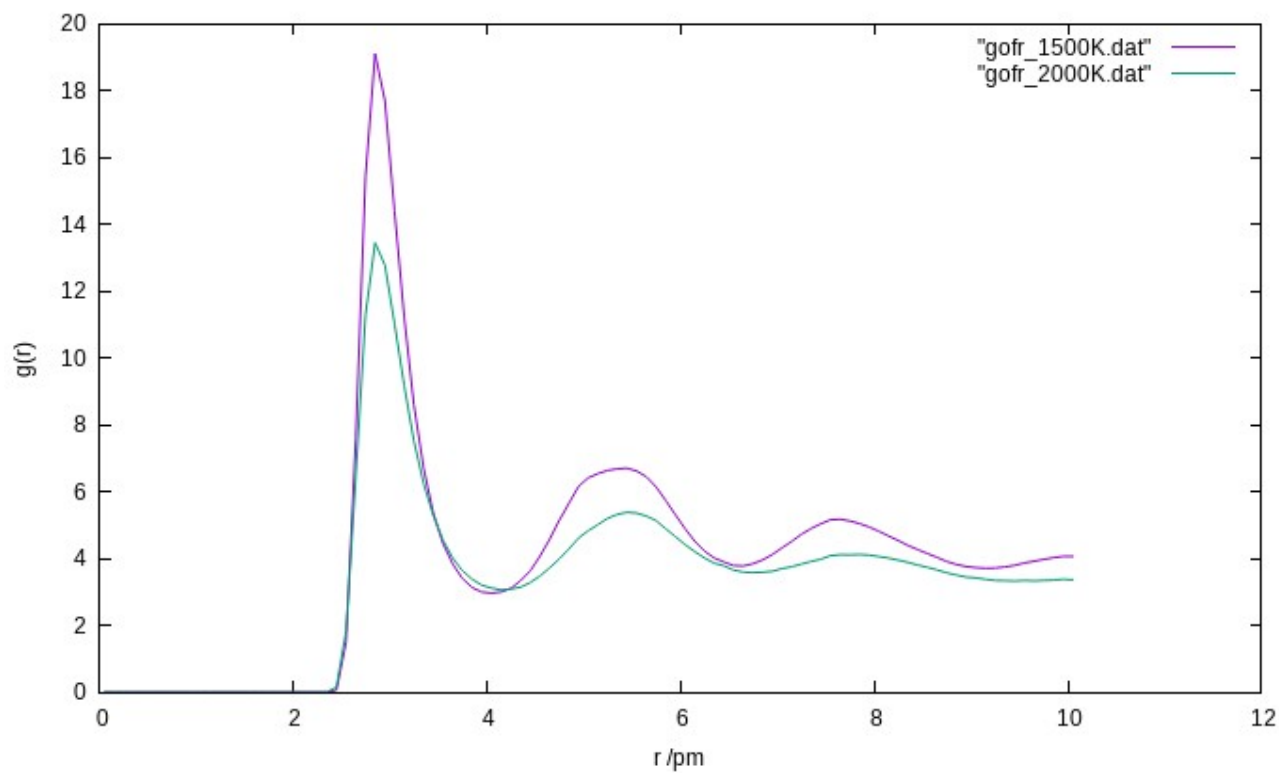
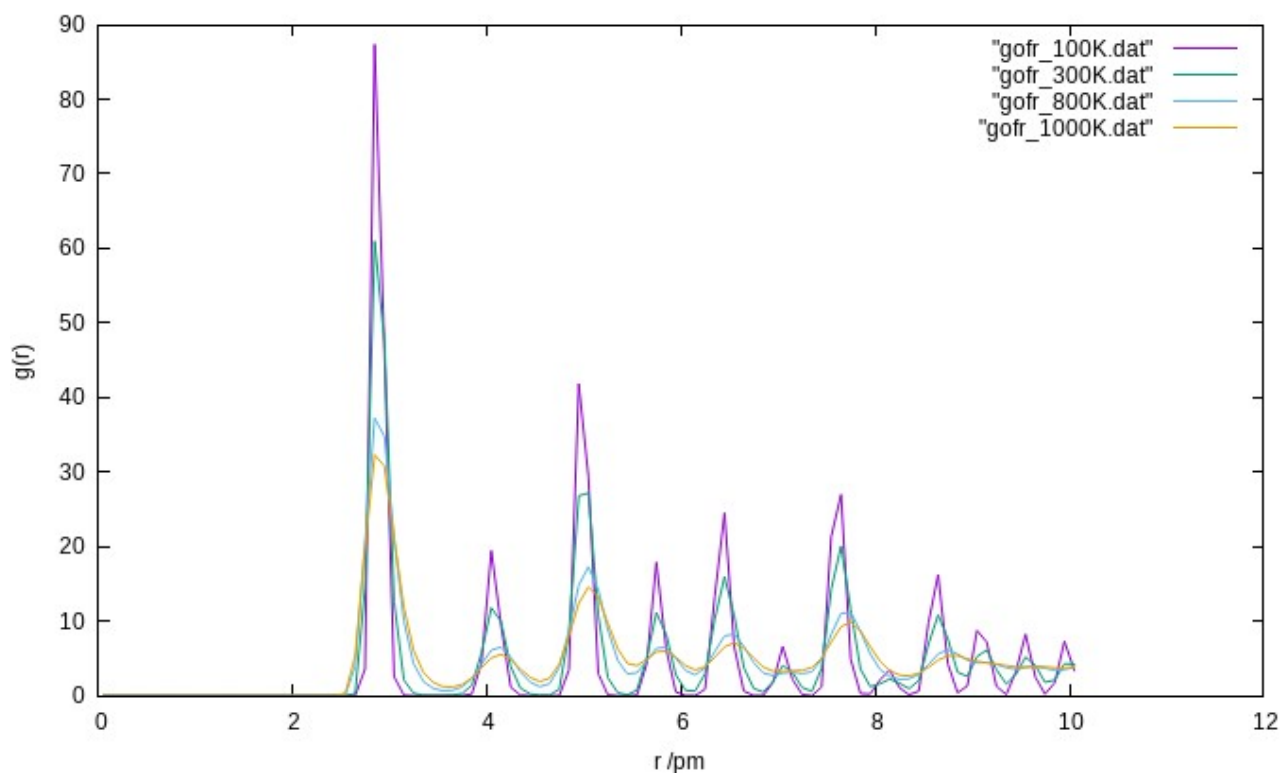


En aquesta entrega he canviat les temperatures de la simulació per veure en un rang més gran de temperatures com es comporten les nanopartícules d'Au.

Tal i com podem observar en el gràfic al anar augmentant la temperatura el pic de la densitat de distribució radial disminueix d'altura però es fa més gran. Això significa que al anar augmentant la temperatura els àtoms tenen més vibració i per tant es va perdent la cristal·linitat de les nanopartícules.

A més, podem observar com es pot arribar a visualitzar els tres estats de la matèria. Fins a 1000°K podem observar com hi ha els pics ben definits i per tant implica que encara es manté l'estructura cristal·lina ja que a cada pic correspon un àtom. Les línies del gràfic de 1500°K i 2000°K correspondrien a l'estat líquid ja que ara ja no apareixen els pics tant remarcats tot i que segueix apareixent uns pics que significa que hi ha un cert ordre, unes distàncies lleugerament preferents. Finalment, a 3000°K podem observar com ja no hi ha cap pic i per tant correspondria a l'estat gasos ja que totes les distàncies són igualment probables, no hi ha cap ordre.

Tot i que els tres estats tenen les seves característiques, podem observar que hi ha una zona de gap entre 0 i 2,5 pm aproximadament, això correspondria al radi de Van der Waals on cap àtom es pot situar més a prop d'aquesta distància.



T

