end{aligned}$$

Utilizando el resultado anterior y realizando la misma analogía, se puede intuir que el vector de red de la intersección entre una red sin rotar con las n redes rotadas por $\theta_1, \theta_2, \theta_3 \dots \theta_n$, siendo este $T_{1n} = \mu_{1n}P_n + \nu_{1n}Q_n$. Además también se conoce el vector de red de la intersección entre la red sin rotar con la red rotada por θ_{n+1} , siendo este $T_{n+1} = \mu_{n+1}P_{r(n+1)} + \nu_{n+1}Q_{r(n+1)}$. Dado que las dos redes son periódicas, los coeficientes $\{\mu_{1n}, \nu_{1n}, \mu_{n+1}, \nu_{n+1}\}$ para garantizar la conmensurabilidad, los valores son $\{z_{n+1}, w_{n+1}, P_{nx}/2a, P_{ny}/2a\}$. Por lo tanto, la base del vector de red para la supercelda de la red sin rotar y las n + 1 redes rotadas es:

$$\begin{aligned} P_{n+1} &= \begin{bmatrix} P_{(n+1)x} \\ P_{(n+1)y} \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} z_{n+1}P_{nx} + w_{n+1}Q_{nx} \\ z_{n+1}P_{ny} + w_{n+1}Q_{ny} \end{bmatrix} \\ Q_{n+1} &= \begin{bmatrix} Q_{(n+1)x} \\ Q_{(n+1)y} \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} -z_{n+1}P_{ny} - w_{n+1}Q_{ny} \\ z_{n+1}P_{nx} + w_{n+1}Q_{nx} \end{bmatrix} \end{aligned}$$

Hemos mostrado que la proposición es cierta para $n = 1$ (caso base), y que si es cierta para un n cualquiera, entonces también lo es para n + 1 (paso inductivo). Por el principio de inducción matemática, se concluye que la proposición es válida para todo $n \in \mathbb{N}$.

Simetría Hexagonal

Esta demostración se realiza por medio de inducción, el ángulo entre los vectores base $\{P_n, Q_n\}$ es de 60°

• **Para 1 red sin rotar y 1 red rotada por θ_1 :**

En la literatura se conoce la base del vector de red de la primera supercelda, siendo estos mostrados en la ecuación (4):

$$\begin{aligned} P_1 &= \begin{bmatrix} P_{1x} \\ P_{1y} \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} \sqrt{3}a(2z_1 + w_1)/2 \\ 3a(w_1)/2 \end{bmatrix} \\ Q_1 &= \begin{bmatrix} Q_{1x} \\ Q_{1y} \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} -\sqrt{3}a(w_1 - z_1)/2 \\ 3a(w_1 + z_1)/2 \end{bmatrix} \end{aligned}$$

• **Para 1 red sin rotar y 2 redes rotadas por θ_1 y θ_2 :**

La base de la supercelda para las superceldas de la intersección por separado de las 2 redes rotadas con la red sin rotar son las siguiente:

$$P_{r1} = \begin{bmatrix} P_{r1x} \\ P_{r1y} \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} \sqrt{3}a(2z_1 + w_1)/2 \\ 3a(w_1)/2 \end{bmatrix} \quad Q_{r1} = \begin{bmatrix} Q_{r1x} \\ Q_{r1y} \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} -\sqrt{3}a(w_1 - z_1)/2 \\ 3a(w_1 + z_1)/2 \end{bmatrix}$$

$$P_{r2} = \begin{bmatrix} P_{r2x} \\ P_{r2y} \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} \sqrt{3}a(2z_2 + w_2)/2 \\ 3a(w_2)/2 \end{bmatrix} \quad Q_{r2} = \begin{bmatrix} Q_{r2x} \\ Q_{r2y} \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} -\sqrt{3}a(w_2 - z_2)/2 \\ 3a(w_2 + z_2)/2 \end{bmatrix}$$

Donde $T_1 = \mu_1 P_{r1} + \nu_1 Q_{r1}$ es el vector de la red de la intersección entre la red sin rotar con la red rotada θ_1 y $T_2 = \mu_2 P_{r2} + \nu_2 Q_{r2}$ es el vector de la red de la intersección entre la red sin rotar con la red rotada θ_2 . Dado que las dos redes son periódicas, los coeficientes $\{\mu_1, \nu_1, \mu_2, \nu_2\}$ deben ser enteros. Para garantizar la conmensurabilidad, los valores son $\{z_2, w_2, z_1, w_1\}$. Por lo tanto, la base del vector de red para la supercelda de la red sin rotar y las 2 redes rotadas es:

$$P_2 = \begin{bmatrix} P_{2x} \\ P_{2y} \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} z_2 P_{1x} + w_2 Q_{1x} \\ z_2 P_{1y} + w_2 Q_{1y} \end{bmatrix} \quad Q_2 = \begin{bmatrix} Q_{2x} \\ Q_{2y} \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} P_{2x} \cos 60^\circ - P_{2y} \sin 60^\circ \\ P_{2x} \sin 60^\circ + P_{2y} \cos 60^\circ \end{bmatrix}$$

• **Para 1 red sin rotar y 3 redes rotadas por $\theta_1, \theta_2, \theta_3$:**

La base de la supercelda para las superceldas de la intersección por separado de las 3 redes rotadas con la red sin rotar son las siguientes:

$$P_{r1} = \begin{bmatrix} P_{r1x} \\ P_{r1y} \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} \sqrt{3}a(2z_1 + w_1)/2 \\ 3a(w_1)/2 \end{bmatrix} \quad Q_{r1} = \begin{bmatrix} Q_{r1x} \\ Q_{r1y} \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} -\sqrt{3}a(w_1 - z_1)/2 \\ 3a(w_1 + z_1)/2 \end{bmatrix}$$

$$P_{r2} = \begin{bmatrix} P_{r2x} \\ P_{r2y} \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} \sqrt{3}a(2z_2 + w_2)/2 \\ 3a(w_2)/2 \end{bmatrix} \quad Q_{r2} = \begin{bmatrix} Q_{r2x} \\ Q_{r2y} \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} -\sqrt{3}a(w_2 - z_2)/2 \\ 3a(w_2 + z_2)/2 \end{bmatrix}$$

$$P_{r3} = \begin{bmatrix} P_{r3x} \\ P_{r3y} \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} \sqrt{3}a(2z_3 + w_3)/2 \\ 3a(w_3)/2 \end{bmatrix} \quad Q_{r3} = \begin{bmatrix} Q_{r3x} \\ Q_{r3y} \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} -\sqrt{3}a(w_3 - z_3)/2 \\ 3a(w_3 + z_3)/2 \end{bmatrix}$$

Utilizando el resultado anterior, ya se conoce el vector de red de la intersección entre una red sin rotar con 2 redes rotadas por θ_1 y θ_2 , siendo este $T_{12} = \mu_{12} P_2 + \nu_{12} Q_2$. Además también se conoce el vector de red de la intersección entre la red sin rotar con la red rotada por θ_3 , siendo este $T_3 = \mu_3 P_{r3} + \nu_3 Q_{r3}$. Para encontrar los puntos comunes se realiza por analogía lo mismo que se hizo para el caso anterior.

$$\begin{bmatrix} P_{2x} & Q_{2x} \\ P_{2y} & Q_{2y} \end{bmatrix} \cdot \begin{bmatrix} z_3 \\ w_3 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} \sqrt{3}a(\mu_3 + \nu_3/2) & \sqrt{3}a(\mu_3/2 - \nu_3/2) \\ 3a\nu_3/2 & 3a(\mu_3/2 + \nu_3/2) \end{bmatrix} \cdot \begin{bmatrix} z_3 \\ w_3 \end{bmatrix}$$

Dado que las dos redes son periódicas, los coeficientes $\{\mu_{12}, \nu_{12}, \mu_3, \nu_3\}$ deben ser enteros. Para garantizar la conmensurabilidad, los valores son $\{z_3, w_3, (\sqrt{3}P_{2x} - P_{2y})/3a, 2P_{2y}/3a\}$. Por lo tanto, la base del vector de red para la supercelda de la red sin rotar y las 2 redes rotadas es:

$$P_3 = \begin{bmatrix} P_{3x} \\ P_{3y} \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} z_3 P_{2x} + w_3 Q_{2x} \\ z_3 P_{2y} + w_3 Q_{2y} \end{bmatrix} \quad Q_3 = \begin{bmatrix} Q_{3x} \\ Q_{3y} \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} P_{3x} \cos 60^\circ - P_{3y} \sin 60^\circ \\ P_{3x} \sin 60^\circ + P_{3y} \cos 60^\circ \end{bmatrix}$$

• **Para 1 red sin rotar y n redes rotadas por $\theta_1, \theta_2, \theta_3 \dots \theta_n, \theta_{n+1}$:**

Por medio de inducción se puede saber que la base de la intersección por separado de

las n redes rotadas con la red sin rotar son las siguientes:

$$\begin{aligned}
 P_{r1} &= \begin{bmatrix} P_{r1x} \\ P_{r1y} \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} \sqrt{3}a(2z_1 + w_1)/2 \\ 3a(w_1)/2 \end{bmatrix} & Q_{r1} &= \begin{bmatrix} Q_{r1x} \\ Q_{r1y} \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} -\sqrt{3}a(w_1 - z_1)/2 \\ 3a(w_1 + z_1)/2 \end{bmatrix} \\
 P_{r2} &= \begin{bmatrix} P_{r2x} \\ P_{r2y} \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} \sqrt{3}a(2z_2 + w_2)/2 \\ 3a(w_2)/2 \end{bmatrix} & Q_{r2} &= \begin{bmatrix} Q_{r2x} \\ Q_{r2y} \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} -\sqrt{3}a(w_2 - z_2)/2 \\ 3a(w_2 + z_2)/2 \end{bmatrix} \\
 &\vdots & & \vdots \\
 P_{rn} &= \begin{bmatrix} P_{rnx} \\ P_{rny} \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} \sqrt{3}a(2z_n + w_n)/2 \\ 3a(w_n)/2 \end{bmatrix} & Q_{rn} &= \begin{bmatrix} Q_{rnx} \\ Q_{rny} \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} -\sqrt{3}a(w_n - z_n)/2 \\ 3a(w_n + z_n)/2 \end{bmatrix} \\
 P_{r(n+1)} &= \begin{bmatrix} P_{r(n+1)x} \\ P_{r(n+1)y} \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} \frac{\sqrt{3}}{2}a(2z_{n+1} + w_{n+1}) \\ \frac{3}{2}a(w_{n+1}) \end{bmatrix} & Q_{r(n+1)} &= \begin{bmatrix} Q_{r(n+1)x} \\ Q_{r(n+1)y} \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} -\frac{\sqrt{3}}{2}a(w_{n+1} - z_{n+1}) \\ \frac{3}{2}a(w_{n+1} + z_{n+1}) \end{bmatrix}
 \end{aligned}$$

Utilizando el resultado anterior y realizando la misma analogía, se puede intuir que el vector de red de la intersección entre una red sin rotar con las n redes rotadas por $\theta_1, \theta_2, \theta_3 \dots \theta_n$, siendo este $T_{1n} = \mu_{1n}P_n + \nu_{1n}Q_n$. Además también se conoce el vector de red de la intersección entre la red sin rotar con la red rotada por θ_{n+1} , siendo este $T_{n+1} = \mu_{n+1}P_{r(n+1)} + \nu_{n+1}Q_{r(n+1)}$. Dado que las dos redes son periódicas, los coeficientes $\{\mu_{1n}, \nu_{1n}, \mu_{n+1}, \nu_{n+1}\}$ para garantizar la conmensurabilidad, los valores son $\{z_{n+1}, w_{n+1}, (\sqrt{3}P_{nx} - P_{ny})/3a, 2P_{ny}/3a\}$. Por lo tanto, la base del vector de red para la supercelda de la red sin rotar y las $n + 1$ redes rotadas es:

$$\begin{aligned}
 P_{n+1} &= \begin{bmatrix} P_{(n+1)x} \\ P_{(n+1)y} \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} z_{n+1}P_{nx} + w_{n+1}Q_{nx} \\ z_{n+1}P_{ny} + w_{n+1}Q_{ny} \end{bmatrix} \\
 Q_{n+1} &= \begin{bmatrix} Q_{(n+1)x} \\ Q_{(n+1)y} \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} P_{(n+1)x} \cos 60^\circ - P_{(n+1)y} \sin 60^\circ \\ P_{(n+1)x} \sin 60^\circ + P_{(n+1)y} \cos 60^\circ \end{bmatrix}
 \end{aligned}$$

Hemos mostrado que la proposición es cierta para $n = 1$ (caso base), y que si es cierta para un n cualquiera, entonces también lo es para $n + 1$ (paso inductivo). Por el principio de inducción matemática, se concluye que la proposición es válida para todo $n \in \mathbb{N}$.

Figuras Suplementarias

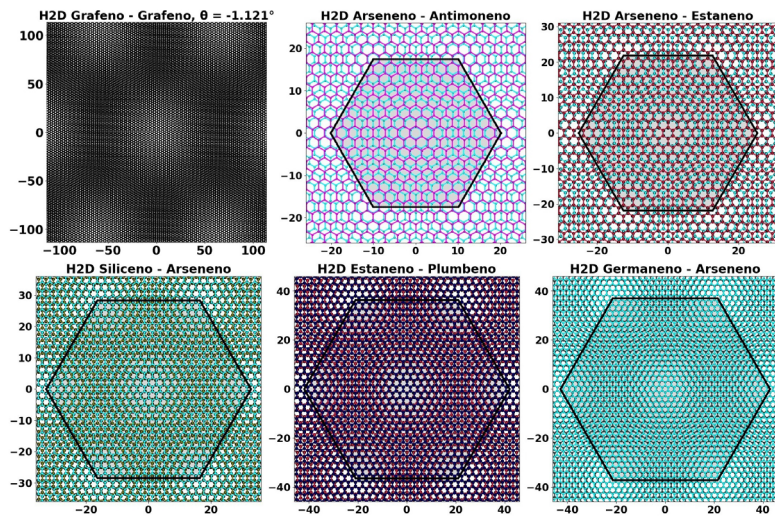


Figura A1. Patrón de Bravais-Moiré para materiales 2D reales con parámetro reducido $a = a_0/\sqrt{3}$. Donde a_0 es el valor real del lado del hexágono del material 2D real.

Contribución de los autores

Freddy Mendoza Villa: conceptualización, desarrollo del modelo matemático, análisis de resultados, redacción del documento y revisión final del manuscrito. Kevin Martin Amiquero Bravo: análisis de resultados y revisión final del manuscrito.

Conflicto de intereses

Nosotros, los autores, declaramos que no tenemos ningún tipo de conflicto o interés en la investigación de este trabajo.

Referencias

- Bareño-Silva, J., Bedoya-Calle, Á., Gómez-Urrea, H., Caro-Lopera, F.** (2024) Band separation and electric field prediction in square bravais-moiré photonic crystals. *Heliyon*, 10(7).
- Carnevali, V., Marcantoni, S., Peressi, M.** (2021) Moiré patterns generated by stacked 2d lattices: A general algorithm to identify primitive coincidence cells. *Computational Materials Science*, 196, 110516.
- Chegel, R., Behzad, S.** (2020) Tunable electronic, optical, and thermal properties of two-dimensional germanene via an external electric field. *Scientific Reports*, 10(1), 704.
- Das, D. K., Sarkar, J., Singh, S.** (2018) Effect of sample size, temperature and strain velocity on mechanical properties of plumbene by tensile loading along longitudinal direction: A molecular dynamics study. *Computational Materials Science*, 151, 196–203.
- Dunbrack, A., Cano, J.** (2023) Intrinsically multilayer moiré heterostructures. *Physical Review B*, 107(23), 235425.
- García-Bello, J. L., Batista-Luna, T. T., Villar-Goris, N. A., Camué-Ciria, H. M., Cid-Pérez, D.** (2023) Grafeno: Producción, caracterización y aplicaciones. *Tecnología Química*, 43(1), 59–80.
- Gómez, A. R.** (2004) Ecuaciones diofánticas. *Isagogé*, (1), 9.
- Huang, H.-H., He, Q.** (2024) Nonlinear regression analysis. *arXiv preprint arXiv:2402.05342*.
- Insad, S., Drissi, L. B., Et al.** (2022) Two-dimensional stanene: Electron-phonon interaction. *Materials Today: Proceedings*, 53, 437–440.
- Kolář, K., Zhang, Y., Nadj-Perge, S., von Oppen, F., Lewandowski, C.** (2023) Electrostatic fate of n -layer moiré graphene. *Physical Review B*, 108(19), 195148.
- Li, C., Fan, B., Li, W., Wen, L., Liu, Y., Wang, T., Sheng, K., Yin, Y.** (2015) Bandgap engineering of monolayer mos 2 under strain: A dft study. *Journal of the Korean Physical Society*, 66, 1789–1793.
- Li, S.-y., Xu, Z., Wang, Y., Han, Y., Watanabe, K., Taniguchi, T., Song, A., Ma, T.-B., Gao, H.-J., Jiang, Y., Et al.** (2024) Quasiperiodic moiré reconstruction and modulation of electronic properties in twisted bilayer graphene aligned with hexagonal boron nitride. *Physical Review Letters*, 133(19), 196401.
- Mei, H., Zhong, Y., He, D., Du, X., Li, C., Cheng, N.** (2020) Elastic, electronic and optical properties of new 2d and 3d boron nitrides. *Scientific Reports*, 10(1), 7873.
- Mendoza-Villa, F., Manrique-Castillo, E. V., Passamani, E. C., Ramos-Guivar, J. A.** (2024) Towards the analytical generalization of the transcendental energy equation, group velocity, and effective mass in one-dimensional periodic potential wells with a computational application to common coupled potentials. *Applied Sciences*, 14(10), 3987.

- Mendoza-Villa, F., Ramos-Guivar, J. A., Espinoza-Bernardo, R.** (2024) Generalized one-dimensional periodic potential wells tending to the dirac delta potential. *Physics*, 6(1), 75–93.
- Mozvashi, S. M., Vishkayi, S. I., Tagani, M. B.** (2020) Antimonene/bismuthene vertical van-der waals heterostructure: A computational study. *Physica E: Low-dimensional Systems and Nanostructures*, 118, 113914.
- Ospina Medina, M. C.** (2017) Modelos matemáticos para la descripción de patrones de moiré en redes de bravais.
- Shallcross, S., Sharma, S., Kandelaki, E., Pankratov, O.** (2010) Electronic structure of turbostratic graphene. *Physical Review B—Condensed Matter and Materials Physics*, 81(16), 165105.
- Shallcross, S., Sharma, S., Pankratov, O. A.** (2008) Quantum interference at the twist boundary in graphene. *Physical review letters*, 101(5), 056803.
- Stephan, R., Hanf, M.-C., Sonnet, P.** (2015) Molecular functionalization of silicene/ag (111) by covalent bonds: A dft study. *Physical Chemistry Chemical Physics*, 17(22), 14495–14501.
- Tani, T., Hitomi, M., Kawakami, T., Koshino, M.** (2022) Topological edge and corner states and fractional corner charges in blue phosphorene. *Physical Review B*, 105(7), 075407.
- Tian, Y.-P., Wang, C.-B., Gong, W.-J.** (2023) Arsenene as a promising sensor for the detection of h₂ s: A first-principles study. *RSC advances*, 13(4), 2234–2247.
- Wu, Y., Sun, M.** (2024) 2d moiré superlattice materials: Synthesis, properties and applications. *Applied Materials Today*, 37, 102101.
- Xian, L., Paz, A. P., Bianco, E., Ajayan, P. M., Rubio, A.** (2017) Square selenene and tellurene: Novel group vi elemental 2d materials with nontrivial topological properties. *2D Materials*, 4(4), 041003.