



Influencia del procedimiento de re-escalado sobre la estadística de separación de niveles electrónicos: Aplicación a nanopartículas de plata

L. R. Medrano*, C. V. Landauro y J. Rojas

Facultad de Ciencias Físicas, Universidad Nacional Mayor de San Marcos, Ap-Postal 14-0149, Lima 14, Perú.

Recibido 11 enero 2011 – Aceptado 30 marzo 2011

En el presente trabajo se estudia la influencia del procedimiento de re-escalado sobre la estadística de separación de niveles electrónicos de nanopartículas de plata (en su configuración más estable) con 923 y 2057 átomos, las cuales fueron obtenidas mediante simulación de dinámica molecular empleando un potencial tipo *tight-binding*. Los resultados indican que existe una fuerte dependencia del parámetro de Brody con el grado “ n ” del polinomio usado para realizar el método de re-escalado, sobre todo para n pequeño. Para $n \geq 6$ el parámetro de Brody, independientemente del tamaño de las nanopartículas, permanece casi constante. Así, se determinó que el parámetro de Brody está cercano al valor correspondiente a la distribución de Wigner, lo cual es esperado para sistemas en el régimen metálico. **Palabras claves:** Nanopartículas de plata, Estadística de separación de niveles, Método de re-escalado.

Influence of the unfolding procedure on the electronic level spacing statistics: Application to silver nanoparticles

In the present work we study the influence of the unfolding procedure on the electronic level spacing statistics of silver nanoparticles (in their most stable configuration) with 923 and 2057 atoms, which were obtained employing molecular dynamics simulation with a tight-binding potential. The results indicate that there is a strong dependence of the Brody parameter with the degree “ n ” of the polynomial used to make the unfolding procedure, especially for small n . For $n \geq 6$ the Brody parameter, independently of the nanoparticle sizes, remains almost constant. Thus, it was determined that the Brody parameter is close to the value corresponding to the Wigner distribution, which is expected for systems in the metallic regime.

Keywords: Silver nanoparticles, Level spacing statistics, Unfolding procedure.

Durante las pasadas dos décadas, nanopartículas metálicas (agregados finitos conteniendo hasta unos pocos miles de átomos) han sido objeto de extensivas investigaciones teóricas y experimentales debido a sus peculiares propiedades físicas y químicas [1–4], las cuales, en algunos casos, difieren bastante de sus contrapartes sólidas. Estas investigaciones han ido incrementándose con el transcurso de los años debido a que estos materiales son la base para el desarrollo de la nanotecnología [1, 5]. Particularmente las nanopartículas de plata tienen un alto potencial para aplicaciones tecnológicas en diferentes campos, los cuales incluyen la electrónica, medicina y biología [6, 7].

En el campo al que se refiere el estudio de las propiedades electrónicas de diversos sistemas, se ha realizado

una gran variedad de investigaciones empleando la estadística de separación de niveles electrónicos [8–12]. A pesar de que esta teoría estadística de niveles ha sido aplicada ampliamente a sistemas uni, bi y tridimensionales [13–16] (entre estos sistemas tenemos al grafeno [17]), existen pocos reportes donde se ha usado esta teoría estadística para describir el comportamiento electrónico en sistemas de dimensión cuasi-cero como son consideradas las nanopartículas [12, 18, 19]. Aún no se sabe con certeza como influenciará la variación de ciertos factores de esta teoría en el estudio de las propiedades electrónicas de estos nanomateriales. Pero lo que sí es bien sabido es que para poder realizar un buen estudio con esta teoría antes se tiene que realizar un método de re-escalado (del inglés, *unfolding*) ade-

*leonardoms20@gmail.com

cuado. Es tanta la importancia de desarrollar un buen método de re-escalado que la elección de cómo realizar este método ha sido estudiada en detalle por diversos investigadores [20, 21].

Dentro del contexto indicado líneas arriba, en el presente trabajo analizaremos el espectro de energías de las nanopartículas Ag₉₂₃ y Ag₂₀₅₇, y la influencia del método de re-escalado sobre el mismo. Para ello utilizaremos una expansión polinomial de diferentes grados para realizar el método de re-escalado, similar a lo realizado en las Refs. [8, 18, 19]. Con el fin de realizar un mejor estudio de la influencia de éste método sobre las propiedades electrónicas de las nanopartículas nos concentraremos en estudiar la distribución de separación de niveles electrónicos más cercanos, la cual es una herramienta importante para caracterizar las propiedades electrónicas de un sistema [8–12]. Con esto podremos comparar nuestros resultados con aquellos esperados dentro de la teoría de matrices aleatorias, *Random Matrix Theory*, RMT [21], la cual ha sido aplicada con éxito en muchos dominios de la física [22].

Este artículo está organizado de la siguiente manera: en la sección 2 se indican los detalles estructurales de las nanopartículas Ag₉₂₃ y Ag₂₀₅₇. En la sección 3 se presenta el Hamiltoniano *tight-binding* y la densidad de estados electrónicos. En la sección 4 se indican algunos conceptos básicos sobre la estadística de separación de niveles y el método de re-escalado. Los resultados y discusiones son presentados en la sección 5. Finalmente, las conclusiones del trabajo son dadas en la sección 6.

1. Estructura atómica de las nanopartículas

Las nanopartículas de plata con 923 y 2057 átomos fueron preparadas mediante simulación de dinámica molecular, *Molecular Dynamic* (MD) empleando el potencial de muchos cuerpos desarrollado por Cleri y Rosato [23] sobre la aproximación del segundo momento en el esquema *tight-binding*. Las nanopartículas de plata llegaron a su configuración de mínima energía después de realizar un proceso de enfriamiento a 5 K/ns a las nanopartículas en estado líquido, similar a lo realizado por Baletto *et. al.* [24, 25].

El análisis estructural fue realizado mediante el estudio de la función de correlación de pares, *Pair Correlation Function* (PCF) $g(r)$, la cual ha sido ampliamente usada para describir la estructura atómica de diversos materiales en estado amorfo, líquido y cristalino [19, 26, 27]. Además, se usó la técnica de vecinos comunes (CNA), introducida por Honeycutt y Andersen [28], la cual define cuatro índices (i, j, k, m) para las relaciones entre los pares de átomos en el sistema de tal manera que se pueda analizar el ambiente estructural

local.

2. Hamiltoniano electrónico tipo *tight-binding*

Para poder aplicar el método de re-escalado, primero tenemos que determinar la densidad de estados electrónicos (*EDOS*, del inglés *Electronic Density of States*) de las nanopartículas. Para este fin empleamos un Hamiltoniano electrónico tipo *tight-binding*, similar al usado en [18, 27] y que viene dado por

$$H = \sum_{\vec{R}} \sum_{\vec{R}'} |\vec{R}\rangle H_{R,R'} \langle \vec{R}'|, \quad (1)$$

donde $\{|\vec{R}\rangle\}$ es la base ortonormal (tipo atómica) centrada en el sitio \vec{R} con un orbital s en cada sitio. Los elementos de matriz $H_{R,R'}$ vienen dados por

$$H_{R,R'} = \begin{cases} \varepsilon_0 & \text{si } \vec{R} = \vec{R}' \\ t_0 & \text{si } |\vec{R} - \vec{R}'| \leq r_c, \\ 0 & \text{si } |\vec{R} - \vec{R}'| > r_c \end{cases}, \quad (2)$$

con ε_0 y t_0 como la energía de sitio y el parámetro *hopping*, respectivamente. r_c se define como la distancia promedio a los primeros vecinos (desde un átomo dado). Las posiciones atómicas $\{\vec{R}\}$ son conocidas de la simulación de MD (mire sección anterior) y fijadas para determinar las propiedades electrónicas.

En este trabajo realizamos la diagonalización directa del Hamiltoniano para obtener las autoenergías, las cuales empleamos para calcular la *EDOS*, que matemáticamente se define como una sumatoria de funciones deltas centradas en las autoenergías $\{E_i\}$ [19]. Sin embargo, debido a limitaciones de carácter numérico se hace la siguiente aproximación [19]

$$\eta(E) \approx \sum_{i=1}^N \frac{1}{\gamma\sqrt{2\pi}} e^{-\frac{1}{2}\left(\frac{E-E_i}{\gamma}\right)^2}, \quad (3)$$

donde γ controla el ancho de la distribución de Gauss centrada alrededor de E_i . Finalmente, a partir de esta ecuación se define la integral de la densidad de estados electrónicos (*IDOS*, del inglés *Integrated Density of States*) como

$$I(E) = \int_{-\infty}^E \eta(x) dx. \quad (4)$$

3. Estadística de separación de niveles

La idea de una descripción estadística de los niveles de energía fue propuesta primero por Wigner, para el estudio de niveles nucleares altamente excitados en un núcleo complejo. Desde entonces se ha evidenciado como una herramienta importante para estudiar muchos sistemas complejos [9]. En esta teoría estadística

de niveles existen propiedades estadísticas (o estadísticos) basadas en la separación de niveles electrónicos, s . Una de ellas, y la más estudiada, es la distribución de separación de niveles de energía, $P(s)$, la cual se discutirá más adelante. Sin embargo, antes de realizar el cálculo de cualquier estadístico, se tiene que realizar el método de re-escalado al espectro de energías del sistema [20]. Ello se discutirá en la siguiente sub-sección.

3.1. Método de re-escalado

La idea principal de este método consiste en descomponer la densidad de estados electrónicos en una parte media $\bar{\eta}(E)$ y una parte fluctuante $\tilde{\eta}(E)$. Esta densidad media es una propiedad específica y esta relacionada al carácter regular ó caótico de cada sistema cuántico [21]. Además, debe ser sustraída para comparar resultados de sistemas distintos. Para realizar esto, se necesita reescalar el espectro de tal manera que la densidad media sea la unidad; es decir, $\bar{\eta}(E) = 1$. La forma más sencilla y eficaz de eliminar la contribución de $\bar{\eta}(E)$ en el espectro es transformando la secuencia de niveles E_i en una secuencia adimensional e_i de la siguiente manera:

$$E_i \rightarrow e_i = \bar{I}(E_i), \quad i = 1, 2, \dots, N, \quad (5)$$

donde N es la dimensión del espectro e $\bar{I}(E_i)$ es la *IDOS* media (es decir, calculada a partir de la ec. (4) con $\bar{\eta}(E)$). Después, la separación de niveles de energía más cercanos estará definida por $s_i = e_{i+1} - e_i$, donde e_i vendrían a denominarse las energías reescaladas [29]. Existen diversas maneras de realizar el método de re-escalado al espectro de energías [8, 10, 29]. Para el desarrollo de este trabajo se ha optado por usar una expansión polinomial de grado n (el cual variará de 1 hasta 15) para ajustar la *IDOS* de las nanopartículas, similar a lo realizado en la Ref. [8].

Para poder realizar un mejor estudio de la influencia del grado de la expansión polinomial se define la función $\phi(n)$ como

$$\phi(n) = \int_0^\infty [I_{Ag_N}(E) - \bar{I}_n(E)]^2 dE. \quad (6)$$

donde $I_{Ag_N}(E)$ es la densidad de estados integrada para la nanopartícula de plata con N átomos e $\bar{I}_n(E)$ es la *IDOS* media obtenida para el polinomio de grado n utilizado en el método de re-escalado.

3.2. Distribución de separación de niveles electrónicos

Es bien sabido que los sistemas desordenados que se encuentran en el régimen metálico (régimen débilmente

desordenado) presentan una distribución $P(s)$ (en unidades de la separación media $\langle s \rangle$) de tipo

$$P_W(s) = \frac{\pi}{2} s \exp\left(-\frac{\pi}{4} s^2\right). \quad (7)$$

La cual es conocida como la distribución de Wigner y es una buena aproximación a la $P(s)$ correspondiente al Ensemble Gaussiano Ortogonal (GOE) de RMT. Mientras que en el régimen aislante (régimen fuertemente desordenado) la distribución de separación de niveles sigue la ley de Poisson [10]; es decir,

$$P_P(s) = \exp(-s). \quad (8)$$

Para estadísticas intermedias se han desarrollado numerosas distribuciones que interpolan entre los dos casos extremos mencionados líneas arriba. Aunque ninguna es completamente satisfactoria teóricamente, ellas sirven para evaluar cuantitativamente el grado de desorden de un sistema dado. La más utilizada es la distribución de Brody [22]

$$P(s, \beta) = \alpha(\beta + 1) s^\beta \exp(-\alpha s^{\beta+1}), \quad (9)$$

con $\alpha = \left(\Gamma \frac{\beta + 2}{\beta + 1}\right)^{\beta+1}$ y Γ la conocida función Gamma. Ésta distribución interpola entre el caso Poisson (correspondiente a $\beta = 0$) y el caso Wigner (correspondiente a $\beta = 1$) [20]. El parámetro estadístico β de la distribución de Brody está relacionado con la repulsión energética entre los niveles.

4. Resultados y discusión

El análisis estructural de las nanopartículas Ag₉₂₃ y Ag₂₀₅₇, a través del estudio de la función de correlación de pares, nos indica que las nanopartículas presentan un orden bien definido como en los cristales (pero siempre teniendo en cuenta que las nanopartículas son sistemas finitos), debido a que sus correspondientes $g(r)$ presentan picos bien definidos (ver fig. 1) [19]. Además, se tiene que las configuraciones atómicas de las nanopartículas de plata presentan facetas, las cuales son característica principal de nanopartículas en estado cristalino [25]. Estos resultados se comprobaron con el análisis de índices de pares, ya que los porcentajes de abundancia del índice 1421, correspondiente a la estructura cristalina FCC, para las nanopartículas Ag₉₂₃ y Ag₂₀₅₇ eran 61 % y 69 % respectivamente. Es decir, la estructura FCC es la que predomina entre las demás estructuras existentes en las nanopartículas de plata. Resultados similares fueron reportados por Baletto *et al.* [5, 24, 25].

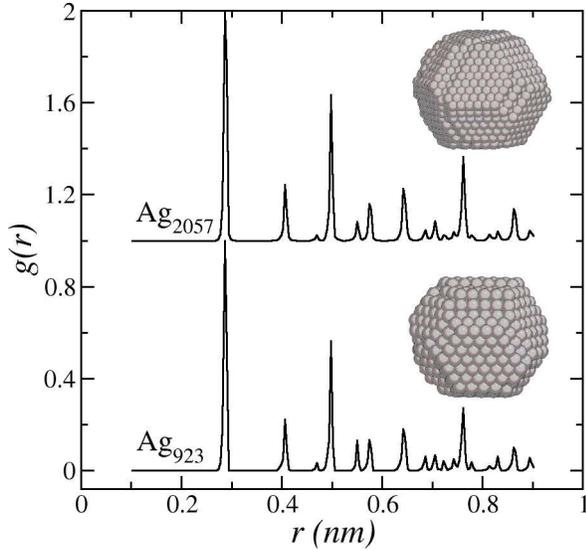


Figura 1: Función de correlación de pares de las nanopartículas Ag₉₂₃ y Ag₂₀₅₇. Las configuraciones atómicas de estas nanopartículas son mostradas dentro de cada figura.

Por otro lado, para determinar la densidad de estados electrónicos de las nanopartículas se emplearon los siguientes valores: $t_0 = 1$ eV (energía de referencia), $\varepsilon_0/t_0 = 0$, $\gamma/t_0 = 0.06$ y $\Delta E/t_0 = 0.02$ (paso en energía). El valor de γ fue escogido después de realizar amplios estudios de su influencia en la EDOS. De esta manera, se obtuvieron las densidades de estados electrónicos de las nanopartículas de plata Ag₉₂₃ y Ag₂₀₅₇ (ver fig. 2a y 2b, respectivamente), siendo la EDOS perteneciente a la nanopartícula Ag₂₀₅₇ la que está principalmente definida por los átomos internos del sistema (*bulk*), donde la contribución de la superficie es despreciable. Al contrario, para la nanopartícula Ag₉₂₃ la EDOS aún se mantiene influenciada apreciablemente por la superficie [27]. Además, se encontró que a medida que aumenta el tamaño de la nanopartícula la densidad de estados electrónicos se asemeja a la correspondiente de una estructura FCC [30] (ver fig. 2c), como es de esperarse debido a que la plata en estado *bulk* presenta este tipo de estructura. En un estudio no mostrado aquí realizado a un conjunto de nanopartículas de plata de diferentes tamaños [19]], se obtuvo que, desde el punto de vista electrónico, nanopartículas con diámetro más grandes que ~ 4 nm (alrededor de los 2000 átomos) se comportan similarmente a su contraparte sólida. Resultados similares tanto teóricamente [18, 30] como experimentalmente [31, 32] se han obtenido para nanopartículas de cobre.

Una vez analizada la EDOS de las nanopartículas de plata se procedió a realizar el procedimiento de re-escalado para posteriormente realizar el cálculo de la distribución de separación de niveles electrónicos. Como

se mencionó anteriormente, para realizar el re-escalado del espectro de energías se usó una expansión polinomial de grado n , la cual se utiliza para ajustar la IDOS y de esta manera obtener la IDOS media $\bar{I}_n(E)$. Se utilizaron diferentes grados de polinomio con el fin de encontrar cual era el adecuado para realizar el método de re-escalado. En la figura 3a se muestran las IDOS medias obtenidas para polinomios con $n \leq 6$. Como se puede observar en esta figura, para grados menores que 6 la IDOS media no presenta el mismo comportamiento que la correspondiente a la nanopartícula Ag₂₀₅₇ (ver figura 3b). Sin embargo, la IDOS media para $n = 6$ es exactamente igual a $I_{Ag_{2057}}(E)$. Además, si seguimos aumentando el grado del polinomio es de esperarse que no se noten cambios drásticos a simple vista. Por este motivo se procedió a realizar un análisis de la función $\phi_n(E)$ (ver fig. 4). Donde se obtuvo que esta función no presenta grandes cambios en su magnitud para grados de polinomios mayores que 6.

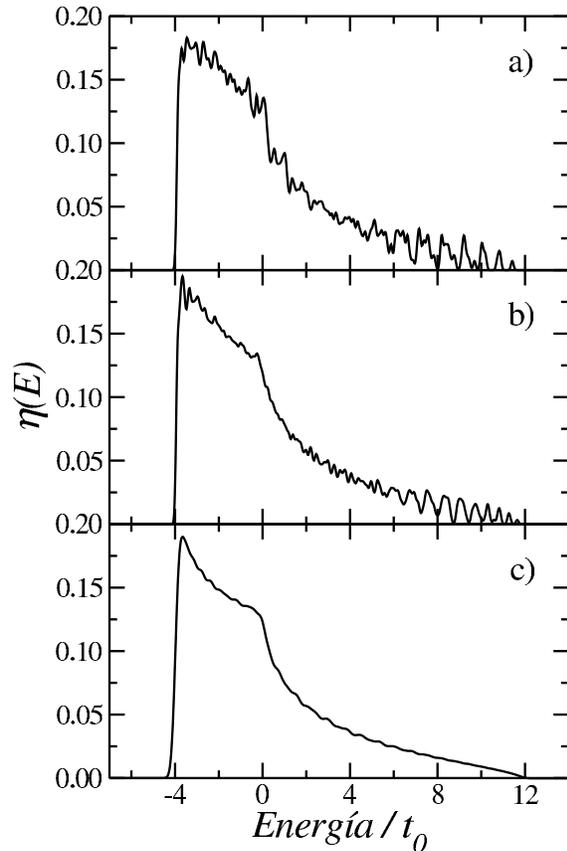


Figura 2: Densidad de estados electrónicos de las nanopartículas a) Ag₉₂₃, b) Ag₂₀₅₇ y c) de una red FCC (datos tomados de la ref. [30]).

Luego del análisis indicado líneas arriba, se procedió a estudiar la influencia del grado del polinomio en la

distribución de separación de niveles electrónicos más cercanos, $P(s)$. Se encontró, que si se considera polinomios de grados pequeños podemos tener conclusiones erróneas sobre las propiedades electrónicas de las nanopartículas, ya que a medida que aumenta n , $P(s)$ cambia drásticamente hasta llegar a ser cercana a una distribución tipo Wigner (ver fig. 5), lo cual es esperado para sistemas en el régimen metálico [10]. Esto es una evidencia clara que el método de re-escalado influye considerablemente en el estudio de las propiedades electrónicas de las nanopartículas de plata. Ello ha sido también comprobado para otros sistemas [20, 21].

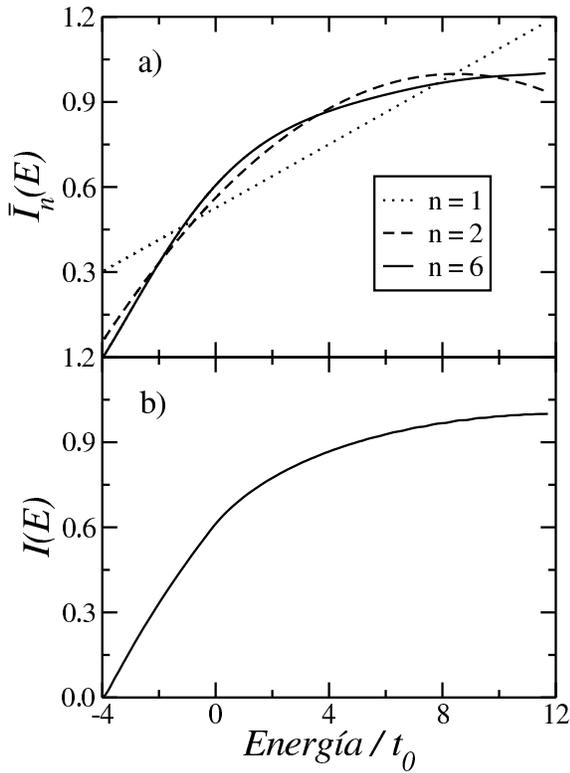


Figura 3: a) IDOS media de la nanopartícula Ag₂₀₅₇ para los grados $n = 1, 2$ y 6 . b) IDOS de la nanopartícula Ag₂₀₅₇. Se observa que $\bar{I}_6(E)$ (arriba) es similar a $I(E)$ (abajo).

Sin embargo, un estudio gráfico de $P(s)$, no nos otorga mucha información. Por este motivo, se procedió a realizar los respectivos ajustes de $P(s)$ con la distribución de Brody, con el fin de poder estudiar la influencia de n sobre el parámetro de Brody de las nanopartículas Ag₉₂₃ y Ag₂₀₅₇. Los resultados son mostrados en la figura 6, donde se puede observar que a medida que n aumenta, el parámetro de Brody cambia de una distribución cercana a una tipo Poisson a una distribución tipo Wigner, esto sucede para ambas nanopartículas.

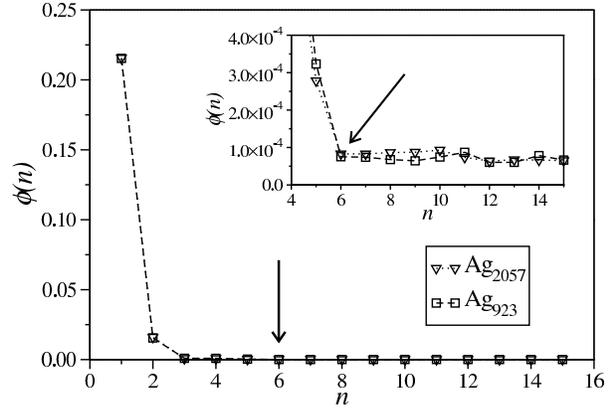


Figura 4: Variación de la función $\phi(n)$ con el grado del polinomio usado para realizar el método de re-escalado en las nanopartículas Ag₉₂₃ y Ag₂₀₅₇.

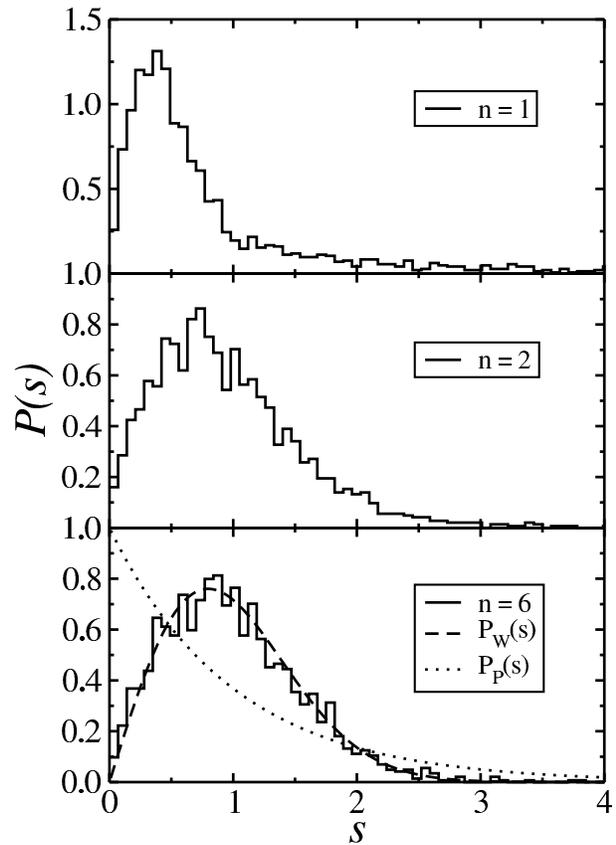


Figura 5: Variación de la distribución de separación de niveles electrónicos más cercanos con el grado del polinomio usado para realizar el método de re-escalado en la nanopartícula Ag₂₀₅₇. Además, como referencia, se muestra la distribución de Wigner (líneas cortadas) y la de Poisson (líneas punteadas).

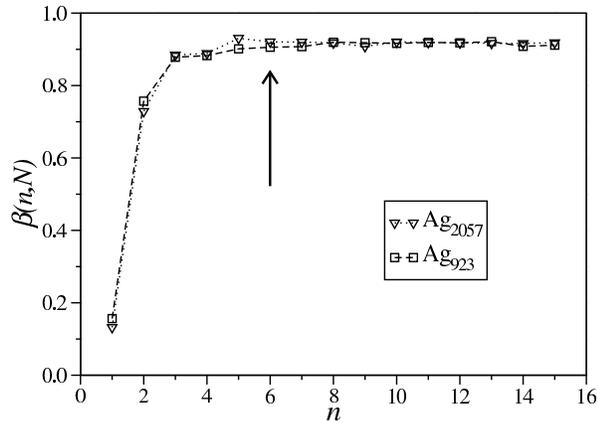


Figura 6: Variación del parámetro de Brody con el grado de polinomio usado en el método de re-escalado para las nanopartículas Ag₉₂₃ y Ag₂₀₅₇.

Además, se puede observar que para $n \geq 6$ el parámetro de Brody no presenta grandes alteraciones en su magnitud. Este resultado está en acuerdo con el obtenido en el análisis de la función $\phi(n)$. Por tal motivo, nosotros escogemos a $n = 6$ como el grado del polinomio adecuado para realizar un método de re-escalado en estas nanopartículas. Este grado es diferente al obtenido por Grossi *et. al.* [8] para una reacción elemental. Es decir, el n adecuado para realizar el método de re-escalado también depende del sistema que se está estudiando. Los valores de β que se obtuvieron para las nanopartículas Ag₉₂₃ y Ag₂₀₅₇ con $n = 6$ fueron 0.91 y 0.92, respectivamente. Estos resultados nos dicen que las nanopartículas de plata tienen una distribución de

separación de niveles electrónicos muy cercana a la distribución de Wigner donde $\beta = 1$ [20], lo cual podría esperarse ya que es bien sabido que la plata es un material metálico.

Conclusiones

De este trabajo se concluye que es muy importante realizar un método de re-escalado adecuado, ya que como se demostró en la sección anterior para $n < 6$ el parámetro de Brody cambia drásticamente y con ello cambian las propiedades electrónicas de las nanopartículas de plata. Por otro lado, se encontró que existe un grado de polinomio donde a partir del cual las propiedades electrónicas del sistema no sufren grandes alteraciones. Este valor depende del sistema estudiado. Para el caso de las nanopartículas de plata se ha obtenido que el valor ideal es $n = 6$. Así, se obtuvo que las nanopartículas de plata estudiadas presentan una $P(s)$ cercana a la distribución de Wigner como es de esperarse para materiales metálicos.

Agradecimientos

L. R. Medrano agradece a J. J. Torres por facilitarnos los datos de la EDOS de Ag-FCC. Los autores están agradecidos al Consejo Superior de Investigación del Vicerrectorado de Investigación de la Universidad Nacional Mayor de San Marcos por el soporte financiero otorgado a través de los proyectos Nro. 091301101 y Nro. 101301017.

Referencias

- [1] W. Eberhardt, Surf. Sci. **500**, 242 (2002).
- [2] Y.A. Krutyakov, A.A. Kudrinskiy, A.Y. Olenin y G.V. Lisichkin, Russ. Chem. Rev. **77**, 233 (2008).
- [3] M. Pereiro, D. Baldomir y J.E. Arias, Phys. Rev. A **75**, 063204 (2007).
- [4] O.A. Yeshchenko, I.M. Dmitruk, A.A. Alexeenko y A.M. Dmytruk, Phys. Rev. B **75**, 085434 (2007).
- [5] F. Balleto y R. Ferrando, Rev. Mod. Phys. **77**, 371 (2005).
- [6] S. Shrivastava, T. Bera, A. Roy, G. Singh, P. Ramachandrarao y D. Dash, Nanotechnol. **18**, 225103 (2007).
- [7] S. Gurunathan, K. Lee, K. Kalishwaralal, S. Sheikpranbabu, R. Vaidyanathan y S.H. Eom, Biomaterials **30**, 6341 (2009).
- [8] G. Grossi, L. Peroncelli y N. Rahman, Chem. Phys. Lett. **313**, 639 (1999).
- [9] D. Mirlin, Phys. Rep. **326**, 259 (2000).
- [10] U. Grimm, R.A. Römer, M. Schreiber, J.X. Zhong, Mater. Sci. Eng. A **294-296**, 564 (2000).
- [11] M.F. Higareda, H.H. Saldaña y R.A. Sánchez, Physica A **372**, 368 (2006).
- [12] L. Yi y P. Sheng, Physica B **296**, 98 (2001).
- [13] M.P. Sørensen y T. Schneider, Z. Phys. B: Cond. Matt. **82**, 115 (1991).
- [14] M. Batsch, I.Kh. Zharekeshev y B. Kramer, Solid State Commun. **95**, 353 (1995).

- [15] I.Kh. Zharekeshev y B. Kramer, Phys. Rev. Lett. **79**, 717 (1997).
- [16] B.I. Shklovskii y B. Shapiro, Phys. Rev. B **47**, 11487 (1993).
- [17] I. Amanatidis, S.N. Evangelou, Phys. Rev. B **79**, 205420 (2009).
- [18] L. Medrano, C. Landauro, J. Rojas, J. Torres, A. Guzmán, S. Reátegui y J. Arroyo, Rev. Per. Quím. Ing. Quím., **12**, 78 (2009). http://sisbib.unmsm.edu.pe/bibvirtual/publicaciones/ing_quimica/v12_n2/Contenido.htm
- [19] L.R. Medrano, *Influencia de desorden sobre la distribución de separación de niveles electrónicos de nanopartículas de plata*, Tesis de Licenciatura, Facultad de Ciencias Físicas, Universidad Nacional Mayor de San Marcos, Lima (2010).
- [20] R.A. Molina, *Caos cuántico en sistemas Hamiltonianos de muchos cuerpos*, Tesis de Doctorado, Facultad de Ciencias Físicas, Universidad Complutense de Madrid, Madrid (2001).
- [21] J.M.G. Gómez, R.A. Molina, A. Relaño y J. Retamosa, Phys. Rev. E **66**, 036209 (2002).
- [22] H. Meyer y J.C. Anglès d' Auriac, Phys. Rev. E **55**, 5380 (1997).
- [23] F. Cleri y V. Rosato, Phys. Rev. B **48**, 22 (1993).
- [24] F. Baletto, C. Mottet y R. Ferrando, Chem. Phys. Lett. **354**, 82 (2002).
- [25] F. Baletto, *Energetics, thermodynamics and growth kinetics of nanoclusters*, PhD Thesis in Physics, Facultad de Ciencias Matemáticas, Físicas y Naturales, Università degli Studi di Genova, Genova (2003).
- [26] F.H. Stillinger y T.A. Weber, Phys. Rev. B, **48**, 978 (1982).
- [27] I. Lobato, J. Rojas, C.V. Landauro y J. Torres, J. Phys.: Condens. Matter **21**, 055301 (2009).
- [28] J.D. Honeycutt y H.C. Andersen, J. Phys. Chem., **91**, 4950 (1987).
- [29] M. Schreiber, U. Grimm, R.A. Römer y J.X. Zhong, Comput. Phys. Commun. **121-122**, 499 (1999).
- [30] J.J. Torres, *Implementación del método de recursión para el estudio de la densidad de estados electrónicos de sistemas complejos*, Tesis de Licenciatura, Facultad de Ciencias Físicas, Universidad Nacional Mayor de San Marcos, Lima (2009).
- [31] D. Reinhard, B.D. Hall, D. Ugarte y R. Monot, Phys. Rev. B **55**, 1459 (1997).
- [32] D. Reinhard, B.D. Hall, P. Berthoud, S. Valkealahti y R. Monot, Phys. Rev. B **58**, 4917 (1998).