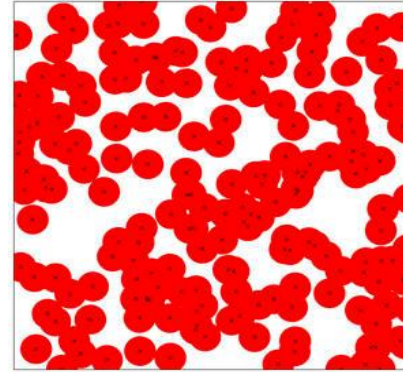
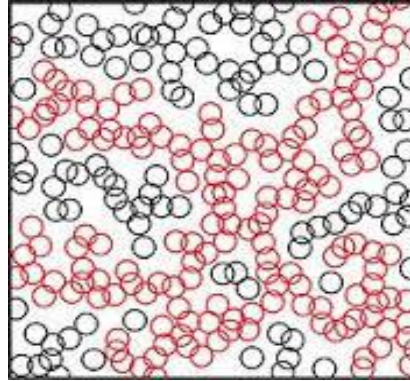


LIMITE DE PERCOLAÇÃO (PERCOLATION THRESHOLD)

Simulação Computacional



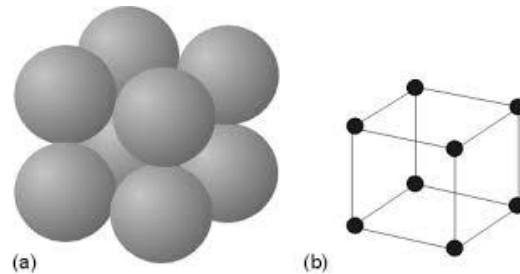
O limite de percolação ou conectividade depende da dimensionalidade da estrutura, de sua forma bem como da simetria das partículas. Em uma dada rede, uma fração de sítios deverá ser preenchida para criar um agregado de percolação e esta fração é definida como limite de percolação ou **valor crítico de probabilidade de percolação p_c** .

Arranjo 2D quadrado **$p_c = 0,59$**

Arranjo cúbico simples 3D o valor de **$p_c = 0,31$**

Assim para um empacotamento de esferas rígidas em **sistema cúbico simples** onde a densidade ou fator de empacotamento é 0,52 (devido ao volume não preenchido pelas esferas no empacotamento cúbico) vai resultar em uma **fração em volume das esferas de 0,16 (obtido por $0,52 \times 0,31 = 0,16$)**.

Desta forma no empacotamento de esferas numa rede cúbica simples atinge-se o **limite de percolação** (formação de um agregado conectado em tese infinito) quando a fração em volume das partículas aproxima-se de **16 % do volume total do sistema**.



Um gás de van der Waals é um modelo fenomenológico e clássico usado para descrever gases reais que diferem de um gás ideal (gás de pontos sem interações) pela inclusão efeitos das interações atrativas e repulsivas entre as partículas.

Na **coordenada crítica**, o volume crítico molar $V_c = 3b$ onde b é o parâmetro de co-volume ou volume excluído do gás devido às repulsões. Assim a **fração volumétrica no ponto crítico é dada por $x_v = b/3b = 1/3 = 0,33$** . Note que um **gás real no ponto crítico apresenta a opalescência crítica** uma vez que a densidade flutua criando agregados de partículas (início do aparecimento da fase líquida por nucleação) que espalham fortemente a luz incidente. Considerando que o volume molar das partículas isoladas do gás é menor do que b , então a fração volumétrica crítica deve ser menor do que 0,33 para um gás de van der Waals.