



Uso do Gnuplot como ferramenta facilitadora do ensino: Aplicações em Físico-Química

Gabriela Acco, Fabiana da Silva Kauark e Arlan da Silva Gonçalves

O presente estudo se fundamenta no uso do programa Gnuplot como ferramenta facilitadora de problemas de Físico-Química, promovendo assim a assimilação do conteúdo por meio de interpretações gráficas 2D e 3D. Foram mostradas aos estudantes algumas características do programa, e confeccionados *scripts* para plotagem de gráficos 2D e 3D, estimulando o raciocínio abstrato. Como recursos metodológicos, foram utilizados o manual do Gnuplot, problemas de Físico-Química, um questionário para mensurar o grau de aprendizagem do público composto por estudantes dos cursos técnico, licenciatura e bacharelado em Química de uma das unidades do Instituto Federal de Educação, Ciência e Tecnologia da região sudeste do Brasil. Os resultados obtidos da análise dos questionários sugerem que o uso do Gnuplot facilita a compreensão da Físico-Química.

► Físico-Química, gráficos, Gnuplot ◀

Recebido em 04/07/2019, aceito em 11/06/2020

312

A tecnologia está ganhando cada vez mais espaço dentro da sala de aula, assim como a implantação de diversas formas de ensino na área de química por meio de multimídia como, por exemplo, jogos digitais, programas que desenham moléculas, jogos (Kishmoto, 1994), aplicativos de perguntas e respostas, e programas computacionais como o Gnuplot, usado para desenhar gráficos.

O Gnuplot é um programa gráfico que funciona via linhas de comando, distribuído gratuitamente e originalmente criado para permitir que professores, cientistas e estudantes visualizassem funções matemáticas e dados de forma interativa.

Nesse sentido, o professor pode substituir uma parte das experiências de laboratório – que continuam formativas por outras razões – por operações virtuais que tomam menos

tempo e, portanto, *densificam* as aprendizagens, porque torna-se possível a multiplicação das tentativas e dos erros, permitindo a imediata compreensão dos resultados e a modificação de estratégias de acordo com a necessidade apresentada durante o processo de aprendizagem, potencializando assim, diversas capacidades cognitivas do estudante.

O Gnuplot é um programa gráfico que funciona via linhas de comando, distribuído gratuitamente e originalmente criado para permitir que professores, cientistas e estudantes visualizassem funções matemáticas e dados de forma interativa.

Uma prévia do Programa Gnuplot

A proposta deste estudo foi utilizar o Gnuplot, programa de domínio público, com versões para os sistemas operacionais Linux, Windows, Unix, entre outros (Galo, 2017), destinado à confecção e visualização de gráficos e superfícies, como ferramenta para o estudo, além da melhor compreensão da Físico-Química e suas equações através de *scripts* que são linhas de comando capazes de *plotar* gráficos 2D e 3D, interativos e melhor interpretados pelo público-alvo, tendo em vista que o conteúdo dessa disciplina não é simples, podendo gerar dificuldades aos estudantes, principalmente ao se tratar do formalismo matemático expresso pelo cálculo diferencial e integral.

A seção "Educação em Química e Multimídia" tem o objetivo de aproximar o leitor das aplicações das tecnologias comunicacionais no contexto do ensino-aprendizagem de Química.

A Físico-Química é o estudo dos princípios físicos subjacentes que governam as propriedades e o comportamento dos sistemas químicos. Um sistema químico pode ser estudado a partir de um ponto de vista microscópico ou macroscópico. O ponto de vista microscópico é baseado no conceito de moléculas. O ponto de vista macroscópico estuda propriedades de grande escala da matéria sem o uso explícito do conceito de molécula (Levine, 2009).

Equação de um Gás Ideal

As leis da Termodinâmica são gerais e não se referem à natureza específica das substâncias, portanto, para estudar o gás ideal é necessário recapitular as seguintes leis: Lei de Boyle, Lei de Gay-Lussac e Lei de Charles.

Boyle estudou a relação entre a pressão e o volume dos gases, concluindo que para uma quantidade fixa de gás a uma temperatura fixa, a pressão e o volume são inversamente proporcionais. A lei de Boyle pode ser compreendida para um gás que consiste em um grande número de moléculas que se movem essencialmente independentemente umas das outras. A pressão exercida pelo gás é devida aos impactos das moléculas nas paredes do recipiente. Uma diminuição no volume faz com que as moléculas atinjam as paredes com mais frequência, aumentando assim a pressão (Levine, 2009).

Gay-Lussac determinou medidas do volume mantendo uma massa fixa e sob pressão fixa, mostrando que o volume tinha variação linear com a temperatura (Castellan, 1986).

A Lei de Charles diz que, para uma massa fixa de gás sob pressão constante, o aumento relativo do volume por grau de aumento de temperatura era o mesmo para *todos os gases* nos quais ele fez as medidas (Levine, 2009). Desse modo, a explicação molecular para esta lei reside no fato de que um aumento de temperatura significa que as moléculas estão se movendo mais rápido e chocando-se com as paredes do recipiente com mais força e maior frequência se o volume for mantido constante. Portanto, o volume deve aumentar, com o aumento da temperatura, para manter a pressão constante.

A Lei dos gases ideais ou perfeitos teve grande importância para o estudo dos gases, porém, ao se observar a lei de Boyle, quando se tende a pressão para o infinito, o volume vai a zero; conseqüentemente, o gás “desapareceria”, violando a lei da conservação da massa de Lavoisier.

O princípio de Avogadro diz que volumes iguais de gases diferentes, nas mesmas condições de temperatura e pressão, possuem o mesmo número de moléculas, ou seja, possuem a mesma quantidade de substância. (Castellan, 1986).

Juntando-se essas leis, chega-se à equação dos gases ideais,

$$pV = nRT \quad (1)$$

onde:

R = constante dos gases = $8,314462618 \text{ J mol}^{-1} \text{ K}^{-1}$
 $\cong 0,0820575 \text{ atm L mol}^{-1} \text{ K}^{-1}$

p = pressão

V = volume

n = quantidade de substância (em mol)

T = temperatura absoluta (em Kelvin)

Equação de van der Waals

Uma equação foi desenvolvida pelo cientista holandês Johannes van der Waals para descrever o comportamento de gases reais contemplando a não concordância entre a teoria dos gases ideais e suas equações e a realidade de projetos e processos.

Na termodinâmica, quando se tem três variáveis especificadas em uma equação de estado em um sistema homogêneo, pode-se calcular a quarta variável. Se as variáveis n , p e T são determinadas, então o valor de V é determinado, pois V é uma função de n , p e T .

O gás ideal é um modelo idealizado no qual o gás se move ao acaso, sendo que suas moléculas se chocam elasticamente, não apresentam volume próprio e não exercem interações intermoleculares. No entanto, as moléculas na realidade se atraem e, quando colidem, acabam se repelindo, ocasionando assim as forças intermoleculares. Nenhum gás obedece

estritamente a equação do gás ideal em toda temperatura e pressão. Então, a aproximação feita por van der Waals insere constantes para corrigir, respectivamente, o volume e a pressão, resultando em sua famosa equação (Levine, 2009). Van der Waals foi laureado com o Prêmio Nobel de Física no ano de 1910.

$$p = \frac{RT}{\bar{V} - b} - \frac{a}{\bar{V}^2} \quad (2.1)$$

onde:

a = termo atrativo/repulsivo do gás, para correção da pressão ($\text{m}^6 \text{ Pa mol}^{-2}$).

b = termo de correção do volume, conhecido como co-volume ($\text{m}^3 \text{ mol}^{-1}$)

\bar{V} = Volume molar ($\text{m}^3 \text{ mol}^{-1}$)

Ao analisar, algebricamente, a equação de van der Waals, nota-se que, ao multiplicá-la por $(\bar{V} - b)V^2$, rearranjando e igualando a zero, chega-se a uma equação cúbica completa, cuja resolução é complexa. Os pontos críticos de um gás podem ser definidos através da derivada primeira e da derivada segunda igualando-as a zero, tornando possível a obtenção algébrica das constantes a e b da equação de van der Waals, assim como a constante, Z_c que é o fator de

As leis da Termodinâmica são gerais e não se referem à natureza específica das substâncias, portanto, para estudar o gás ideal é necessário recapitular as seguintes leis: Lei de Boyle, Lei de Gay-Lussac e Lei de Charles.

compressibilidade (razão entre o volume real e ideal de um gás) crítico (Ball, 2005).

Dividindo a derivada segunda pela derivada primeira e fazendo as devidas substituições, obtêm-se os parâmetros a e b de van der Waals.

Fator de compressibilidade

Por definição, o fator de compressibilidade (Z) é dado pela razão entre o volume de um gás real e o volume de um gás ideal. Esse fator se constitui em medida do desvio da idealidade do comportamento de um gás real.

Para os gases ideais, $Z=1$ para toda temperatura e pressão, sendo diferente para os gases reais. A dedução de Z para um gás de van der Waals pode ser feita da seguinte forma:

Substituindo a variável p na equação de definição do fator de compressibilidade, dada por $Z = \frac{p\bar{V}}{RT}$ pela pressão dada pela equação de van der Waals, ou seja, $p=f(T,V)$, chega-se ao fator de compressibilidade como uma função do tipo $Z=f(V,T)$, expresso na equação (3.1).

$$Z = \frac{\bar{V}}{\bar{V} - b} - \frac{a}{\bar{V}RT} \quad (3.1)$$

Equação de Clausius-Clapeyron

Os gráficos da variação da pressão de vapor com a temperatura têm formato distinto: cada curva ascende nitidamente para uma pressão de vapor mais alta com o aumento da temperatura. A relação entre pressão de vapor e temperatura é dada por uma equação chamada equação de Clausius-Clapeyron. Para se chegar a equação logarítmica de Clausius-Clapeyron, é necessário considerar a condição termodinâmica de equilíbrio entre duas fases, como, por exemplo, o equilíbrio líquido vapor. Nessa condição, as variações da energia de Gibbs em cada uma das fases alfa e beta são iguais entre si. Desse modo, pode-se escrever:

$$\partial \bar{G}_\alpha = \partial \bar{G}_\beta \quad (4.1)$$

Considerando $p_1 = p_{\text{atm}} = 1$ atm, após a integração, obtém-se a forma de uma reta (quando $\ln(p_2/p_{\text{atm}})$ é colocado em função de $(1/T)$, como se vê na equação (4.2).

$$\ln \frac{p_2}{p_{\text{atm}}} = -\frac{\Delta_{\text{vap}}H}{R} \cdot \frac{1}{T} + C \quad (4.2)$$

onde:

T = temperatura absoluta (em Kelvin)

R = constante dos gases (8,314462618 J mol⁻¹ K⁻¹)

$\Delta_{\text{vap}}H$ = entalpia de vaporização

p = pressão atmosférica em um intervalo fechado

C = coeficiente linear, definido como $C = \frac{\Delta_{\text{vap}}H}{RT_{\text{eb}}}$

A equação de Clausius-Clapeyron determina que um gráfico de $\ln p \times 1/T$ deverá resultar em uma reta com inclinação igual a $-\Delta_{\text{vap}}H/R$. Portanto, pode-se usá-lo para determinar, facilmente, a entalpia de vaporização de uma substância, além da temperatura de ebulição (Brown *et al.*, 2005).

Os gráficos da variação da pressão de vapor com a temperatura têm formato distinto: cada curva ascende nitidamente para uma pressão de vapor mais alta com o aumento da temperatura.

Metodologia

O percurso metodológico percorrido na execução deste estudo incluiu o uso do sistema operacional Linux Ubuntu e do programa Gnuplot – que é gratuito, de código aberto, baseado na licença GPL (do inglês: *General Public Licence*) e construído na linguagem de programação Fortran. Assim sendo, o intuito deste estudo foi a criação e utilização dos *scripts* comentados para a construção dos gráficos 2D e 3D, além de melhor compreensão e visualização.

A validação deste estudo foi feita em turmas de um curso técnico e de cursos superiores de um dos Institutos Federais de Educação, Ciência e Tecnologia da região sudeste, com 657 alunos matriculados, na data de 15 de junho de 2018. O total de alunos que participaram das aulas foi de 96 alunos, somando o curso técnico e os cursos superiores, totalizando 14,61% do total de alunos matriculados nessa unidade.

Foram expostos para os discentes: uma aula teórica prévia sobre alguns conceitos de Físico-Química, o programa Gnuplot, os *scripts* que geram gráficos, e um questionário que foi preenchido no final da aula.

Resultados e Discussões

1. Linhas de comando comentadas e plotagem dos gráficos

1.1. O script gerador do gráfico 3D para o gás ideal 3D, com a legenda em função da temperatura.

Tendo uma melhor compreensão espacial foi gerado o gráfico mostrado na Figura 1, em que se tem uma visão tridimensional das isotermas do gás ideal com a faixa de tonalidades da legenda variando conforme a temperatura, utilizando as faixas de pressão, temperatura e volumes, nas respectivas faixas de valores 0-400 atm, 280-400 K, 0-0,5 L mol⁻¹, a partir do *script*:

```
set title "Gas Ideal" font ",20" #Título do gráfico
set xlabel 'V (L/mol)' #Título do eixo x (volume molar)
set ylabel 'p (atm)' #Título do eixo y (pressão)
set zlabel 'T (K)' #Título do eixo z (Temperatura)
set table 'GI.txt' #Abrir tabela de dados
R=0.082 #Constante dos gases (atm)
```

```

set xrange [0:0.5]           #Faixa de valores do eixo
                             x (volume molar)
set yrange [280:400]       #Faixa de valores do eixo
                             y (temperatura)
set zrange [0:400]         #Faixa de valores do eixo
                             z (pressão)
set pm3d                   #Gráfico de superfície
set format z "%4.2f"       #Formato contendo 4
                             inteiros e 2 decimais
f(x,y)=(R*y)/x             #Equação do Gás Ideal
set palette defined (0 "blue", #Definir intervalo de
                             cores
                             200 "white", 400 "red")
                             do gráfico de superfície
plot for [y=280:400:20] f(x,y) #Intervalo de
                             temperatura de 280
                             a 400 K, de 20 em 20
                             Kelvin
unsettable                 #Fechar a tabela de
                             dados
set yrange [0:400]         #Redefinir a faixa de
                             valores do eixo y para a
                             pressão
set zrange [280:400]       #Redefinir a faixa de
                             valores do eixo z para a
                             temperatura
plot 'Gl.txt' using 1:3:2   #Plotar o gráfico usando
                             a tabela de dados
                             invertendo o eixo y com o
                             eixo z
set pm3d implicitat b      #Faixa de cores na base
                             do gráfico
set pm3d implicitatsb     #Faixa de cores na base
                             e na superfície do gráfico
plot 'Gl.txt' using 1:3:2 withlines #Gráfico de
                             superfície usando uma
                             tabela, com inversão
yz (Viana, 2011).

```

1.2. O script gerador da Isoterma de van der Waals 3D, com a legenda em função da temperatura.

Para plotagem da equação de van der Waals, a pressão foi tratada como uma função do volume molar e utilizadas as constantes a e b de van der Waals, referentes ao dióxido de carbono (CO_2). As faixas de valores da pressão, temperatura, e volume molar foram de, respectivamente, 0-400 atm, 260-400 K, 0-0,5 L/mol. Como se pode observar, os pontos críticos de um gás podem ser definidos igualando a zero a derivada primeira e a derivada segunda, o que torna possível a obtenção algébrica dos pontos críticos de pressão, temperatura e volume ($p_c = 72,85\text{atm}$, $T_c = 304,19\text{K}$, $V_c = 0,094\text{L/mol}$). Isso mostra que, em condições acima das condições críticas, o gás de van der Waals tem comportamento que se aproxima de um gás ideal (Atkins, 2008).

Para se ter outra visão do gráfico 3D de van der Waals, as coordenadas y e z foram invertidas para que a temperatura ficasse representada na coordenada z e a pressão na coordenada

y e, assim, o Gnuplot mostrasse a variação de cores da legenda como uma função da temperatura e não da pressão. Como resultado, foi gerado o gráfico mostrado na Figura 2.

```

set title "Isoterma de          #Título do gráfico
van der Waals" font ",20"
set xlabel 'V (L/mol)'        #Título do eixo x
set ylabel 'p (atm)'         #Título do eixo y
set zlabel 'T (K)'           #Título do eixo z
set table 'vdw-points.txt'    #Abrir tabela de pontos
set xrange[0:0.5]            #Faixa de valores do
                             volume molar (eixo x)
set yrange [260:400]         #Faixa de valores da
                             temperatura (eixo y)
set zrange [0:400]           #Faixa de valores da
                             pressão (eixo z)
set pm3d                     #Gráfico de superfície
set format z "%4.2f"         #Formato contendo 4
                             inteiros e 2 decimais
R=0.082                      #Constante dos gases (atm)
a=3.640                      #Constante a de van der
                             Waals para o CO2
b=0.04267                   #Constante b de van der
                             Waals para o CO2
f(x,y)=((R*y)/(x-b))-(a/(x**2)) #Isoterma de van der Waals
set palette defined (0 "blue", #Definir faixas de cores
                             200 "white", 400 "red")
                             no gráfico de superfície
plot for [y=260:400:20] f(x,y) #Plotar o gráfico
unsettable                   #Fechar tabela de pontos
set yrange [0:400]           #Nova faixa de valores
                             do eixo y (pressão)
set zrange [260:400]         #Nova faixa de valores
                             do eixo z (temperatura)
plot 'vdw-points.txt' using 1:3:2 #Plotando o gráfico de
                             superfície com inversão
                             yz
set pm3d implicitatsb       #Plotar gráfico na
                             superfície e na base do
                             gráfico
plot 'vdw-points.txt' using 1:3:2 withlines #Plotando o gráfico de
                             superfície com inversão
                             em yz
unset terminal                #Finalizar o script

```

1.3. O script gerador do Fator de Compressibilidade em função da pressão.

O fator de compressibilidade é a razão entre o volume de um gás real e o volume de um gás ideal, havendo três possibilidades. Se a razão é menor que 1, isso quer dizer que o gás real é mais compressível que o gás ideal, pois as forças intermoleculares atrativas são dominantes. Se a razão é igual a 1, o gás real tem comportamento de um gás ideal. Se a razão é maior que 1, o gás real é menos compressível que o gás ideal, pois as forças intermoleculares repulsivas são dominantes.

Para plotagem do Fator de Compressibilidade para o gás de van der Waals, foram utilizadas as constantes a e b do CO_2 , e a faixa de pressão foi de 0 a 600 atm. Assim:

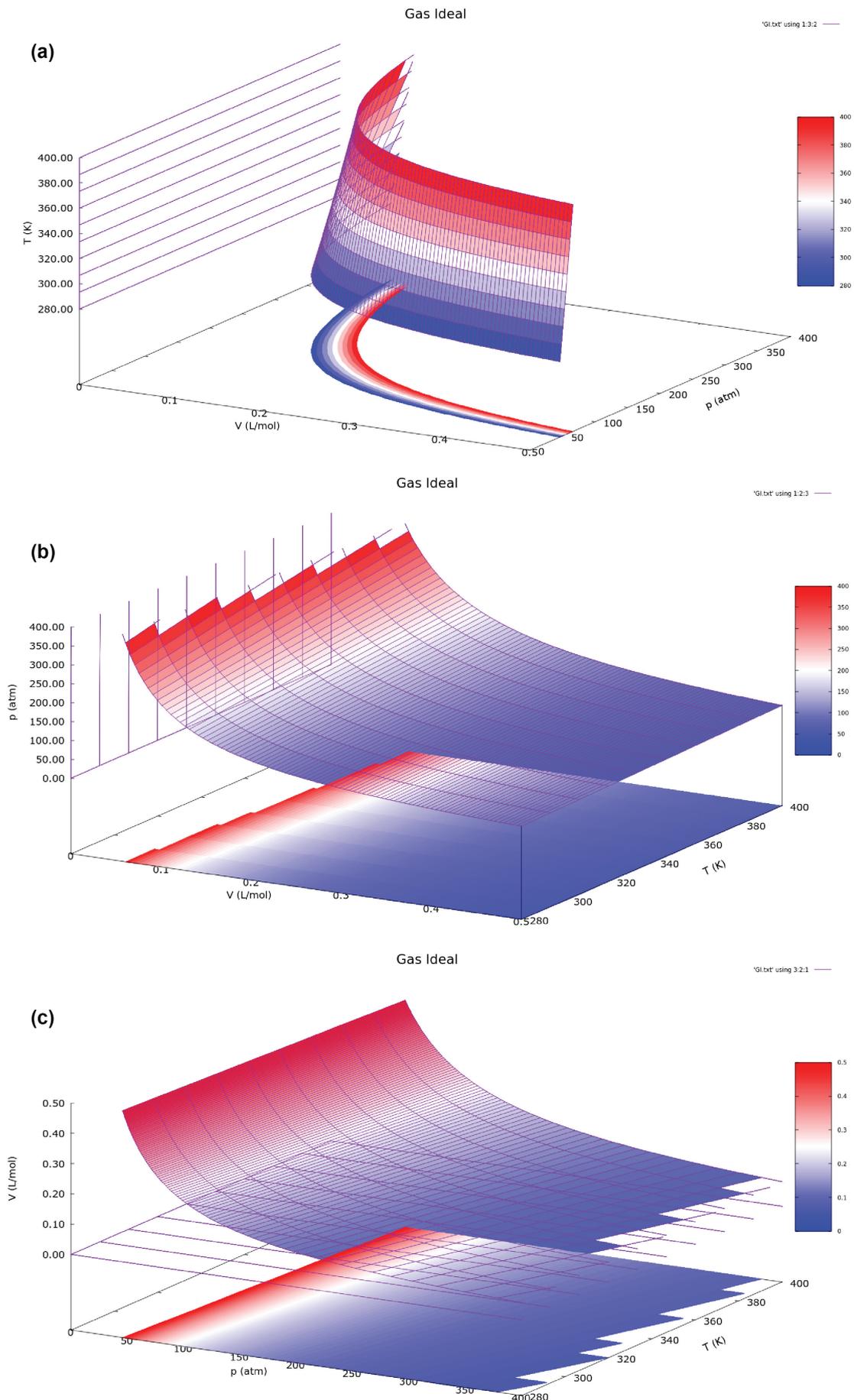


Figura 1: Gráfico do Gás Ideal 3D para $n = 1$ mol, legenda em função (a) Temperatura, (b) Pressão e (c) Volume. Fonte: os autores.

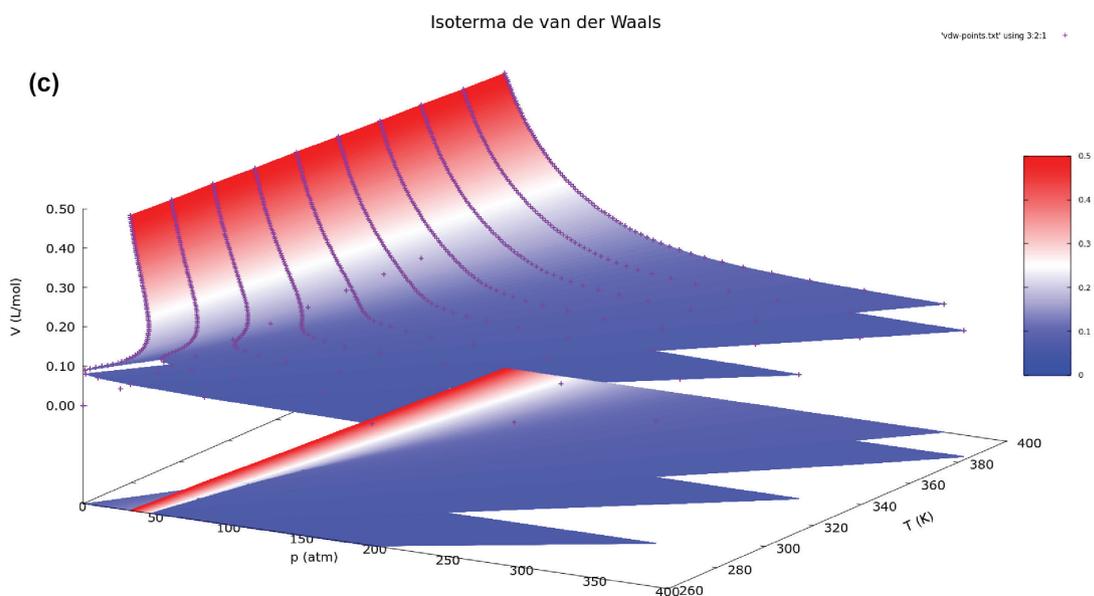
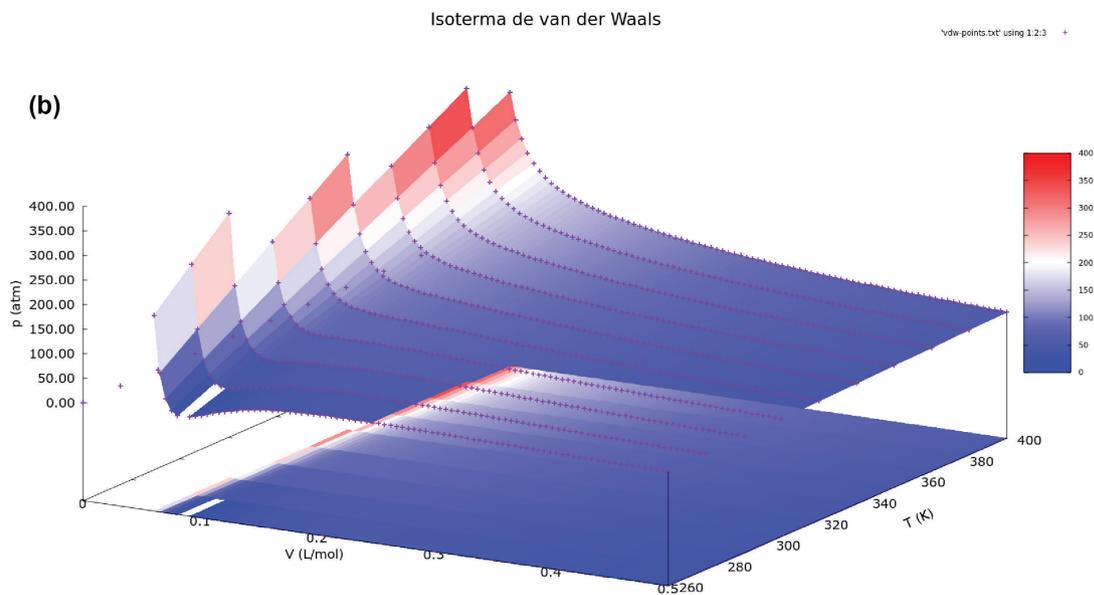
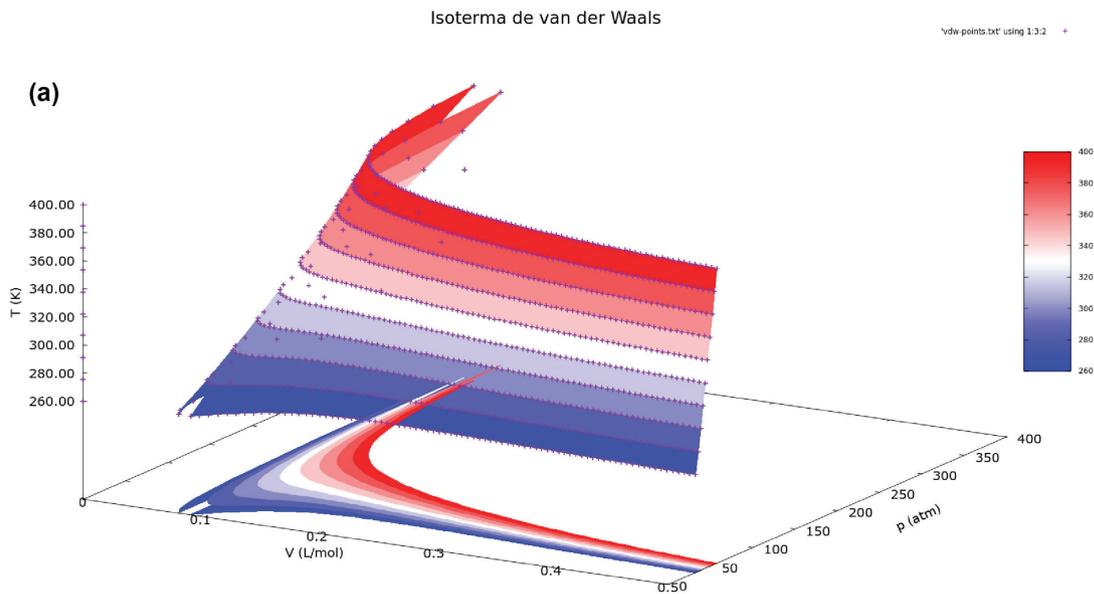


Figura 2: Gráfico da Isoterma de van der Waals 3D, legenda em função (a) Temperatura, (b) Pressão e (c) Volume. Fonte: os autores.

```
reset
set parametric
a=3.640
```

```
b=0.04267
```

```
T=310
R=0.082
set title "Fator de
Compressibilidade x Pressao"
set samples 1000
```

```
T=310
f(t)=((R*T)/(t-b))-(a/(t**2))
g(t)=(f(t)*t)/(R*T)
set xlabel 'P/atm'
set ylabel 'Z'
set xrange[0:600]
```

```
set yrange[0.2:1.6]
plot [0.05:0.45] f(t),g(t)
```

```
#Função paramétrica
#Constante a de van der
Waals para o dióxido de
carbono
#Constante b de van der
Waals para o dióxido de
carbono
#Temperatura em Kelvin
#Constante dos gases (atm)
#Título do gráfico
#Tamanho amostral
(quanto maior o número
de pontos, melhor sua
resolução)
```

```
#Equação f(t)
#Equação g(t)
#Título do eixo x
#Título do eixo y
#Faixa de valores da
pressão
#Faixa de valores do Z
#Plotar gráfico da função
f(t) e g(t)
```

1.4. O script para a plotagem do gráfico referente à Equação de Clausius-Clapeyron.

Na Tabela 1 estão os valores de pressão de vapor do tetracloreto de carbono e suas respectivas temperaturas de

Tabela 1: Dados do tetracloreto de carbono, CCL₄ (Miranda-Pinto & Souza, 2006)

$p_1 /$ mmHg	$p_2 /$ mmHg	$p_{\text{médio}} /$ mmHg	$T /$ K	$\ln(p/p_0)$	$1/T /$ K ⁻¹
696,0	693,0	694,5	347,15	-0,09013	0,002881
636,0	639,0	637,5	338,65	-0,17576	0,002953
608,5	605,0	606,7	336,15	-0,22520	0,002975
574,0	578,0	576,0	333,65	-0,27721	0,002997
556,0	554,0	555,0	329,75	-0,31435	0,003033
525,0	520,0	522,5	325,15	-0,37469	0,003076

ebulição. A partir da inclinação da reta mostrada na Figura 4, pode-se estimar a entalpia molar de vaporização.

```
//Após abrir o terminal Linux e antes de abrir o Gnuplot
escreva:
edit Clausius-Clapeyron.txt &
//Irá abrir um arquivo novo de texto em que irá criar uma
tabela com o eixo x (1/T (K) e o eixo y (ln p/p (760mmHg))
e salvar; pode fechar a página e voltar para o terminal e
digitar o seguinte comando para abrir o Gnuplot:
set title "Equacao de Clausius-Clapeyron"
set xlabel '1/T (K-1)'
set ylabel 'ln (p/p_0)'
f(x)=a+(b*x)
fit f(x) 'Clausius-Clapeyron.txt' via a,b # C o m a n d o
utilizado para ajustar os pontos na função.
plot f(x) 'Clausius-Clapeyron.txt' linestyle 1 with circles
```

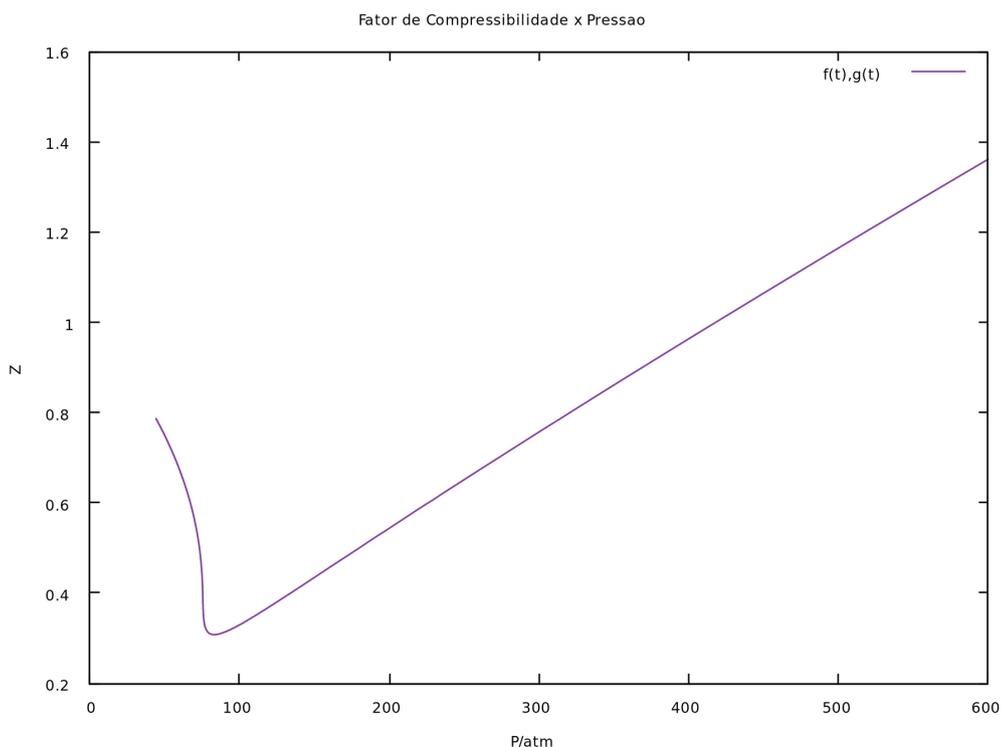


Figura 3: Gráfico do Fator de Compressibilidade. Fonte: os autores.

Após a execução do comando [fit f(x) 'Clausius-Clapeyron.txt' via a,b], obtém-se como resultado um bom ajuste, como mostrado a seguir:

```
Final set of parameters Asymptotic Standard Error
=====
a          = 4.24252      +/- 0.2554   (6.019%)
b          = -1502.23    +/- 85.51    (5.692%)
correlation matrix of the fit parameters:
      a      b
a      1.000
b     -1.000  1.000
```

Assim, de acordo com a equação 4.2 e usando os resultados do ajuste da reta de Clausius-Clapeyron, tem-se:

$$\Delta_{\text{vap}} H = -b.R = -(-1502,23 \text{ K}) * 8,314462616 \text{ J K}^{-1} \text{ mol}^{-1} = 12490,23518 \text{ J mol}^{-1} \approx 12,49 \text{ kJ mol}^{-1}$$

$$e \quad -\frac{\Delta_{\text{vap}} H}{R.T_{\text{eb}}} = \frac{b}{T_{\text{eb}}} = a = \text{intercepto da reta}$$

logo

$$T_{\text{eb}} = -b/a = -(-1502,23 \text{ K}) / 4,24252 = 354,09 \text{ K ou } 80,94 \text{ }^\circ\text{C}.$$

Observa-se, a partir da análise dos resultados que, enquanto o valor da temperatura de ebulição acima calculada está bem próximo do valor de referência do NIST¹, de $(349,8 \pm 0,3) \text{ K}$, o valor da entalpia de $12,50 \text{ kJ/mol}$ está muito abaixo do valor $(32 \pm 2 \text{ kJ/mol})$ de referência. Isso porque os dados originais em Miranda-Pinto e Souza (2006) podem ter sido obtidos em um sistema de medição com vazamento, provavelmente na torneira de três vias. Dessa forma, como as medições são feitas em pressões cada vez mais abaixo da pressão ambiente, o vazamento permite a entrada de ar, aumentando a pressão interna mais

efetivamente quanto mais se tenta reduzir a pressão através da bomba de vácuo. Isso faz com que as pressões medidas sejam mais elevadas, reduzindo a inclinação da reta do gráfico de Clausius-Clapeyron em relação à inclinação que ele deveria ter.

Figura 4

2. Análise estatística dos scripts e conteúdos ministrados

Questão 1 (Q1): Indicaria o sistema operacional LINUX para um colega? Por que?

76% dos estudantes afirmaram que indicariam o sistema operacional por ser uma plataforma livre, à qual qualquer pessoa pode ter acesso.

Questão 2 (Q2): As instruções fornecidas foram de fácil manuseio?

84% dos estudantes afirmaram que as instruções fornecidas foram claras e precisas, porque não apresentaram dificuldade quando estava sendo explicado os dados dos comandos.

Questão 3 (Q3): Aprendeu o conteúdo ministrado na aula?

Foi obtido um aproveitamento de 81%, lembrando que esta abordagem foi apresentada após a aula teórica. Nessa exposição, os discentes conseguiram plotar e visualizar os gráficos 2D e 3D, de forma bem tranquila e facilitada.

Questão 4 (Q4): A didática da aula é autoexplicativa?

62% dos estudantes afirmaram que sim, pois a aula foi ministrada de forma expositiva, dialogada e interativa no laboratório de informática, no qual cada estudante com o seu computador teve acesso ao programa Gnuplot. Com a mediação do professor, o comando era passado e os estudantes iam executando. Por exemplo:

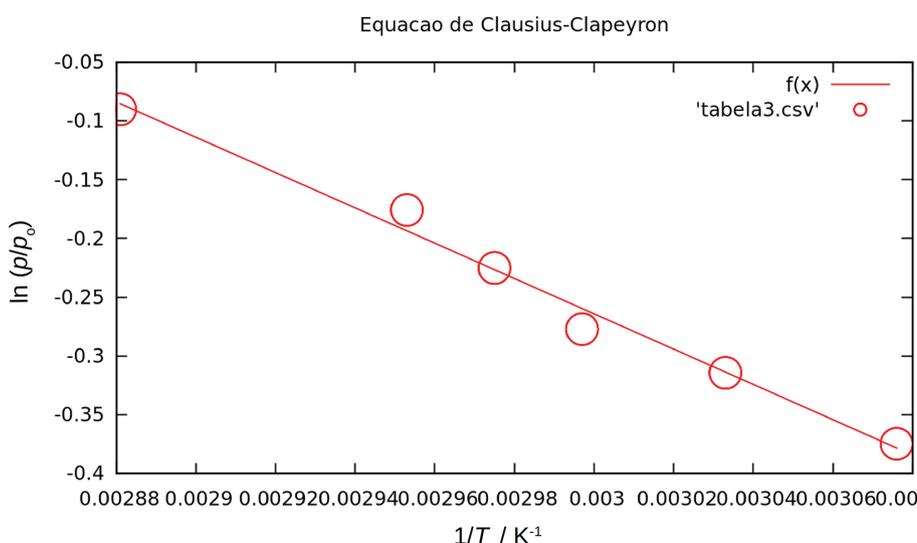


Figura 4: Gráfico de Clausius-Clapeyron para a determinação da entalpia de vaporização e da temperatura normal de ebulição do CCl_4 . Fonte: os autores.

Questionário - Total

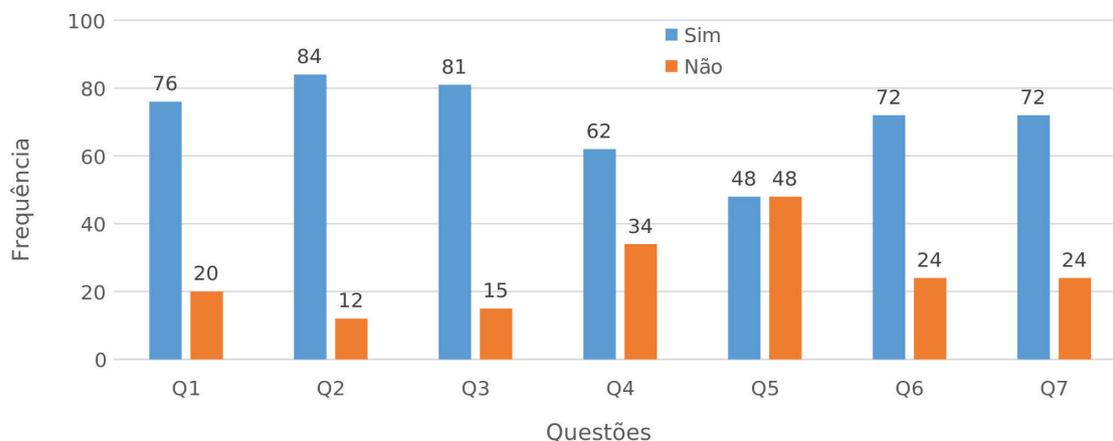


Figura 5: Frequências das respostas referentes às 7 perguntas do questionário. Fonte: os autores.

O comando *set title "Isoterma de van der Waals" font",20"* era passado e os estudantes copiavam esse mesmo comando, aprendendo a funcionalidade dele.

Questão 5 (Q5): Quais as dificuldades apresentadas pelo Gnuplot?

Os estudantes apresentaram certa dificuldade por não ter prática de informática, outros porque o programa era novo, uns porque não tinham afinidade com o inglês. Desse modo, conclui-se que é necessário um pouco de prática. Seguem algumas respostas positivas fornecidas pelos estudantes: "É somente aplicar a fórmula", "Os comandos são fáceis junto com as instruções fornecidas", "O programa é intuitivo e fácil". Algumas respostas negativas dos discentes foram: "Por causa da linguagem computacional", "Porque requer conhecimento computacional e de inglês", "Requer conhecimento de inglês".

Questão 6 (Q6): Teve melhor aprendizagem sobre o tema?

A visualização dos gráficos fez com que a maioria compreendesse melhor o assunto. No caso dos gráficos 3D os discentes puderam manusear o gráfico e observá-lo em diferentes ângulos.

Questão 7 (Q7): O programa Gnuplot ajudou a compreender melhor as diferenças e semelhanças comportamentais do Gás Ideal e do Gás de van der Waals? Por que?

A frequência de "sim" foi de 72%, porque o gráfico consegue mostrar uma faixa grande de isotermas e ficam visíveis as diferenças comportamentais do gás de van der Waals para o gás ideal, na região da superfície pVT onde há os mínimos e máximos locais nas isotermas e suas semelhanças para baixas pressões.

Considerações Finais

O Gnuplot foi a ferramenta computacional escolhida para facilitar o estudo de Físico-Química através da plotagem de gráficos. Uma vez que o conteúdo dessa disciplina não é

simples, principalmente ao se tratar do formalismo matemático expresso pelo cálculo diferencial e integral. Sendo assim, com o Gnuplot é possível construir *scripts* adequados, em que funções, variáveis e constantes são previamente definidas, gerando como resultados gráficos interativos que podem ser rotacionados pelo usuário, sem a necessidade da construção de tabelas extensas, como é feito em programas usuais da área. Assim, este estudo teve como proposta mostrar as contribuições do programa Gnuplot para o ensino e aprendizagem de alguns conteúdos de Físico-Química.

O programa Gnuplot segue os comando do Fortran, no qual existem basicamente duas formas de se escrever um programa: com formulário fixo ('fixedform') ou com formulário livre ('freeform').

O objetivo deste estudo foi a criação e utilização dos *scripts* prontos, em que estão todas as linhas de comando dos *scripts* comentadas para um melhor entendimento. A validação foi feita em turmas de um curso técnico e cursos superiores. O conteúdo foi explicado brevemente porque os alunos já o haviam visto em aulas teóricas com seus professores, em seguida foram apresentadas a plataforma Linux, o programa Gnuplot, e então feitos os *scripts* para que fossem confeccionados os gráficos 2D e 3D para melhor visualização, sendo entregue um questionário.

A partir das respostas aos questionários aplicados em turmas onde havia tanto discentes do curso Técnico em Química quanto de cursos superiores em Bacharelado em Química Industrial e Licenciatura em Química, o resultado, de forma geral, foi satisfatório, mostrando que, com o uso do Gnuplot, o aprendizado em problemas referentes à Físico-Química é facilitado porque a visualização dos gráficos fez com que a maioria entendesse um pouco mais do assunto. No caso dos gráficos 3D, os alunos puderam manusear os gráficos e olhá-los em diferentes posições, pois o programa possui ferramentas para esse manuseio.

Nota

¹Disponível em <https://webbook.nist.gov/cgi/cbook.cg>

i?ID=C56235&Units=SI&Mask=4#Thermo-Phase e em [https://en.wikipedia.org/wiki/Carbon_tetrachloride_\(data_page\)#Thermodynamic_properties](https://en.wikipedia.org/wiki/Carbon_tetrachloride_(data_page)#Thermodynamic_properties).

Agradecimentos

Os autores agradecem ao IFES, CNPq e FAPES (Edital 006/2014) pelo suporte financeiro, além dos computadores necessários à execução deste trabalho.

Referências

ATKINS, P.; PAULA, J. *Physical Chemistry*. Oxford: Oxford University Press, 2008.

BALL, D. W. *Físico-química*. São Paulo: Pioneira Thomson Learning, 2005.

BROWN, T. L.; LeMAY, H.E.; BURSTEN, B. E. *Química: a ciência central*. 9a. ed. São Paulo: Pearson Prentice Hall, 2005.

CASTELLAN, G. *Fundamentos de Físico-Química*. Rio de Janeiro: LTC, 1986.

GALO, M. *Tutorial: introdução ao uso do aplicativo Gnuplot*. Presidente Prudente: [s.i.], 2017.

Gabriela Acco (gabrielaacco@yahoo.com.br), licenciada em Química pelo Instituto Federal do Espírito Santo (IFES). Vila Velha, ES – BR. **Fabiana da Silva Kauark** (fabianak@ifes.edu.br), pedagoga; doutora e mestre em Educação pela Universidade Autônoma de Assunción/Universidade Federal de Uberlândia, mestre em Ensino de Ciências pelo Instituto Federal do Espírito Santo. Estágio pós doutoral na Universidade de Aveiro Portugal. Vila Velha, ES – BR. **Arlan da Silva Gonçalves** (agoncalves@ifes.edu.br), mestre em Ciências pelo Instituto Militar de Engenharia (IME). Doutor em Ciências pelo Instituto de Biofísica Carlos Chagas Filho – UFRJ. Atualmente é professor de Ensino Básico, Técnico e Tecnológico do IFES. Vila Velha, ES – BR.

KISHIMOTO, T. M. *O jogo e a educação infantil*. São Paulo: Pioneira, 1994.

LEVINE, I. N. *Physical Chemistry*, 6th ed. New York: McGraw-Hill, 2009.

MIRANDA-PINTO, C. O. B.; SOUZA, E. Tratamento de dados experimentais. In: *Manual de trabalhos práticos de físico-química*. Belo Horizonte: Editora UFMG, 2006. Cap. 1, p. 15-21.

VIANA, P. A. *Introdução ao aplicativo Gnuplot*, Faculdade de Matemática, Instituto de Ciências Exatas e Naturais, Universidade Federal do Pará, Pará, 2011. Disponível em: http://www.sobralmatematica.org/monografias/paty.alvi_livroGnuplot.pdf, acesso em jun. 2018.

Abstract: *Use of Gnuplot as a teaching facilitator: Physico-Chemical applications.* This study is based on the use of the Gnuplot program as a facilitator tool for Physico-chemical problems to promote content assimilation by means of 2D and 3D graphical interpretations. Students were presented to some features of the program and scripts were made for plotting 2D and 3D graphics to stimulate students' abstract thinking. As methodological resources, we used the Gnuplot manual, Physical Chemistry problems, a questionnaire to measure the learning level of the public composed by students of the technical and undergraduate Chemistry courses of one of the units of the Federal Institute of Education, Science and Technology of southeastern Brazil. Results from analysis of the questionnaires suggest that the use of Gnuplot facilitated the comprehension of physico-chemical contents.

Keywords: Physical Chemistry, plots, Gnuplot.