



UNIVERSIDADE FEDERAL DO RIO DE JANEIRO
INSTITUTO DE QUÍMICA
CURSO DE QUÍMICA



RAIANY DA SILVA STEIN

**PROTÓTIPO DE UMA FERRAMENTA VIRTUAL PARA AUXILIAR
ESTUDOS E SIMULAÇÕES EM QUÍMICA**

Rio de Janeiro
2024

RAIANY DA SILVA STEIN

PROTÓTIPO DE UMA FERRAMENTA VIRTUAL PARA AUXILIAR ESTUDOS E SIMULAÇÕES EM QUÍMICA

Trabalho de Conclusão de Curso apresentado ao Curso de Bacharelado em Química do Instituto de Química da Universidade Federal do Rio de Janeiro – UFRJ, como parte dos requisitos necessários à obtenção do título de Bacharel em Química.

Orientadores: Profº. Dr. Roberto Salgado Amado

Profº. Dr. Juan Omar Machuca Herrera

Rio de Janeiro

2024

CIP - Catalogação na Publicação

S819p Stein, Raiany da Silva
Protótipo de uma ferramenta virtual para auxiliar estudos e simulações em química / Raiany da Silva Stein. -- Rio de Janeiro, 2024.
80 f.

Orientador: Roberto Salgado Amado.
Coorientador: Juan Omar Machuca Herrera.
Trabalho de conclusão de curso (graduação) - Universidade Federal do Rio de Janeiro, Instituto de Química, Bacharel em Química, 2024.

1. Termodinâmica. 2. Gases perfeitos. 3. Simulação. 4. TDIC. I. Salgado Amado, Roberto, orient. II. Machuca Herrera, Juan Omar, coorient. III. Título.

RAIANY DA SILVA STEIN

PROTÓTIPO DE UMA FERRAMENTA VIRTUAL PARA AUXILIAR ESTUDOS E SIMULAÇÕES EM QUÍMICA

Trabalho de Conclusão de Curso apresentado ao Curso de Bacharelado em Química do Instituto de Química da Universidade Federal do Rio de Janeiro – UFRJ, como parte dos requisitos necessários à obtenção do título de Bacharel em Química.

Aprovado em: 11 de dezembro de 2024

BANCA EXAMINADORA

Profº. Dr. Roberto Salgado Amado

Instituto de Química - UFRJ

<http://lattes.cnpq.br/0735654736121608>

Profº. Dr. Juan Omar Machuca Herrera

Instituto de Química - UFRJ

<http://lattes.cnpq.br/2624587431068949>

Profº. Dr. Antonio Carlos de Oliveira Guerra

Instituto de Química - UFRJ

<http://lattes.cnpq.br/7991984241377300>

Profª. Dr. Priscila Tamiasso Martinhon

Instituto de Química - UFRJ

<http://lattes.cnpq.br/0907008554946779>

AGRADECIMENTOS

Começo agradecendo à vida e ao destino por me guiar por caminhos onde encontrei pessoas e iniciativas incríveis. Me sinto extremamente sortuda por tudo que pude vivenciar na minha vida profissional e acadêmica, desde a bolsa de estudos oferecida pela instituição ISMART, a aprovação no vestibular para estudar na UFRJ, aos laboratórios que me acolheram para as iniciações científicas, aos profissionais e professores que tive contato e proporcionaram uma troca de experiência e conhecimento que me tornam o que sou hoje.

Gostaria de expressar minha sincera gratidão à Fundação Carlos Chagas Filho de Amparo à Pesquisa do Estado do Rio de Janeiro (FAPERJ) e ao Conselho Nacional de Desenvolvimento Científico e Tecnológico (CNPq) pelo suporte por meio das bolsas de iniciação científica durante minha graduação. Este incentivo foi essencial para o meu desenvolvimento técnico-científico e aprimoramento da minha formação acadêmica.

Não há como esquecer do apoio que recebo constantemente da família, da minha mãe Jane, do meu pai Sidney, das minhas irmãs Daiany e Taiany, dos meus irmãos João Paulo e Jonatan, da minha vózinha Dica e da minha tia Cátia. Vocês são o combustível para o meu crescimento e apoio de sempre nos momentos mais difíceis. Queria também acrescentar todo carinho que recebo da família do meu marido, pessoas que me receberam de braços abertos.

Aos meus queridos amigos, que se dividem entre amigos de infância, amigos que fiz durante os cursos de graduação, galera da Navarro e Bodudinhos, agradeço por todos os momentos de descontração e alegria proporcionados. A vida fica muito mais interessante e leve quando estou perto de vocês. Não consigo imaginar melhores pessoas para dividir o tempo.

Por fim, porém o mais especial, dedico todo o meu trabalho ao meu marido Paulo Sérgio, nossa filha Mariana e a cachorrinha Lola. Não há nada que eu preze mais do que a família que construímos, as memórias que temos e o futuro que sonhamos. Vocês são as minhas preciosidades, eu os amo com toda a potência que esse sentimento pode ter.

RESUMO

Em um mundo cada vez mais conectado e imerso em ferramentas digitais, novas abordagens para o ensino e a aprendizagem estão sendo implementadas, reconhecendo a tecnologia como uma aliada. As Tecnologias Digitais de Informação e Comunicação (TDIC) já integram oficialmente as diretrizes pedagógicas do Ministério da Educação (MEC) para a educação infantil, o ensino fundamental e médio no Brasil. No âmbito universitário, espera-se que as tecnologias sejam incorporadas naturalmente aos estudos e iniciativas desenvolvidas visando otimizar tarefas repetitivas e lentas. Contudo, a falta de familiaridade com as linguagens de programação, ferramentas pouco intuitivas e acessíveis, e barreiras linguísticas agem como entraves à essa adoção. Este trabalho visa desenvolver um protótipo de *software* fundamentado em princípios de termodinâmica, capaz de simular o comportamento de gases perfeitos monoatômicos em processos isotérmicos, isobáricos e isovolumétricos, realizando cálculos da variação da energia interna, do trabalho e do calor, e apresentando representações gráficas. A lógica algorítmica, a usabilidade e a interface do usuário foram projetadas para computadores, utilizando HTML5, CSS3 e *TypeScript*. O protótipo foi avaliado em comparação com três iniciativas de referência — *PhET*, *LearnChemE* e *Chemistry 301* — considerando aspectos como idiomas disponíveis, interface visual, resultados exibidos, parâmetros calculados, explicação teórica e a possibilidade de colaboração por meio da disponibilização do código-fonte. Os resultados demonstram que os cálculos realizados pela aplicação estão em consonância com a teoria e o protótipo oferece funcionalidades adicionais em relação às ferramentas comparativas. Conclui-se que o trabalho pode servir como uma ferramenta educativa para o estudo da físico-química e como uma plataforma científica colaborativa de construção totalmente nacional.

Palavras chaves: termodinâmica, gases perfeitos, simulação, TDIC

ABSTRACT

In an increasingly connected world, immersed in digital tools, new approaches to teaching and learning are being implemented, recognizing technology as an ally and facilitator. Digital Information and Communication Technologies (TDIC) are now officially integrated into the pedagogical guidelines of Brazil's Ministry of Education (MEC) for early childhood, elementary, and high school education. In the university context, technology is expected to be naturally integrated into studies and initiatives to optimize repetitive, time-consuming tasks. However, obstacles to adoption remain, including lack of familiarity with programming languages, limited availability of user-friendly tools, and language barriers. This work aims to develop a software prototype based on thermodynamic principles, capable of simulating the behavior of monatomic ideal gases in isothermal, isobaric, and isochoric processes, calculating changes in internal energy, work, and heat, and providing graphical representations. The algorithmic logic, usability, and user interface were developed for desktop environments using HTML5, CSS3, and TypeScript. The prototype was evaluated against three reference platforms—PhET, LearnChemE, and Chemistry 301— considering criteria such as available languages, visual interface, displayed results, calculated parameters, theoretical explanation, and the potential for collaboration through open-source availability. The results show that the calculations performed by the application are consistent with theoretical values and the prototype offers additional functionalities compared to the tools used for comparison. It is concluded that this work can serve as an educational tool for the study of physical chemistry and as a fully national collaborative scientific platform.

Keywords: thermodynamics, ideal gasses, simulation, TDIC

LISTA DE ABREVIATURAS E SIGLAS

A	Área
BNCC	Base Nacional Comum Curricular
CNTP	Condições normais de temperatura e pressão
CNATP	Condições normais ambientes de temperatura e pressão
CNPQ	Conselho Nacional de Desenvolvimento Científico e Tecnológico
C_p	Capacidade calorífica a pressão constante
$C_{p,m}$	Capacidade calorífica molar a pressão constante
CSS3	Folhas de Estilo em Cascata
C_v	Capacidade calorífica a volume constante
$C_{v,m}$	Capacidade calorífica molar a volume constante
F	Força
FAPERJ	Fundação Carlos Chagas Filho de Amparo à Pesquisa do Estado do Rio de Janeiro
H	Entalpia
HTML5	Linguagem de Marcação de Hipertexto

k	Constante de Boltzmann
m	Massa
M	Massa molar
MEC	Ministério da Educação
n	Número de mol
N_A	Número de Avogadro
p	Pressão
P_{ex}	Pressão externa
p_f	Pressão final
p_i	Pressão inicial
q_p	Quantidade de calor a pressão constante
$q_{p,m}$	Quantidade de calor a pressão constante e 1 mol
q_v	Quantidade de calor a volume constante
$q_{v,m}$	Quantidade de calor a volume constante e 1 mol
R	Constante dos gases
T	Temperatura

T_c	Temperatura em °C
TDIC	Tecnologias Digitais de Informação e Comunicação
T_f	Temperatura final
T_i	Temperatura inicial
T_k	Temperatura em Kelvin
U	Energia interna
U_f	Energia interna final
U_i	Energia interna inicial
V	Volume
V_f	Volume final
V_i	Volume inicial
v_x, v_y, v_z	Velocidades nos eixos x, y e z respectivamente
w	Trabalho

LISTA DE ILUSTRAÇÕES

Figura 1	Sistemas abertos, fechados e isolados	19
Figura 2	Sistema gasoso exercendo pressão sob um pistão	20
Figura 3	Sistema em desequilíbrio de pressão (a) e em equilíbrio mecânico (b)	21
Figura 4	Fluxo de calor	21
Figura 5	Relação pressão e volume (isoterma)	23
Figura 6	Relação volume e temperatura (isobárica)	24
Figura 7	Relação pressão e temperatura (isovolumétrica)	24
Figura 8	Resumo das leis de Boyle-Mariotte, Charles e Gay-Lussac e Princípio de Avogadro	25
Figura 9	Interação em função da separação internuclear	26
Figura 10	Superfície tridimensional com eixos p, V, T	27
Figura 11	Trabalho e calor no sistema	30
Figura 12	Lei zero da termodinâmica	32

Figura 13	Processo endotérmico e exotérmico	32
Figura 14	Expansão a pressão constante	35
Figura 15	Expansão a temperatura constante	36
Figura 16	Simulador PhET	48
Figura 17	Simulador LearnChemE	48
Figura 18	Simulador Chemistry 301	49
Figura 19	Tela de login	51
Figura 20	Painel de opções	52
Figura 21	Tela de simulação	53
Figura 22	Processo lógico do protótipo	57

LISTA DE TABELAS

Tabela 1	Valores de pressão em diferentes unidades	20
Tabela 2	Relações para transformações isovolumétricas, isotérmicas e isobáricas com n constante	28
Tabela 3	Valores de R	28
Tabela 4	Equações de estado para gases	29
Tabela 5	Cálculo de propriedades termodinâmicas para gás perfeito	39
Tabela 6	Simuladores online para análise comparativa com o protótipo ...	43
Tabela 7	Parâmetros da simulação	45
Tabela 8	Cenários de testes do protótipo	46
Tabela 9	Resultados dos cenários de testes do protótipo	54
Tabela 10	Comparação entre os resultados teóricos e calculados	54
Tabela 11	Análise comparativa com outros simuladores	55

SUMÁRIO

1	INTRODUÇÃO	14
2	OBJETIVOS	17
2.1	Objetivo Geral	17
2.2	Objetivos Específicos	17
3	REVISÃO BIBLIOGRÁFICA	18
3.1	Conceitos Básicos da Termodinâmica	18
3.2	Equações de Estado	22
3.3	Gases Perfeitos	26
3.4	Primeira Lei da Termodinâmica	29
3.5	Processos Irreversíveis com Gás Perfeito	34
3.6	Simulações	39
4	METODOLOGIA	42
4.1	Tela de Login	43

4.2	Painel de Opções	44
4.3	Tela de Simulação	44
4.4	Comparação entre modelos	47
5	RESULTADOS E DISCUSSÃO	50
6	CONSIDERAÇÕES FINAIS	58
7	REFERÊNCIAS BIBLIOGRÁFICAS	60
8	ANEXOS	65

1. INTRODUÇÃO

Ferramentas digitais permeiam o cotidiano e estão assumindo, cada vez mais, novos papéis e funcionalidades, visando facilitar tarefas, promover entretenimento, fornecer modelos visuais para auxiliar em simulações, conectar pessoas, agilizar o fluxo de informações, além de auxiliar em questões de segurança e monitoramento, entre outros. O mundo vivenciou uma verdadeira revolução com a pandemia do COVID-19, ficando evidente a necessidade de remodelar muitas atividades e serviços para se adaptarem ao ambiente virtual frente ao isolamento ou a impossibilidade de realizar tarefas presenciais. Com isso, percebe-se a vida cada vez mais integrada à tecnologia e sua evolução possui reflexos significativos na área da educação, especialmente no que diz respeito ao processo de ensino e aprendizagem (LIMA; CHAGAS; COSTA, 2022).

Com o passar dos anos, empresas e instituições viabilizaram iniciativas e *softwares* denominados Tecnologias Digitais de Informação e Comunicação (TDIC) com o propósito de usar a computação como instrumento científico e pedagógico. Tão importante é a importância das TDIC no cenário atual que estas foram incorporadas às práticas docentes como uma das Competências Gerais da Base Nacional Comum Curricular (BNCC), documento normativo elaborado pelo Ministério da Educação (MEC) que norteia as instituições públicas e privadas para a elaboração dos currículos escolares e propostas pedagógicas para a educação básica no Brasil (educação infantil, ensino fundamental e médio) (BRASIL, 2017). A quinta competência geral da BNCC é a que destaca a importância do uso de tecnologias como uma ferramenta útil para produzir conhecimento, solucionar problemas e promover o protagonismo dos estudantes no processo de aprendizagem.

Assim como no ensino básico brasileiro, o ensino superior tem acompanhado a tendência de integração efetiva das Tecnologias Digitais de Informação e Comunicação (TDIC) ao longo dos anos, visando promover uma aprendizagem significativa e estimular o interesse e o envolvimento dos estudantes universitários. Como resultado dessa integração, percebe-se um ambiente educacional mais crítico e reflexivo, que favorece a construção de bases sólidas de conhecimento, estimula a autonomia,

criatividade e inovação, além de possibilitar uma abordagem interdisciplinar que conecta diferentes áreas de conhecimento (MORAES *et al.*, 2022).

Ainda que ferramentas tecnológicas tenham sido incorporadas no meio acadêmico, há uma problemática acerca do desenvolvimento de soluções tecnológicas à nível nacional, para usuários que não conhecem programação e/ou que não possuem domínio de outro idioma além do português. Muito do material que se é consumido são de iniciativas estrangeiras ou que exigem mais habilidades de manipulação de *software* (LIMA; CHAGAS; COSTA, 2022).

O objetivo deste trabalho foi desenvolver um protótipo de uma ferramenta virtual voltada para estudos e simulações em Química, com foco na área de físico-química para conceitos relacionados aos gases ideais. Desta forma, pretende-se investigar o comportamento dos gases ideais em processos isotérmicos, isobáricos e isovolumétricos, além de calcular as propriedades de variação da energia interna, trabalho e quantidade de calor envolvidos, conforme as Leis da Termodinâmica. Considerando que esse conhecimento em físico-química é fundamental para estudos mais avançados na disciplina, sendo geralmente um dos primeiros tópicos abordados no ciclo básico de cursos como Engenharia, Química, Física, entre outros, além de estar presente no currículo de disciplinas do ensino básico em escolas brasileiras.

A iniciativa foi desenvolvida utilizando HTML5, CSS3 e *TypeScript* como instrumentos para a construção visual e da lógica de programação do protótipo. O *JavaScript* é uma das linguagens de programação mais utilizadas no mundo, permite adicionar dinamicidade e implementar itens complexos, geralmente responsável pelo comportamento e funcionalidade das páginas web (SASKA *et al.*, 2020). *JavaScript* e *TypeScript* possuem uma estreita relação, visto que *TypeScript* foi criado para ser uma extensão do *JavaScript*, com uma dinâmica praticamente semelhante na parte de escrita de algoritmos mas adicionando recursos que aumentam a segurança e a produtividade no desenvolvimento de software. O HTML (abreviação para a expressão inglesa *HyperText Markup Language*) e o CSS (abreviação para a expressão inglesa *Cascading Style Sheets*) são tecnologias padrão para, respectivamente, estruturar a adição de conteúdos e estilização. Os três elementos, em conjunto, permitem a criação de uma proposta com um conteúdo visual e interativo para inúmeras possibilidades que

o desenvolvedor desejar.

Este projeto também tem como objetivo promover a compreensão de conceitos científicos por meio da tecnologia buscando desenvolver uma ferramenta simples e intuitiva para os usuários. A concepção deste protótipo visa aprimorar as estratégias de ensino, oferecendo um recurso que auxilie no desenvolvimento acadêmico e cognitivo dos estudantes brasileiros, ao mesmo tempo em que introduz novas abordagens didáticas. É fundamental enfatizar que a ferramenta não tem a intenção de substituir a relação entre aluno e professor, mas sim complementá-la.

Um dos pontos importantes para a avaliação da ferramenta desenvolvida é a comparação com outras iniciativas semelhantes que estão disponíveis ao público. Os requisitos avaliados foram: idioma disponibilizado, interface visual com o usuário, devolutiva dos resultados, parâmetros que podem ser calculados pela ferramenta, explicação teórica dos fenômenos observados e possibilidade da colaboração da comunidade científica. Com o parâmetro de idioma, verificou-se se a opção de língua portuguesa encontra-se disponível, importante informação visto que muitos brasileiros não possuem conhecimento em outros idiomas como o espanhol ou o inglês (LIMA; CHAGAS; COSTA, 2022). A utilização de recursos que estão fora do idioma de domínio do usuário pode afetar a usabilidade, a interpretação e a capacidade de reflexão.

A avaliação da interface visual é referente à usabilidade do *software* ou página *web* apenas com os elementos disponíveis na interface e sem a necessidade de conhecimentos prévios da ferramenta ou de qualquer linguagem de programação. A devolutiva dos resultados é avaliada para a averiguação se o retorno está em concordância com o conceito teórico. Também verificou-se quais os parâmetros que são calculados pelas ferramentas em estudo. Quanto maior o número de parâmetros, mais informações podem ser obtidas e trabalhadas. Além disso, analisou-se se entre as ferramentas havia explicações teóricas sobre as simulações ou cálculos. Por fim, no último parâmetro, examinou-se a possibilidade de contribuições de outros membros e instituições da comunidade científica acerca do conteúdo.

Assim, espera-se que este trabalho estimule mais iniciativas para a produção de conteúdos científicos nacionais em diferentes áreas do conhecimento e que estes possam ser acessados pelo público através das TDIC.

2. OBJETIVOS

2.1 Objetivo Geral

O presente trabalho de conclusão de curso objetivou desenvolver um protótipo de ferramenta virtual para auxiliar estudos e simulações em físico-química de sistemas fechados com gás ideal monoatômico.

2.2 Objetivos Específicos

- Desenvolver um *designer* visual de fácil manipulação para o usuário e em português;
- Simular processos isotérmicos, isovolumétricos e isobáricos reversíveis para o gás ideais através de gráficos e elementos visuais;
- Cálculo do trabalho (w), variação da energia interna (ΔU) e a quantidade de calor (Q) considerando o cenário de processos reversíveis;
- Comparação com outras ferramentas *online* de simulação para o gás perfeito.

3. REVISÃO BIBLIOGRÁFICA

3.1 Conceitos Básicos Da Termodinâmica

Antes de iniciar a sessão que desenvolve sobre os aspectos computacionais do trabalho, é necessário realizar uma revisão teórica sobre o tema e os conceitos básicos que o norteia. O enfoque dado será direcionado para estudantes do ensino superior e do ensino médio/técnico.

Para a aplicação das leis da termodinâmica, é necessário entender a nomenclatura utilizada para elucidar os fenômenos estudados. Entende-se como sistema a porção delimitada do universo em estudo e vizinhança como todo o resto nas proximidades do sistema que pode ou não trocar massa, momento ou calor. A fronteira é o que separa sistema e vizinhança, a depender do seu tipo pode ser classificada em rígida ou móvel (relação com a variação de volume do sistema ou não), permeáveis ou impermeáveis (relação com a transferência de massa sistema-vizinhança ou não) e diatérmicas ou adiabáticas (relação com a transferência de calor sistema-vizinhança ou não).

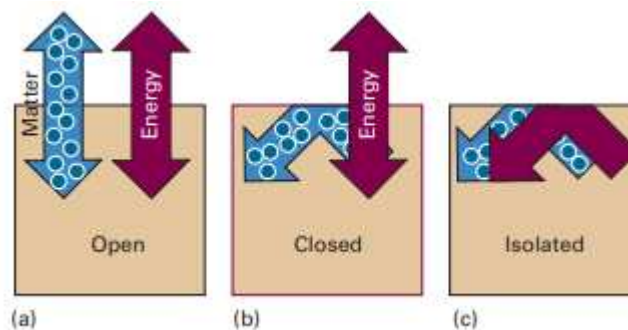
A interação entre sistema e vizinhança depende da classificação do sistema. Sistemas abertos são aqueles que permitem a transferência de massa e energia e sistemas fechados apenas permitem transferência de energia. Sistemas isolados possuem fronteiras impermeáveis (sem transferência de matéria) e não existe troca de energia, seja na forma de calor ou trabalho. Sistemas isolados são aqueles que não são afetados pela sua vizinhança, logo possuem massa e volume constantes. Na figura 1 são apresentados os três diferentes sistemas.

As propriedades de um sistema é também dependente do seu estado físico. O gás é um estado físico da matéria e possui como características ocupar todo o volume no qual está inserido (ATKINS; DE PAULA, 2012).

Variáveis podem ser classificadas como intensivas e extensivas. Uma variável intensiva é aquela cujo valor é independente da quantidade de matéria presente no sistema. Exemplos de propriedades intensivas são: temperatura (T), pressão (p), massa molar (M). Em contraste, uma variável extensiva depende diretamente da quantidade de

matéria no sistema. O valor de uma variável extensiva é a soma dos valores das partes constituintes menores, a propriedade é aditiva. Um exemplo de variável extensiva é o volume, cujo valor total é a soma dos volumes das partes menores que compõem o sistema em estudo.

Figura 1 – Sistemas abertos, fechados e isolados



Fonte: Atkins e De Paula (2012)

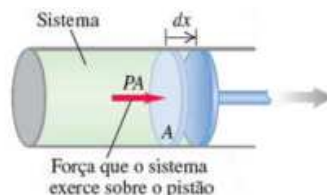
Na Termodinâmica Clássica, entende-se como estado termodinâmico a condição específica de um sistema, definida por um conjunto mínimo de propriedades macroscópicas mensuráveis, direta ou indiretamente. Essas propriedades, conhecidas como variáveis de estado, são intrínsecas ao sistema e permitem descrever, caracterizar e prever o seu comportamento (SMITH; VAN NESS; ABBOTT, 2000). Empiricamente, sabe-se que as variáveis de estado estão relacionadas entre si por meio de equações de estado, que descrevem sistemas específicos e condições particulares. Este assunto será retomado posteriormente ao abordar os gases ideais e suas relações.

Variáveis como quantidade (n), volume ocupado (V), pressão ao qual o sistema está submetido (p) e temperatura (T) são propriedades particularmente importantes para descrever o estado do sistema no cenário de estudo do gás ideal.

A pressão que uma partícula experimenta é definida pela razão entre a força aplicada e a área na qual a força atua (Equação 1). Em um sistema gasoso, pode-se imaginar que a pressão exercida por um gás nas paredes de um recipiente está intrinsecamente relacionada às colisões das partículas no estado gasoso sob a superfície (Figura 2). A unidade de pressão no Sistema Internacional é o Pascal (Pa).

Na Tabela 1 são apresentados os valores de pressão em diferentes unidades.

Figura 2 – Sistema gasoso exercendo pressão sob um pistão



Fonte: Sears, 2015

$$\text{Equação 1: } p = \frac{F}{A}$$

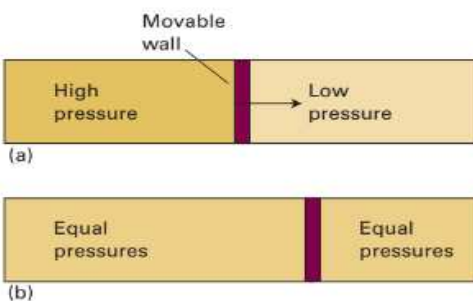
Tabela 1 - Valores de pressão em diferentes unidades

Nome	Símbolo	Valor
pascal	Pa	1 Pa = 1 N.m ² , 1 kg.m ⁻¹ .s ⁻¹
bar	bar	1 bar = 10 ⁵ Pa
atmosfera	atm	1 atm = 101,325 kPa
torr	Torr	1Torr = (101,325/760)Pa
milímetros de mercúrio	mmHg	1 mmHg = 133,322...Pa
libras por polegada quadrada	Psi	1 psi = 6,894757...kPa

Fonte: Atkins e De Paula (2012)

Considere um sistema com dois compartimentos preenchidos, cada um deles, com gases. Os gases são separados por uma parede móvel, conforme a Figura 3. Se houver diferença de pressão entre os compartimentos, a parede móvel será deslocada no sentido do gás com menor pressão visto que a força exercida na parede será maior no ambiente com maior pressão. Nesse processo, há o declínio da pressão no compartimento que está com gás de maior pressão e aumento da pressão no outro compartimento. Quando a condição de igualdade de pressão é estabelecida nos dois ambientes, a parede não se move para nenhum dos lados e chega-se ao estado de equilíbrio mecânico entre os dois gases.

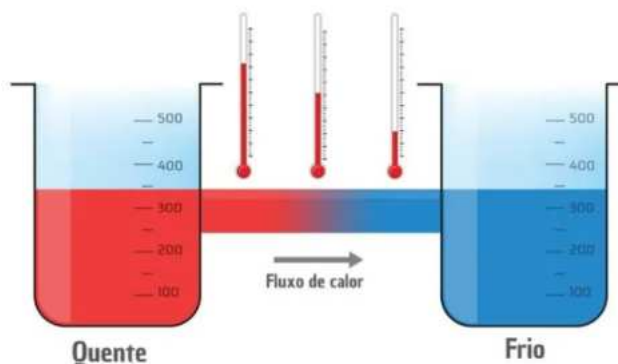
Figura 3 - Sistema em desequilíbrio de pressão (a) e em equilíbrio mecânico (b)



Fonte: Atkins e De Paula (2012)

A temperatura é a direção do fluxo de energia, na forma de calor, que transita entre dois corpos em contato. A direção é sempre do corpo de maior temperatura para o corpo de menor temperatura (Figura 4). A temperatura mensura a energia cinética média de um grupo de partículas de um sistema em equilíbrio térmico (partículas com a mesma temperatura).

Figura 4 - Fluxo de calor



Disponível em < <https://brasilecola.uol.com.br/fisica/lei-fourier.htm> >. Acessado em: 3 de março de 2024.

A unidade de temperatura no Sistema Internacional é o Kelvin (K). A escala Kelvin é uma escala de temperatura absoluta, ela começa do zero que teoricamente é o ponto mais baixo de temperatura possível e representa o ponto de menor energia cinética para as partículas. Nessa escala, o zero absoluto é definido como 0 Kelvin (0 K). Outro ponto importante é o ponto triplo da água, definido como exatamente 273,15 K (ou 0°C) e tal fato gera a relação com a temperatura na escala Celsius de acordo com a Equação 2.

$$\text{Equação 2: } T_k = T_c + 273,15$$

O volume de um gás é a região do espaço que ele ocupa. Vamos considerar para este presente trabalho que os gases ideais estão uniformemente distribuídos por todo o volume do sistema em estudo. A unidade de volume no sistema internacional é o m^3 .

A quantidade (n) é a medida do número de entidades de uma substância no sistema. A quantidade pode ser determinada em número de átomos, moléculas, mols e entre outros.

Um mol de uma substância possui por definição $6,02214076 \times 10^{23}$ unidades da entidade (SMITH; VAN NESS; ABBOTT, 2000). Esse número também é conhecido como constante de Avogadro (N_A). Há uma relação matemática entre a massa (m) e a massa molar (M) de uma substância que nos fornece o número de moles, vide a equação 3.

$$\text{Equação 3: } n = \frac{m}{M}$$

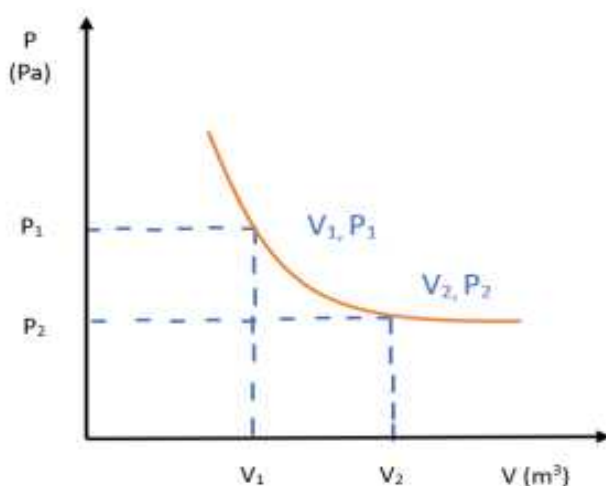
3.2 Equações de estado

É constatada experimentalmente a relação entre as propriedades n , V , p , T para determinar o estado de uma substância pura no estado gasoso. Observa-se que basta determinar três das variáveis supracitadas que a quarta variável terá um valor fixo (ATKINS; DE PAULA, 2012). A equação de estado que correlaciona as quatro variáveis de um gás pode ser descrita de forma genérica como mostra a Equação 4. Um ponto de atenção é que para cada cenário de gases reais haverá um comportamento próprio a depender das substâncias constituintes e apenas em casos particulares que é estabelecido de forma explícita a relação matemática entre as variáveis. Para cenários onde trata-se de gases ideais, há como estabelecer uma descrição matemática cuja equação de estado para gases perfeitos é produto da combinação das Lei de Boyle-Mariotte, Lei de Charles e Gay-Lussac e o Princípio de Avogadro para sistemas em que a pressão tende a zero (Figura 8).

$$\text{Equação 4: } p = f(T, V, n)$$

Observa-se, empiricamente, que o produto p e V é constante quando submetidos à n e T constantes (Lei de Boyle-Mariotte). O gráfico produzido pelos dados de pressão x volume são hipérbolas (curvas obtidas quando o produto dos eixos cartesianos x e y são constantes), a cada temperatura de estudo é possível constatar uma hipérbole diferente chamada de isoterma (Figura 5).

Figura 5 – Relação pressão e volume (isoterma)



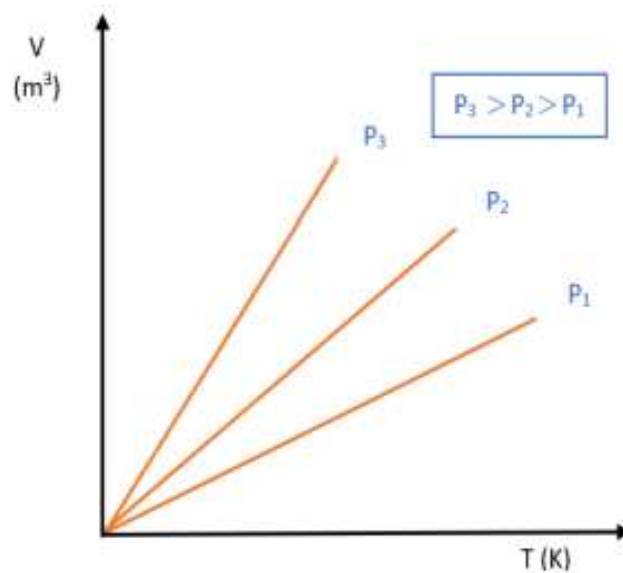
Fonte: Silva (2024)

Nota-se também que o volume é proporcional à T em cenários de n e p constantes (Lei de Charles e Gay-Lussac). Matematicamente, nota-se no gráfico volume x temperatura uma curva semelhante à descrita por uma equação do primeiro grau no primeiro quadrante (equação do tipo $y = ax + b$, onde a é uma constante positiva e b , neste caso, é zero). Dá-se o nome de isóbaras para as curvas produzidas (Figura 6). Há também uma extrapolação para as isóbaras nos pontos onde $V=0$ e $T=0$. De forma análoga, a pressão também é proporcional à T em cenários de n e V constantes (Lei de Charles e Gay-Lussac). As curvas produzidas no gráfico pressão x temperatura são denominadas isocóricas (ou isovolumétricas), havendo extrapolação para os pontos onde $p=0$ e $T=0$ (Figura 7).

De forma complementar, o volume é proporcional à n com p e t constantes

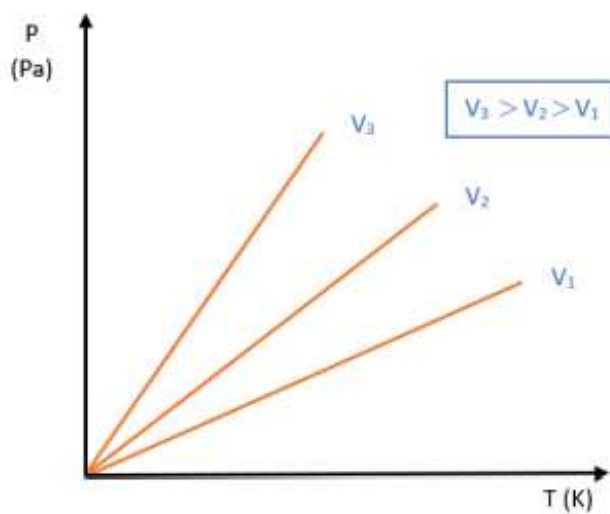
(Princípio de Avogadro).

Figura 6 – Relação volume e temperatura (isobárica)



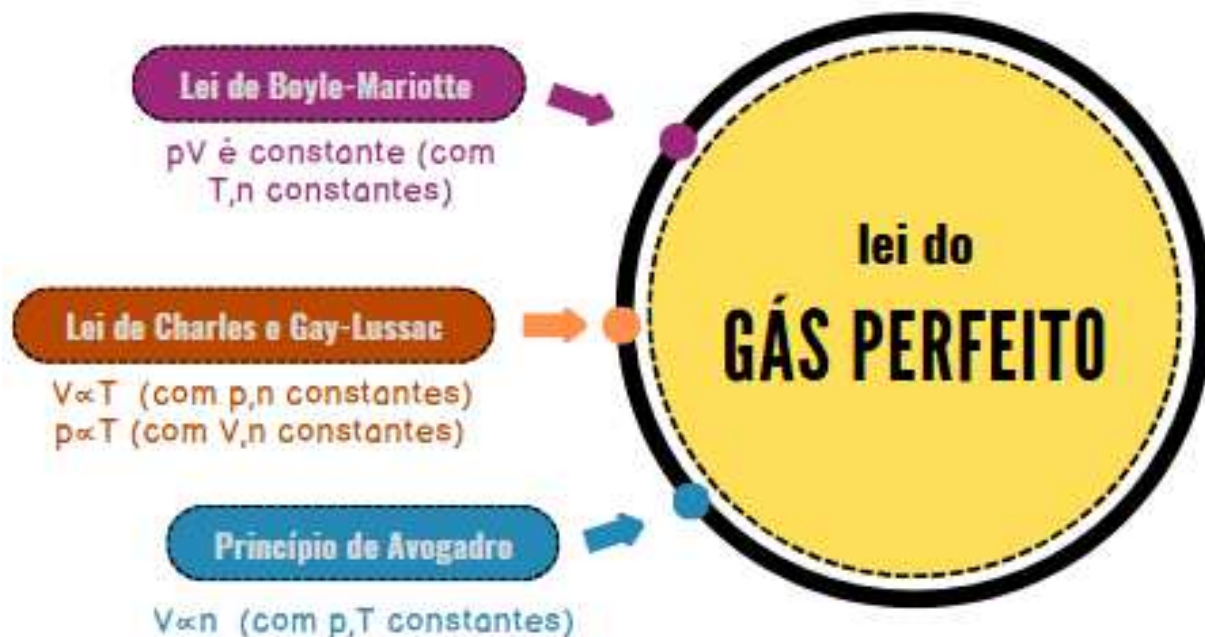
Fonte: Silva (2024)

Figura 7 – Relação pressão e temperatura (isovolumétrica)



Fonte: Silva (2024)

Figura 8 - Resumo das leis de Boyle-Mariotte, Charles e Gay-Lussac e Princípio de Avogadro



Fonte: elaborado pelo autor (2024)

A combinação dos resultados experimentais culminou na expressão da equação de estado de um gás perfeito, Equação 5.

$$\text{Equação 5: } pV = nRT$$

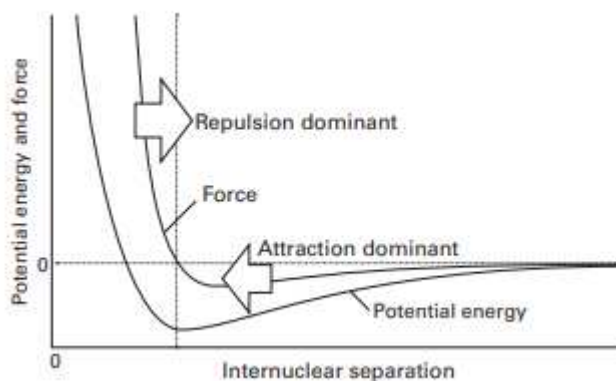
$$\text{Equação 6: } R = kN_A$$

Do ponto de vista molecular, é possível entender o que ocorre quando há variação do volume ou temperatura, imaginando-se um sistema de êmbolo e um gás perfeito. Ao sofrer uma compressão (diminuição do seu volume), as moléculas do sistema termodinâmico vão colidir mais vezes com as paredes do recipiente, o que conseqüentemente gera um aumento da pressão. Para o aumento da temperatura do sistema, as moléculas vão ter uma maior energia cinética e, conseqüentemente, vão colidir mais fortemente com as paredes, gerando uma maior pressão.

3.3 Gases Ideais ou Perfeitos

O gás é dito ideal ou perfeito quando se comporta segundo a equação universal dos gases, Equação 5. As condições de forma geral são satisfeitas quando os sistemas estão em baixas pressões, tendendo à zero. Uma explicação para este cenário é que em sistemas de altas pressões, as forças repulsivas se manifestam em razão da menor distância entre as partículas e as interações de curto alcance. Em pressões moderadas, há a manifestação de forças atrativas, as partículas não estão suficientemente próximas para se repelirem mas nem tão distantes para que seja possível desconsiderar as interações. Com uma pressão tendendo à zero, espera-se que as partículas estejam suficientemente afastadas uma das outras a ponto de ser possível desprezar as interações entre elas, Figura 9 (HALLIDAY; RESNICK; WALKER, 2009).

Figura 9 - Interação em função da separação internuclear



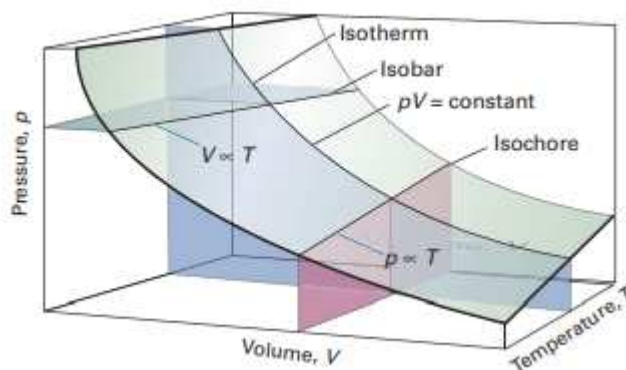
Fonte: Atkins et De Paula (2012)

Os gases ideais são um modelo idealizado de um comportamento de um gás real pois nele imagina-se um conjunto de partículas pontuais idênticas movendo-se aleatoriamente em todas as direções e não interagindo (ATKINS; DE PAULA, 2012). Para a consideração do modelo ser satisfatório, é necessário que o tamanho das moléculas seja desprezível, isto significa que os seus diâmetros devem ser muito menores do que as distâncias médias entre as partículas. Além disso, todas as colisões, seja entre moléculas ou com as paredes do sistema, devem ser consideradas perfeitamente elásticas para que a energia cinética total se conserve. Outro fator

relevante é que em baixas temperaturas pode haver a condensação do gás, transição de estado físico do gasoso para o líquido. Esse fenômeno ocorre devido à baixa energia cinética das moléculas, o que as torna mais suscetíveis a interações moleculares. No cenário projetado para gases perfeitos, não deve haver interações entre as partículas e, portanto, não deve ocorrer a mudança de estado físico.

É possível prever as propriedades de pressão, volume e temperatura, em sistemas cujo número de entidades do sistema (n) é constante, através da avaliação da superfície gerada pela junção dos gráficos (Figura 10) dos processos isotérmicos, isobáricos e isocóricos (ou isovolumétricos).

Figura 10 - Superfície tridimensional com eixos p, V, T



Fonte: Atkins et De Paula (2012)

A partir da equação 5, é possível perceber que para os gases ideais, a relação entre p , V , n e T é uma constante (Equação 7). Portanto, para transformações em sistemas fechados, no qual não há transferência de matéria, é possível relacionar os estados iniciais e finais conforme exposto na Tabela 2.

$$\text{Equação 7: } \frac{p_i V_i}{T_i} = \frac{p_f V_f}{T_f}$$

Tabela 2 - Relações para transformações isovolumétricas, isotérmicas e isobáricas com n constante

Isotérmica	Isobárica	Isovolumétrica
$p_i V_i = p_f V_f$	$\frac{V_i}{T_i} = \frac{V_f}{T_f}$	$\frac{p}{T_i} = \frac{p_f}{T_f}$

Fonte: Atkins et De Paula (2012)

A depender das unidades envolvidas, os valores para a constante dos gases também será numericamente diferente (Tabela 3).

Tabela 3 - Valores de R

R	
8,31447	J.K ⁻¹ .mol ⁻¹
8,20574 x 10 ⁻²	dm ³ .atm.K ⁻¹ .mol ⁻¹
8,31447 x 10 ⁻²	dm ³ .bar.K ⁻¹ .mol ⁻¹
8,31447	Pa.m ³ .K ⁻¹ .mol ⁻¹
62,364	dm ³ .Torr.K ⁻¹ .mol ⁻¹
1,98721	cal.K ⁻¹ .mol ⁻¹

Fonte: Atkins et De Paula (2012).

Em condições normais ambientes de temperatura e pressão (CNATP), na qual a temperatura é de 298,15K e a pressão de 1 bar, temos que o volume molar ocupado por um gás perfeito é de 24,789 dm³.mol⁻¹. Em condições normais de temperatura e pressão (CNTP), com temperatura e pressão, respectivamente, de 0°C e 1 atm, o volume molar será de 22,414 dm³.mol⁻¹ (HALLIDAY; RESNICK; WALKER, 2009).

Gases reais apresentam desvios em relação ao comportamento idealizado dos gases ideais em virtude das interações moleculares (forças atrativas e repulsivas). Como forma de corrigir o desvio a não idealidade dos gases reais, são propostas novas equações de estados para representar os comportamentos (SMITH; VAN NESS; ABBOTT, 2000).

Tabela 4 - Equações de estado para gases

Equação	
Gás perfeito	$p = \frac{RT}{V_m}$
Van der Waals	$p = \frac{RT}{V_m - b} - \frac{a}{V_m^2}$
Berthelot	$p = \frac{RT}{V - b} - \frac{a}{TV_m^2}$
Dieterici	$p = \frac{RT e^{-\frac{a}{RTV_m}}}{V_m - b}$
Virial	$p = \frac{RT}{V_m} \left\{ 1 + \frac{B(T)}{V_m} + \frac{C(T)}{V_m^2} + \dots \right\}$

Fonte: Atkins et De Paula (2012).

3.4 Primeira Lei da Termodinâmica

A Primeira Lei da Termodinâmica versa sobre o princípio da conservação de energia, no qual energia não pode ser destruída e nem criada. Nesta seção, será feita a análise como sistema e vizinhança podem trocar energia na forma de trabalho e/ou calor.

Trabalho (w) é uma grandeza física que mensura a transferência de energia mediante a ação de uma força aplicada a um objeto e gera um deslocamento. O trabalho é uma grandeza escalar (positiva ou negativa) e pode ser representado pela Equação 8, na qual F é o módulo da força, d é o módulo do deslocamento e θ é o ângulo formado entre os vetores força e deslocamento.

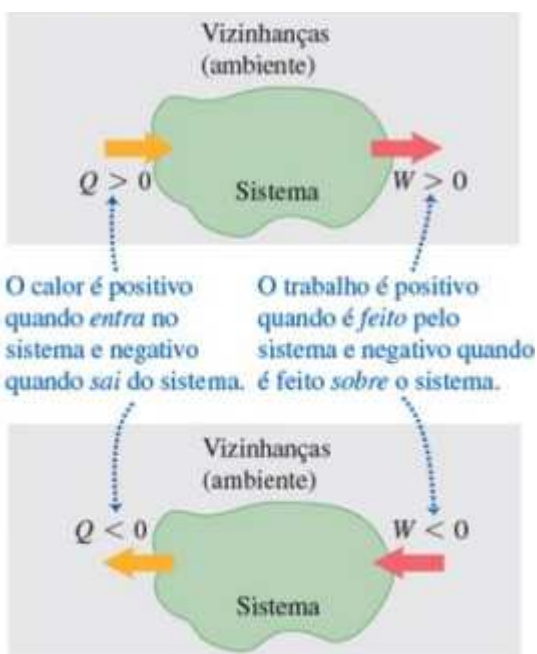
$$\text{Equação 8: } w = Fd \cos\theta$$

Quando se realiza trabalho sobre um sistema (como a compressão de um gás), a energia do sistema aumenta, assim como a sua capacidade de efetuar trabalho. Por outro lado, quando o sistema realiza trabalho sobre a vizinhança (como a expansão de um gás), sua energia diminui, juntamente com sua capacidade de realizar trabalho

(Figura 11). Realizar ou sofrer trabalho é uma forma de transferir energia entre o sistema e sua vizinhança (HALLIDAY; RESNICK; WALKER, 2009).

A forma mais incidente de trabalho que será visto neste projeto é o trabalho no processo de variação de volume do sistema (expansão e compressão reversíveis do gás).

Figura 11 – Trabalho e calor no sistema



Fonte: Sears (2015)

Para um gás perfeito, o trabalho realizado durante um deslocamento infinitesimal pode ser expresso considerando uma força que se opõe ao deslocamento. Quando a força e o deslocamento formam um ângulo de 180° , o cosseno do ângulo θ é igual a -1. Assim, podemos reescrever a expressão para o trabalho infinitesimal segundo a Equação 9. Neste contexto, F representa a força exercida pelo gás, e dz é o deslocamento infinitesimal ao longo do eixo z . A presença do sinal negativo indica que o trabalho é realizado contra a força, refletindo a natureza do trabalho em sistemas onde a força se opõe ao movimento.

$$\text{Equação 9: } dw = - |F|dz$$

Considerando um arranjo de um gás perfeito dentro de um sistema cilíndrico com um pistão de área A sem atrito, de massa desprezível, rígido e sob uma pressão externa p_{ex} . A magnitude da força atuando na superfície do pistão é $|F| = p_{ex}A$. O trabalho nesse sistema pode ser representado pela Equação 10. Tendo em mente que Adz é a variação infinitesimal de volume (dV), temos que o trabalho de expansão de um sistema à uma pressão externa p_{ex} será :

$$\text{Equação 10: } dw = -p_{ex}Adz = -p_{ex}dV$$

Para calcular o trabalho total (Equação 11) é necessário fazer a integral da Equação 10.

$$\text{Equação 11: } w = \int_{V_i}^{V_f} -p_{ex}dV$$

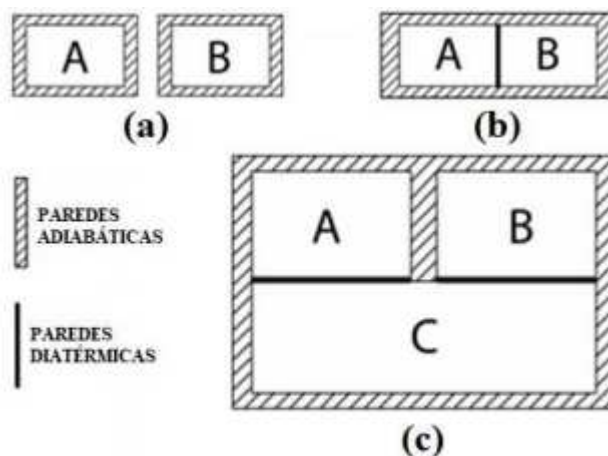
Expansões livres, quando a força oposta é nula, temos que w será zero. O trabalho também pode ser calculado a partir da área abaixo da curva do gráfico pressão *versus* volume.

Além do trabalho, há outras maneiras de trocar energia entre um sistema e sua vizinhança, como por meio do calor. O calor é outra forma de transferência de energia, o fluxo de calor é sempre do corpo de maior temperatura para o corpo de menor temperatura. Para situações no qual há troca de energia sistema-vizinhança devido à uma diferença de temperatura entre as partes, a fronteira é dita diatérmica, ou seja, que permite a transferência de calor. Fronteiras adiabáticas não permitem o trânsito de energia na forma de calor entre sistema e vizinhança.

A nível molecular, a interpretação da transferência de energia na forma de calor é a transferência da energia do movimento das moléculas (movimento térmico) entre sistema e vizinhança.

A Lei Zero da Termodinâmica estabelece que se um corpo A está em equilíbrio térmico com um corpo B e se B está em equilíbrio térmico com o corpo C, então C também está em equilíbrio térmico com A (Figura 12).

Figura 12 - Lei zero da termodinâmica



Fonte: Silva (2020)

Um processo é dito exotérmico quando há liberação de calor. Em contrapartida, quando há a absorção de calor o processo é denominado endotérmico. Exemplos de processos exotérmico e endotérmico são a combustão e ebulição, respectivamente (Figura 13).

Figura 13 - Processo endotérmico e exotérmico



Fonte: imagem adaptada do repositório público stock.adobe.com. Acessado em: 03 de março de 2024

A energia interna (U) é uma quantidade fundamental na termodinâmica e desempenha um papel crucial no estudo do comportamento dos sistemas físicos. Ela é uma função de estado, aditiva em massa (propriedade extensiva), contínua, diferenciável e refere-se à média temporal das energias cinética e potencial das partículas que compõem o sistema em estudo numa escala microscópica.

O somatório das energias cinética e potencial total das moléculas do sistema em estudo fornecem o valor para a energia interna (U). A energia interna é uma função de estado uma vez que seu valor procede unicamente do estado em que o sistema se encontra, não depende das etapas que o sistema passou para chegar no estado atual.

Empiricamente, sabe-se que a variação da energia interna (ΔU) de um sistema fechado em um processo é modificada pelo trabalho e o calor (q) envolvidos. A unidade de w , q e U no Sistema Internacional é o joule (J), mesma unidade para energia.

A Primeira Lei da Termodinâmica define que para um sistema fechado, no qual há conservação de massa, a variação infinitesimal de U é igual a soma das variações infinitesimais de w e de q conforme a Equação 12. A equação interpreta que toda a variação de energia interna do sistema fechado é consequência das variações de energia na forma de calor e trabalho.

$$\text{Equação 12: } dU = dw + dq$$

A variação de energia interna de um sistema isolado é zero pois nesse tipo de sistema não há trocas de calor, trabalho ou transferência de massa para a vizinhança. A energia interna neste caso é constante.

$$\text{Equação 13: } dq = 0 \text{ e } dw = 0 \rightarrow dU = 0 + 0 \rightarrow dU = 0, \text{ } U \text{ é constante}$$

A variação da energia interna é uma diferencial exata, cujo valor depende, exclusivamente, dos estados inicial e final, independentemente do caminho percorrido para alcançá-los. Portanto, a variação da energia interna (ΔU) é dada pela diferença entre a energia interna final e a energia interna inicial.

$$\text{Equação 14: } \Delta U = U_f - U_i$$

Assume-se valores positivos para calor e trabalho quando a energia é transferida para o sistema. Quando o sistema perde energia, seja na forma de calor ou de trabalho, as variáveis adquirem valores negativos por convenção.

3.5 Processos Irreversíveis com Gás Ideal

Antes de explorar os processos de transformações termodinâmicas, é fundamental entender como calcular as propriedades de trabalho, calor e variação da energia interna para gases ideais. É igualmente importante compreender como essas propriedades são afetadas em processos reversíveis e irreversíveis, bem como as diferenças entre esses dois cenários.

Um processo é dito reversível na termodinâmica quando as mudanças são feitas na forma de modificações infinitesimais em que o sistema passa por uma série de estados de equilíbrio (ATKINS; DE PAULA, 2012). Neste panorama, o sistema se ajusta continuamente em um processo idealizado e com máxima eficiência tendo em vista que não há dissipação de energia e desconsidera-se qualquer tipo de perdas adicionais que pode haver, como o atrito. Em um processo reversível, a energia pode ser totalmente recuperada.

Em contrapartida, um processo irreversível na termodinâmica é aquele que ao chegar ao final do processo não é possível retornar ao estado original visto que ao longo do processo há dissipação de energia através de perdas adicionais. Em razão disso, a energia não pode ser totalmente recuperada.

A energia interna de um sistema (U) resulta das energias associadas à capacidade das moléculas que o compõem de realizar movimentos de translação, rotação e vibração (as variações nos comprimentos e ângulos de ligação). A energia interna de um gás monoatômico é composta exclusivamente pela energia cinética translacional de suas partículas. Esta pode ser calculada a partir da soma das contribuições quadráticas nos eixos x , y e z , conforme a Equação 15. Pelo teorema da equipartição da mecânica clássica, temos que a energia média para cada um dos eixos é de $\frac{1}{2} nkT$. Como são três contribuições quadráticas, a energia cinética média translacional total é $\frac{3}{2} kT$ para um mol de substância (o parâmetro n da fórmula é o número de mols), Equação 16. Quando o gás é composto por moléculas poliatômicas é necessário considerar as contribuições do movimento de rotação e vibração (ATKINS; DE PAULA, 2012).

$$\text{Equação 15: } E_{trans} = \frac{1}{2}mv_x^2 + \frac{1}{2}mv_y^2 + \frac{1}{2}mv_z^2 = \frac{1}{2}nkT + \frac{1}{2}nkT + \frac{1}{2}nkT$$

$$\text{Equação 16: } E_{trans} = \frac{3}{2}nkT \rightarrow U = \frac{3}{2}nkT$$

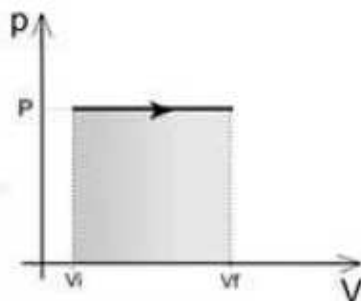
É possível inferir que a energia interna para um gás ideal independe do volume que ele ocupa. A explicação reside no fato de não haver nenhum tipo de interação intermolecular para gases ideais, portanto, as distâncias médias entre as moléculas não têm efeito.

Em processos reversíveis, é possível calcular a variação da energia interna em termos de trabalho e calor envolvidos no processo. O cálculo do trabalho total decorre da resolução da integral apresentada na Equação 11. À pressão externa constante, calcula-se o trabalho total de acordo com a Equação 17.

$$\text{Equação 17: } w = \int_{V_i}^{V_f} -p_{ex} dV = -p \int_{V_i}^{V_f} dV = -p(V_f - V_i) = -p\Delta V$$

Este fenômeno pode ser observado graficamente pela Figura 14, na qual a área abaixo do gráfico pressão versus volume é o valor numérico do resultado da integral.

Figura 14 - Expansão a pressão constante



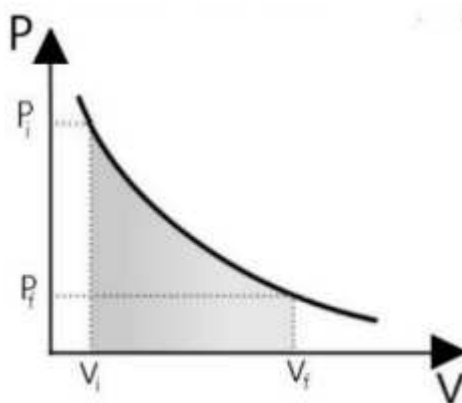
Fonte: Neto (2022)

Considerando um cenário de processo isotérmico reversível, para calcular o trabalho total, substitui-se na Equação 11 o valor da pressão pelo valor obtido para gases ideais, Equação 18.

$$\text{Equação 18: } w = \int_{V_i}^{V_f} -p_{ex} dV = -nRT \int_{V_i}^{V_f} \frac{dV}{V} = -nRT \ln\left(\frac{V_f}{V_i}\right)$$

De forma similar ao processo isobárico, o resultado da integral para achar o valor numérico do trabalho em um processo isotérmico pode ser visualizado através do gráfico de pressão x volume, Figura 15.

Figura 15 - Expansão a temperatura constante



Fonte: Neto (2021)

Em casos de expansão livre, numa situação na qual não há nenhuma força em oposição, o valor para o trabalho é zero. De forma similar, o valor do trabalho também será zero para processos isocóricos, dado que não haverá variação de volume ($dV = 0$)

Para transformações reversíveis de um gás ideal a volume constante, a variação da energia interna do sistema (Equação 19) é dada pela quantidade de energia trocada entre sistema e vizinhança na forma de calor, dado que o trabalho será zero.

$$\text{Equação 19: } dU = dq \rightarrow \Delta U = q_v$$

A Calorimetria é um ramo da físico-química cujo objeto de estudo é a transferência de energia na forma de calor durante processos físicos e químicos. A quantidade de calor envolvida nesses processos é proporcional à variação de temperatura e pode ser representada pela Equação 20. A constante de

proporcionalidade, conhecida como capacidade calorífica (C_v), pode ser determinada experimentalmente sob condições controladas. A capacidade calorífica para um processo a volume constante é dada pela Equação 22.

$$\text{Equação 20: } dq_v = C_v dT$$

$$\text{Equação 21: } dU = C_v dT$$

$$\text{Equação 22: } C_v = \left(\frac{\partial U}{\partial T} \right)_V$$

A variação da energia interna de um gás perfeito monoatômico depende apenas da variação de temperatura (ΔT). Para um mol de gás perfeito monoatômico em um processo isocórico (volume constante), temos que uma capacidade calorífica constante e igual a $3/2nR$ (12,47 J / K.mol).

$$\text{Equação 23: } C_v = \frac{\partial}{\partial T} \left(\frac{3}{2} RT \right) = \frac{3}{2} R$$

$$\text{Equação 24: } \Delta U = \int_{T_i}^{T_f} C_v dT = C_v \int_{T_i}^{T_f} dT = C_v (T_f - T_i) = q_{v,m}$$

$$\text{Equação 25: } q_{v,m} = \frac{3}{2} R \Delta T \rightarrow q_{v,m} \approx 12,47 \Delta T$$

Antes de discutir o calor envolvido para processos isobáricos através da sua capacidade calorífica, faz-se necessário introduzir o conceito de entalpia (H). Entalpia é definida como (Equação 26):

$$\text{Equação 26: } H \equiv U + pV$$

A entalpia é uma função de estado e, conseqüentemente, sua variação depende exclusivamente dos estados inicial e final de entalpia (Equação 27). A variação da entalpia (ΔH) em um sistema pode ser entendida como o calor envolvido em um processo a pressão constante (Equação 28) e sua dedução pode ser constatada no trabalho de Correia e Oliveira (2019).

$$\text{Equação 27: } \Delta H = H_f - H_i$$

$$\text{Equação 28: } \Delta H = q_p$$

Portanto, de forma similar ao processo isovolumétrico, é possível calcular a capacidade calorífica para o processo isobárico (Equação 31).

$$\text{Equação 29: } dH = dq_p$$

$$\text{Equação 30: } dq_{p,m} = C_p dT$$

$$\text{Equação 31: } C_p = C_v = \left(\frac{\partial H}{\partial T} \right)_p$$

Sistemas a pressão constante quando aquecidos normalmente se expandem, portanto, parte da energia fornecida ao sistema na forma de calor é convertida em trabalho sobre a vizinhança. Por este motivo, a variação de temperatura em um processo isobárico será menor comparado ao processo isovolumétrico dada a mesma quantidade de energia na forma de calor. Em outras palavras, a energia necessária para elevar uma unidade de temperatura deve ser maior para processos isobáricos. Há uma relação entre as capacidades caloríficas a pressão constante (C_p) e a volume constante (C_v) para gases ideais, Equações 32 e 33 (ATKINS; DE PAULA, 2012).

$$\text{Equação 32: } C_p - C_v = nR$$

$$\text{Equação 33: } C_p = nR + \frac{3}{2}R = \frac{5}{2}R \quad (\text{gás ideal monoatômico})$$

A energia interna é uma função de pressão, volume e temperatura. Basta definir duas dessas variáveis que a terceira será fixa. Portanto, podemos calcular a variação da energia interna segundo a Equação 34. Para os gases perfeitos, a parcela (b) é a capacidade calorífica a volume constante (C_v) e a parcela (a) é nula visto que a energia interna independe do volume que ele ocupa como já foi previamente explicado.

$$\text{Equação 34: } dU = \left(\frac{\partial U}{\partial V}\right)_T dV + \left(\frac{\partial U}{\partial T}\right)_V dT$$

$$\text{Equação 35: } dU = C_v dT \quad (\text{gás perfeito, } n=1)$$

$$\text{Equação 36: } \Delta U = C_v \Delta T \quad (\text{gás perfeito, } n=1)$$

É possível inferir através da Equação 35 que a variação de energia interna em um processo isotérmico de um gás ideal é igual a zero. Deste modo, toda energia em forma de calor será convertida em trabalho. A Tabela 5 agrupa as informações de como será calculado as variáveis de trabalho, calor e variação de energia interna para gases ideais nos processos termodinâmicos.

Tabela 5 – Cálculo de propriedades termodinâmicas para gás ideais

Variável	Isotérmico	Isobárico	Isovolúmetrico
q	$nRT \ln\left(\frac{V_f}{V_i}\right)$	$nC_p \Delta T$ ou $\Delta U - w$	$nC_v \Delta T$
w	$-nRT \ln\left(\frac{V_f}{V_i}\right)$	$-p\Delta V$	0
ΔU	0	$nC_v \Delta T$	$nC_v \Delta T$

Fonte: elaborado pelo autor (2024)

3.6 Simulações

Com a popularização da *internet* e os avanços nas ferramentas tecnológicas, recorrer a soluções virtuais é uma tendência que ficou ainda mais evidente no cenário de pandemia do COVID-19 (ALNAGRAT *et al.*, 2022). No período pandêmico e pós-pandêmico, o mundo precisou se adaptar e normalizar as soluções tecnológicas que forneciam estratégias remotas em razão da inviabilidade ou da pouca praticidade de realizar uma tarefa presencial. O fluxo de trazer mais interação e otimização de tarefas para o mundo virtual se deu em diversas esferas, desde novas relações entre empregados e trabalhadores com novos regimes de trabalhos do tipo *home office* e

híbrido, entrega de serviços com o desenvolvimento de aplicativos e até mesmo na relação de aprendizado dentro de escolas e universidades. Não há como desprezar a tecnologia como uma valiosa fonte de aprendizado e ferramenta, quando corretamente utilizada pode se tornar um aliado para a ciência (RAUPP *et al.*, 2008).

Simulação é a palavra chave para o desenvolvimento de modelos que otimizam e norteiam tomadas de decisões, pode ajudar no entendimento de sistemas complexos, consegue orientar quanto a avaliação de riscos, custos, barreiras de implementação e impacto no desempenho operacional (MORAES *et al.*, 2022). Dentro do meio científico, já há iniciativas gratuitas na internet que permitem realizar simulações dentro da área da Ciências, Matemática, Química e Física.

“A biologia computacional está mudando a forma como os biólogos pensam. Similarmente, a teoria de jogos computacional está mudando a forma como os economistas pensam; nano computação, a forma como químicos pensam; e computação quântica, a forma como os físicos pensam.” (Wing, 2006)

A simulação também possui um cunho pedagógico, pois é possível elucidar fenômenos de difícil visualização prática, seja por falta de instrumentos capazes de observá-los, limitações de técnicas para preparação do ambiente experimental adequado ou por questões financeiras. Além disso, junto com toda a parte de visualização do experimento, em muitos casos há a possibilidade de programar um algoritmo para fornecer os cálculos necessários para os cenários de simulação.

O presente trabalho escolheu três simuladores virtuais para auxiliar na comparação com o protótipo desenvolvido. Estes que podem ser gratuitamente acessados na internet até a data de publicação do estudo, os simuladores são: PhET, *LearnChemE* e *Chemistry 301*.

O *Physics Educacional Technology* (PhET) já está há mais de 20 anos em atuação, criado em 2002 como um projeto da Universidade do Colorado, conta atualmente com simulações nas áreas de Ciências, Matemática, Química, Física e Biologia. O fundador da iniciativa, Carl Wieman, é ganhador do Prêmio Nobel e possui atualmente mais de 150 tipos de simulações no seu repertório. O simulador

LearnChemE foi feito para apresentar recursos educacionais para estudantes, monitores e professores da área da engenharia química. Além de simulações, é possível encontrar módulos de estudos, vídeos explicativos e recursos que se propõem a auxiliar o aprendizado do usuário. O material é produzido pelo Departamento de Engenharia Química e Biológica da Universidade do Colorado em Boulder e possui financiamento da *National Science Foundation* e de empresas como Chevron e Shell. O *site* referente a *Chemistry 301* foi uma iniciativa para estudantes de Química da Universidade do Texas em Austin. O intuito era incluir materiais de estudos, exercícios e recursos educativos para os alunos do curso de Química 301, referência ao nome dado ao *site*. Este *site* não possui atualizações desde 2014.

4. METODOLOGIA

Todo o ambiente do protótipo de simulação foi desenvolvido utilizando tecnologias *web* modernas, incluindo HTML5, CSS3 e *TypeScript*. Essas tecnologias foram escolhidas por sua capacidade de criar interfaces de usuário interativas e responsivas, essenciais para a simulação. Além disso, elas oferecem uma curva de aprendizado acessível, permitindo a implementação de lógicas e serviços de alta qualidade sem exigir conhecimentos avançados de profissionais de tecnologia para obter resultados satisfatórios.

Para a criação e desenvolvimento do projeto, foi utilizado o *Visual Studio Code* (VS Code), um Ambiente de Desenvolvimento Integrado (IDE) desenvolvido pela Microsoft. O VS Code é amplamente reconhecido e utilizado no setor de tecnologia devido à sua fácil usabilidade, suporte multiplataforma com disponibilidade para Windows, Linux e macOS e sua versatilidade para programar em diversas linguagens. O código fonte do algoritmo desenvolvido encontra-se disponível no repositório *GitHub* mas a interface pode ser acessada *on-line*; o *link* está disponível na seção de referências.

Além do desenvolvimento do protótipo de simulação, há os testes manuais dos processos termodinâmicos reversíveis. O usuário, ao selecionar o tipo de processo reversível que deseja observar, insere os valores para as variáveis de pressão, volume e temperatura nos estágios inicial e final. Ressalta-se que basta definir duas variáveis para que a terceira seja automaticamente calculada. O intuito dos testes é a certificação de que os valores calculados pelo programa sejam compatíveis com os valores previstos pela teoria. Serão testados três cenários diferentes para cada um dos tipos de processo disponível na simulação.

Após a averiguação de que o protótipo consegue simular processos para gases ideais e realizar cálculos termodinâmicos de forma coerente, há a etapa de comparação entre simuladores virtuais gratuitos disponíveis na *internet* que possuem propostas similares ao projeto de estudo. Os simuladores escolhidos para análise comparativa foram o PhET, *LearnChemE* e *Chemistry 301*. Os *links* para cada uma das iniciativas encontram-se na Tabela 6. Os requisitos avaliados são: a disponibilidade no idioma

português, os parâmetros que são calculados em cada simulador, a presença de elementos visuais como gráficos e animações, a existência de material para explicação teórica dos fenômenos e a alternativa de contribuição de outros desenvolvedores dentro da comunidade científica.

Tabela 6 - Simuladores *on-line* para análise comparativa com o protótipo

Phet	https://phet.colorado.edu/sims/html/gas-properties/latest/gas-properties_en.html
LeanChemE	https://learncheme.com/simulations/thermodynamics/thermo-1/ideal-gas-law/
Chemistry 301	https://ch301.cm.utexas.edu/simulations/js/idealgaslaw/

Fonte: elaborado pelo autor (2024)

Toda a estrutura principal dos cálculos desenvolvidos, incluindo detalhes de implementação e organização, está documentada no Anexo I. Em suma, a combinação das tecnologias HTML5, CSS3, *TypeScript* e o uso do *Visual Studio Code* como IDE fornece um protótipo de simulação robusto e eficiente.

4.1 Tela de Login

A tela de *login* é a primeira tela de visualização do protótipo desenvolvido, funcionando como a porta de entrada para o sistema. Sua principal finalidade é fornecer uma visão geral das informações relacionadas ao *software*, além de apresentar qualquer tipo de material de referência ou documentação importante para o projeto. Esta tela serve como um ponto central onde os usuários podem encontrar detalhes essenciais sobre o funcionamento do sistema, atualizações e *links* úteis.

Embora exista uma área dedicada ao armazenamento de dados de *login* e senha, é importante destacar que, neste estágio do desenvolvimento, essas informações não serão validadas. Ou seja, a inserção de credenciais é apenas

simbólica e não impede o acesso ao sistema. A inclusão dessa funcionalidade tem como objetivo estruturar o projeto para caso haja um interesse em implementar serviços específicos e restritos para apenas grupos específicos de usuários, o protótipo já possui mecanismos de autenticação que permitam restringir o acesso a determinadas funcionalidades do *software*.

É importante salientar que não há nenhuma coleta e/ou armazenamento de dados do usuário pelo protótipo. Há a opção visual de entrar sem inserir as credenciais de usuário e senha.

4.2 Painel de Opções

Posteriormente, o usuário é direcionado para o painel de opções do projeto. Nesta tela, ele encontra várias funcionalidades que permitem a navegação eficiente dentro do sistema. Primeiramente, há a alternativa de retornar para a tela de *login*, caso o usuário deseje encerrar a sessão atual.

Além disso, o painel de opções oferece a escolha entre diversas simulações disponíveis. Cada simulação está listada em um espaço dedicado, onde são exibidos tanto o nome da simulação quanto um breve resumo do conteúdo que será apresentado. Essa síntese fornece uma visão geral dos principais temas e objetivos da simulação, permitindo que o usuário faça a escolha adequada sobre qual simulação explorar.

4.3 Tela de Simulação

A tela de simulação é o núcleo do protótipo, onde ocorre a interação principal e os usuários podem experimentar a simulação para o qual o projeto foi desenvolvido. Nesta tela, será possível demonstrar processos isotérmicos, isobáricos e isovolumétricos reversíveis para gases ideais monoatômicos para sistemas termodinâmicos fechados. A tela de simulação deve ser particionada em quatro regiões de interesse.

Na primeira partição, o usuário deve primeiro informar qual o tipo de processo

termodinâmico que deseja simular dentre as opções de isotérmico, isobárico e isovolumétrico. Em seguida, na segunda parte, coloca-se os valores para pressão, volume e temperatura nas etapas iniciais e finais, atentando-se que basta definir duas variáveis para que a terceira tenha o seu valor determinado. A terceira seção será o resultado dos cálculos fornecidos pelo algoritmo para calor (q), trabalho (w) e variação da energia interna (ΔU). Considera-se que a quantidade em mol do gás perfeito monoatômico durante toda a simulação é constante e igual a um. As quantidades máxima, mínima, unidade de medida e o incremento para cada parâmetro podem ser observados na Tabela 7. Para os parâmetros que serão calculados pelo algoritmo, não há valores mínimos, máximos ou de incremento e para as constantes da simulação apenas é preenchida a coluna de valor mínimo.

Tabela 7 - Parâmetros da simulação

Variável	Sigla	Unidade	Valor mínimo	Valor máximo	Incremento
Pressão	p	atm	1	5	2
Volume	V	L	1	50	1
Temperatura	T	°C	0	300	10
Quantidade de matéria	n	mol	1	-	-
Constante dos gases	R	atm.L.K ⁻¹ .mol ⁻¹	0,08206	-	-
Capacidade calorífica molar a volume constante	Cv	J.K ⁻¹ .mol ⁻¹	12,47	-	-
Variação da energia interna	ΔU	J	-	-	-
Trabalho	w	J	-	-	-
Calor	q	J	-	-	-

Fonte: elaborado pelo autor (2024)

A quarta seção apresenta a parte gráfica da simulação na qual é possível visualizar o processo termodinâmico através dos gráficos pressão *versus* volume, pressão *versus* temperatura ou volume *versus* temperatura.

Após a construção do algoritmo do projeto, há a necessidade de testá-lo e averiguar a coerência entre os resultados fornecidos pelo protótipo e os resultados previstos pela parte teórica. Para esta verificação serão testados três cenários para cada tipo de processo disponível na simulação. A fase de testes está representada pela Tabela 8. Os cenários que variam de 1 até 3 representam um processo isotérmico, os que variam de 4 até o 6 representam um processo isovolumétrico e os que variam de 7 até 9 são processos isobáricos.

Tabela 8 - Cenários de testes do protótipo

	p_i (atm)	V_i (L)	T_i (°C)	p_f (atm)	V_f (L)	T_f (°C)	$\Delta U_{\text{teórico}}$ (J)	$w_{\text{teórico}}$ (J)	$q_{\text{teórico}}$ (J)
1	1	22,41	0	3	7,472	0	0	2495	-2495
2	3	11,57	150	5	6,945	150	0	1797	-1797
3	5	9,407	300	3	15,68	300	0	-2434	2434
4	22,41	1	0	24,47	1	25	311.8	0	311.8
5	1,389	25	150	1,881	25	300	1871	0	1871
6	0,6124	50	100	0,5304	50	50	-623.5	0	-623.5
7	1	25	31,51	1	30	92,44	759.8	-506,6	1266
8	3	8	19,32	3	10	92,44	911.8	-608,0	1520
9	5	7	153,4	5	5	31,51	-1520	1013	-2533

Fonte: elaborado pelo autor (2024)

Para os cenários de 1 a 3, espera-se que os valores de volumes sejam automaticamente calculados ao colocar as pressões e as temperaturas. Os testes de 4 até o 6 recebem os valores de volume e de temperatura, para o algoritmo calcular o parâmetro de pressão. Enquanto que os cenários de 7 até 9 recebem as informações de pressão e de volume, e o código gera os valores de temperatura. Os cálculos apresentados na tabela foram feitos diretamente no pacote Excel do Windows e considerou-se para fins de conversão de unidades 1 atm.L igual a 101,325 J.

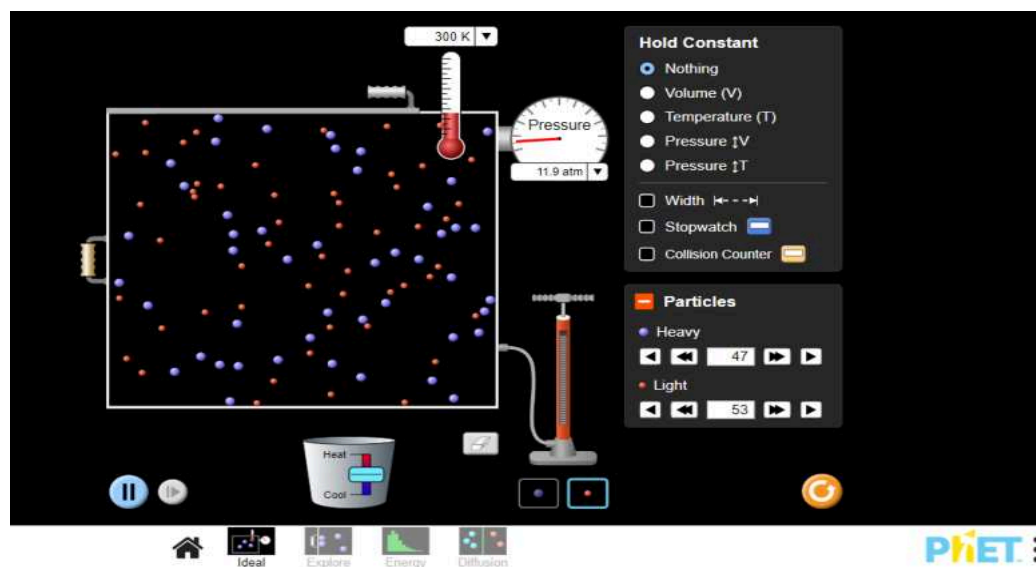
4.4 Comparação entre modelos

Após a verificação se o protótipo está calculando de forma correta os parâmetros da simulação, há a comparação entre o protótipo desenvolvido e outros simuladores gratuitos disponíveis na rede. Três iniciativas foram escolhidas e seus respectivos *links* encontram-se na Tabela 6. A análise comparativa é feita de forma qualitativa na qual verifica-se a possibilidade de consumir um conteúdo de físico-química em português, presença de elementos que demonstram o processo de forma gráfica, possibilidade de visualizar, simultaneamente, informações dos estágios final e inicial de uma transformação termodinâmica, ilustrações interativas, alternativa de alterar parâmetros, cálculo de variáveis do processo, presença de explicação teórica dos fenômenos observados e possibilidade de aprimoramento do código através da inserção de novos algoritmos por terceiros.

Ilustrações interativas são recursos de grande importância para a compreensão e elucidação de processos termodinâmicos. Neste contexto, trata-se de animações projetadas para fornecer uma representação visual do comportamento das moléculas. No caso das ilustrações interativas dos gases ideais, espera-se que seja exibido um recipiente com moléculas em movimento aleatório. À medida que a temperatura do sistema aumenta, os elementos que representam as moléculas devem apresentar movimentos mais intensos e rápidos, simbolizando o aumento da energia cinética das partículas. Esse comportamento reflete a teoria cinética dos gases, segundo a qual a energia cinética média das moléculas é proporcional à temperatura. Além disso, uma animação interativa deve simular a variação do volume do sistema. A mudança de temperatura pode ser perceptível por meio das expansões ou contrações do volume do recipiente onde o gás está contido. A representação visual torna os conceitos de termodinâmica mais acessíveis, permitindo que os usuários visualizem de forma mais intuitiva as consequências das alterações no sistema. O protótipo atualmente não conta com ilustrações interativas na simulação.

Cada uma das iniciativas externas utilizadas para fins de avaliação comparativa do estudo possui suas interfaces ilustradas pelas Figura 16, Figura 17 e Figura 18 em que representam respectivamente os simuladores PhET, LearnChemE e Chemistry 301.

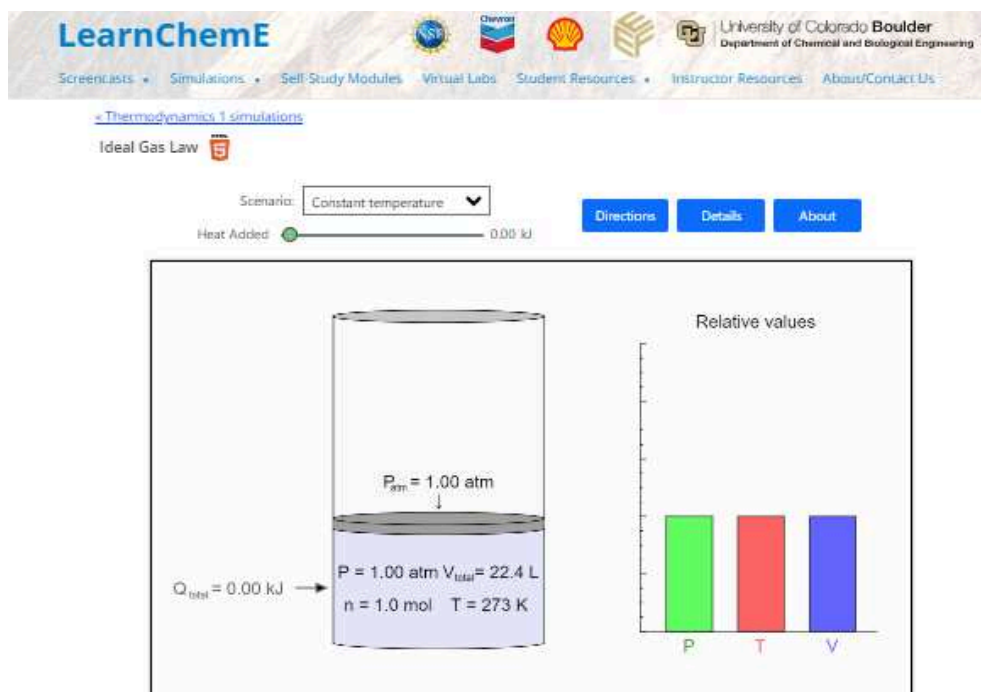
Figura 16 - Simulador PhET



Disponível em: <https://phet.colorado.edu/sims/html/gas-properties/latest/gas-properties_en.html>.

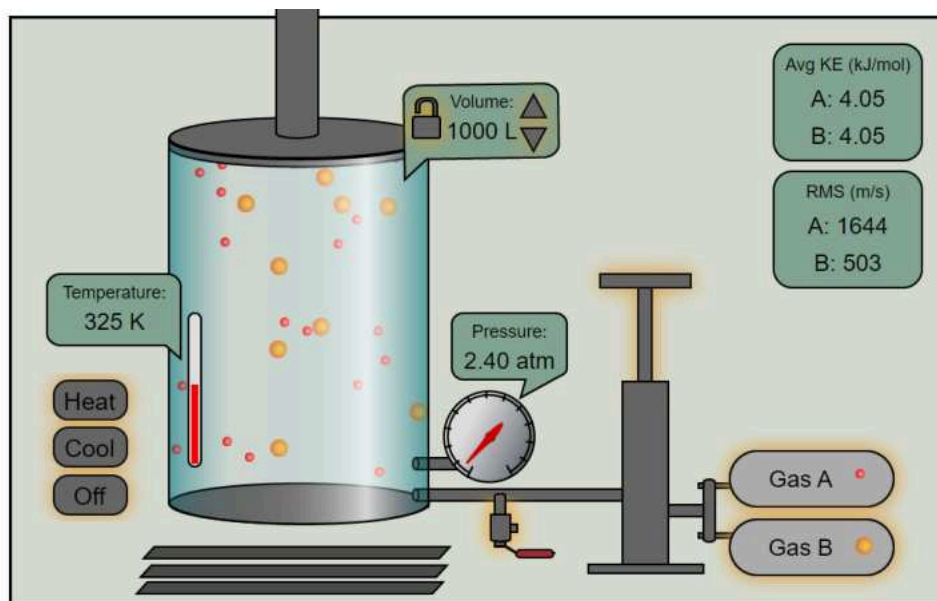
Acesso em: 16 de março de 2024.

Figura 17 - Simulador LearnChemE



Disponível em: <<https://learncheme.com/simulations/thermodynamics/thermo-1/ideal-gas-law/>>. Acesso em: 16 de março de 2024.

Figura 18 - Simulador Chemistry 301



Disponível em: < <https://ch301.cm.utexas.edu/simulations/js/idealgaslaw/>>. Acesso em: 16 de março de 2024.

5. RESULTADOS E DISCUSSÃO

Para início da análise do protótipo desenvolvido, primeiro é necessário verificar se os requisitos descritos na metodologia para a construção visual do projeto e suas funcionalidades foram devidamente atendidos. O trabalho encontra-se disponível em SIMULADOR DE QUÍMICA, através do link: <https://simulador-quimica-react.vercel.app/>. O acesso foi realizado em 7 de novembro de 2024. Não há nenhum tipo de coleta ou armazenamento de dados do usuário durante o uso do simulador.

Na tela de *login* (Figura 19) é possível constatar a presença de informações sobre as pessoas envolvidas na construção da iniciativa, as fotos e seus respectivos vínculos com a Universidade Federal do Rio de Janeiro. Na descrição também há a indicação de quais as ferramentas tecnológicas empregadas para criar o código. É importante salientar que apesar de haver uma área para realizar *login* com usuário e senha, não há nenhum tipo de validação de credenciais. Essa parte do código foi projetada com a possibilidade futura de adicionar novas funcionalidades que, eventualmente, poderiam ser restritas a um grupo específico de usuários. Portanto, a estrutura para autenticação foi incluída antecipadamente para facilitar possíveis atualizações. No rodapé da página de *login* há informações de contato e o *link* para o *GitHub* (local onde se encontra o projeto na *internet*). Para o painel de opções (Figura 20), há as funcionalidades de retornar para a tela de *login* ou ir para uma das simulações listadas no corpo principal da página. Na área de cada simulação, há um título e uma breve descrição do que pretende-se observar dentro dos ambientes.

A tela de simulação (Figura 21) é a cerne deste trabalho. No protótipo há quatro regiões importantes no corpo principal da simulação de físico-química, estes são: a região em que se escolhe o tipo de processo irreversível para o gás ideal, o armazenamento dos valores de pressão, volume e temperatura nas etapas inicial e final do processo, os parâmetros de variação de energia interna, calor e trabalho calculados pelo algoritmo e a região dos gráficos de pressão-volume (PV), pressão-temperatura (PT) e volume-temperatura (VT).

Figura 19 - Tela de login

**Protótipo De Ferramenta Virtual
Para Auxiliar Estudos E Simulações
Em Físico-Química**

Venha conferir e contribuir com o nosso projeto

Login

Senha

Entrar anonimamente


ENTRAR

Juan Omar Machuca Herrera
Professor Associado da
Universidade Federal do Rio
de Janeiro (IQ-UFRJ)

Raiany da Silva Stein
Bacharelado em Química na
Universidade Federal do Rio
de Janeiro (IQ-UFRJ)

Roberto Salgado Amado
Professor Associado da
Universidade Federal do Rio
de Janeiro (IQ-UFRJ)

Através de uma equipe composta por pesquisadores, professores e alunos, esta iniciativa busca desenvolver uma solução tecnológica integralmente pela Universidade Federal do Rio de Janeiro (UFRJ) para auxiliar estudos e simulações em química. Inicialmente focada no estudo dos gases perfeitos, que é um conteúdo fundamental nas disciplinas de físico-química ao longo da trajetória acadêmica universitária. A ideia surgiu como uma proposta completamente nacional, desenvolvida internamente na universidade pública, com o intuito de integrar conhecimentos em química e utilizar as ferramentas disponíveis no mercado de tecnologia. Esta ferramenta é totalmente gratuita e colaborativa, o que significa que novos conteúdos podem ser adicionados com base nas contribuições da comunidade científica.

 Email: rstein.dev@gmail.com Repositório GitHub: [GitHub](#)

Fonte: elaborado pelo autor (2024)

Figura 20 - Painel de opções



Fonte: elaborado pelo autor (2024)

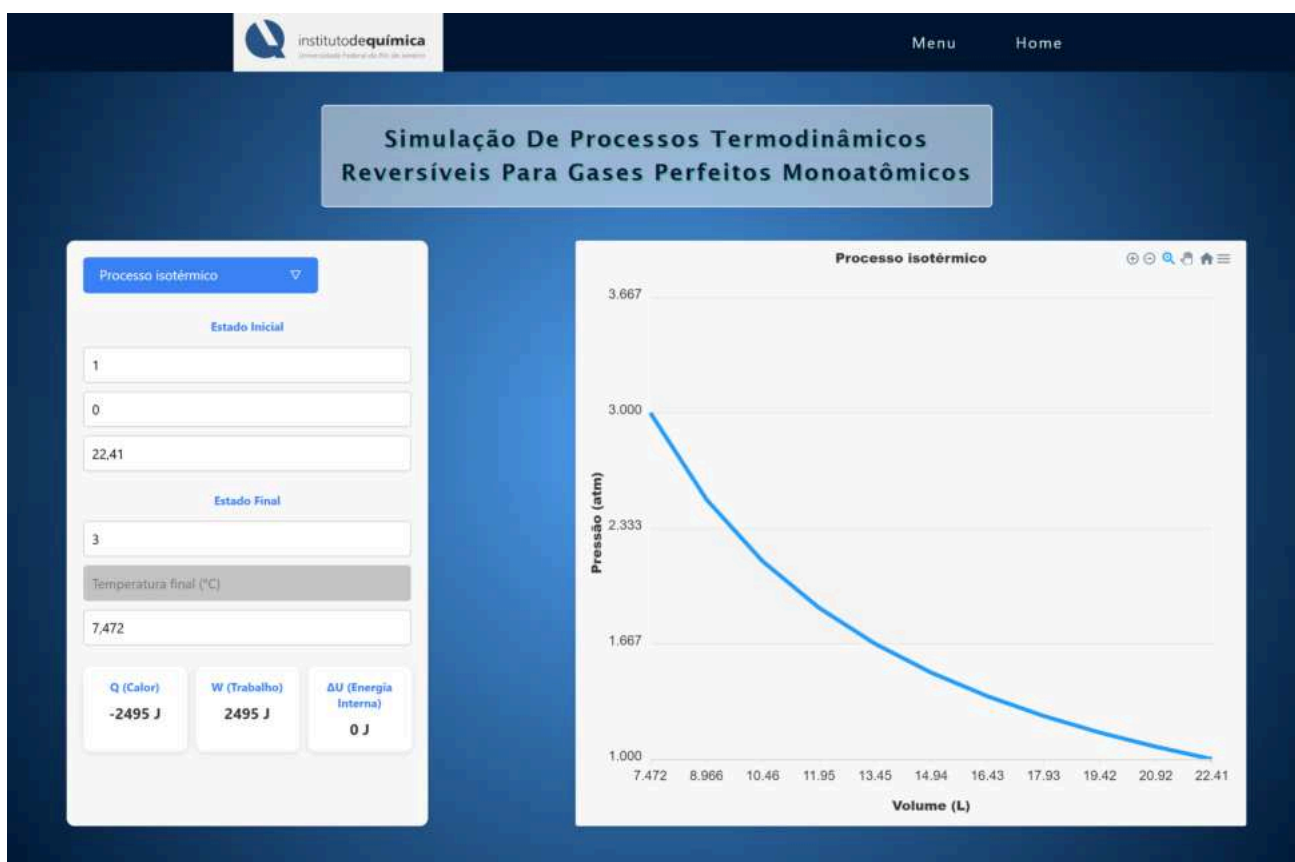
Ao selecionar o tipo de processo em que se deseja realizar o experimento, isobárico, isovolumétrico ou isotérmico, o algoritmo prontamente se prepara para receber e calcular as variáveis (Figura 21). Considera-se que durante todo o processo a quantidade de partículas no sistema é invariável e igual a 1 mol. É amplamente conhecido que basta duas variáveis para determinar a terceira e, por este motivo, apenas é necessário colocar 2 variáveis para o cálculo ser feito automaticamente.

A cada inserção de um novo valor, o algoritmo armazena automaticamente o dado. Caso já tenha as três variáveis definidas na tela, para modificar o estado do sistema, seja na etapa final ou inicial, precisa sobrescrever a variável que se deseja redefinir para que seja recalculado as variáveis restantes. Para visualização dos gráficos, é necessário que o tipo do processo esteja definido e todas as suas variáveis estejam calculadas. Para processos isotérmicos, a temperatura final fica desabilitada visto que esta terá o mesmo valor que a temperatura inicial, situação semelhante acontece para o volume final e a pressão final para processos isovolumétricos e processos isobáricos, respectivamente. As temperaturas inseridas nos respectivos

campos são registradas na escala Celsius; no entanto, o algoritmo realiza uma conversão para a escala Kelvin, a fim de efetuar os cálculos necessários.

Com processo escolhido e as variáveis armazenadas, os parâmetros ΔU , q e w são imediatamente calculados. Por fim, há a parte dos gráficos em que a depender do processo é possível visualizar as curvas isotérmicas, isobáricas ou isovolumétricas. No protótipo existe a possibilidade de salvar os gráficos nos formatos SVG, PNG e CSV. O recurso é de valiosa contribuição para o projeto, pois, é uma funcionalidade que pode corroborar para elaboração de relatórios para os usuários do código.

Figura 21 - Tela de simulação



Fonte: elaborado pelo autor (2024)

Após a fase de implementação do código, entra-se na fase de testes. Foram elaborados três cenários para cada tipo de processo estudado. Os resultados obtidos podem ser visualizados na tabela 9.

Tabela 9 - Resultados dos cenários de testes do protótipo

	p_i (atm)	V_i (L)	T_i (°C)	p_f (atm)	V_f (L)	T_f (°C)	$\Delta U_{\text{calculado}}$ (J)	$w_{\text{calculado}}$ (J)	$q_{\text{calculado}}$ (J)
1	1	22,41	0	3	7,472	0	0	2495	-2495
2	3	11,57	150	5	6,945	150	0	1796	-1796
3	5	9,407	300	3	15,68	300	0	-2435	2435
4	22,41	1	0	24,47	1	25	311.8	0	311.8
5	1,389	25	150	1,881	25	300	1871	0	1871
6	0,6124	50	100	0,5304	50	50	-623.5	0	-623.5
7	1	25	31,51	1	30	92,44	759.8	-506.8	1267
8	3	8	19,32	3	10	92,44	911.8	-608.1	1520
9	5	7	153,4	5	5	31,51	-1520	1014	-2534

Fonte: elaborado pelo autor (2024)

Tabela 10 - Comparação entre os resultados teóricos e calculados

	$w_{\text{teórico}}$ (J)	$q_{\text{teórico}}$ (J)	$w_{\text{calculado}}$ (J)	$q_{\text{calculado}}$ (J)
1	2495	-2495	2495	-2495
2	1797	-1797	1796	-1796
3	-2434	2434	-2435	2435
4	0	311.8	0	311.8
5	0	1871	0	1871
6	0	-623.5	0	-623.5
7	-506,6	1266	-506.8	1267
8	-608,0	1520	-608.1	1520
9	1013	-2533	1014	-2534

Fonte: elaborado pelo autor (2024)

A partir desses resultados, entende-se que a diferença entre os valores calculados pelo algoritmo e os valores teóricos que constam na metodologia tiveram divergência de valores apenas no último algoritmo para os parâmetros w e q

assinalados em vermelho na Tabela 10. Isto significa que o protótipo pode ser uma fonte confiável para a simulação proposta no trabalho.

A última etapa do projeto consiste em realizar uma análise comparativa qualitativa entre alguns simuladores com temática semelhante. Os simuladores escolhidos foram: PhET, *LearnChemE* e *Chemistry 301* (Tabela 10).

Os únicos tópicos que o protótipo não conseguiu satisfazer foram os de ilustrações interativas e o de material teórico. Em ambos os casos não foi possível implementá-los no intuito de não trazer mais complexidade ao código e também para não haver poluição visual vista a tamanha quantidade de itens já existentes na página de simulação.

Tabela 11 - Análise comparativa com outros simuladores

	Protótipo	PhET	LearnChemE	Chemistry 301
Disponibilidade em português	Sim	Sim	Não	Não
Visualização simultânea das etapas inicial e final	Sim	Não	Não	Não
Possibilidade de escolha de pressão, volume e temperatura	Sim, colocando os valores numéricos	Sim, com elementos visuais (exceto alterar pressão)	Não	Sim
Cálculo de ΔU, q e w	Sim	Não	Apenas cálculo para calor (q)	Não
Ilustrações interativas	Não	Sim	Sim	Sim
Gráficos	Sim	Não	Não	Sim, apenas das quantidades de P,T,V.
Material teórico	Não	Sim	Sim	Sim
Disponibilidade do código fonte	Sim	Sim	Sim	Não

Fonte: elaborado pelo autor (2024)

Para garantir a disponibilidade de conteúdos adicionais que possam auxiliar os usuários, é fundamental estabelecer uma área específica para o armazenamento

desses materiais, além de desenvolver um *design* estruturado e uma interface visual que favoreça a interação. Da mesma forma, a ilustração interativa deve representar com precisão o estado atual do sistema em análise, acompanhando as variações de volume do sistema em estudo. É importante que haja uma relação clara entre a velocidade das partículas e a temperatura: quanto maior a temperatura, maior será a energia cinética das partículas, resultando em uma velocidade mais elevada. Esses aspectos podem servir como base para futuras melhorias e implementações.

Observa-se também que os simuladores PhET e *LearnChemE* são os únicos que permitem visualizar um sistema termodinâmico com mais de um tipo de partícula, configurando uma mistura de gases.

Uma possível melhoria futura seria a implementação de uma funcionalidade que permita zerar os valores das variáveis sem precisar recarregar a página ou alterar o tipo de processo. Isso proporciona uma experiência mais fluida e conveniente para o usuário, facilitando o *reset* dos dados e a realização de novos cálculos.

Um ponto a ser destacado na análise que dentre as comparações, o protótipo foi o único que cria gráficos que possibilitam visualizar curvas isotermas, isóbaras e isovolumétricas, que permitiu a visualização dos estágios inicial e final simultaneamente através das variáveis que determinam o estado termodinâmico e o que calcula os parâmetros ΔU , q e w do processo. Tal fato provoca uma expectativa de que a simulação desenvolvida possa gerar uma valiosa contribuição para o meio científico.

Por fim, é possível ilustrar através da Figura 22 o percurso lógico utilizado pelo algoritmo para arquitetar o trabalho e apresentação dos resultados calculados.

Figura 22 – Processo lógico do protótipo



Fonte: elaborado pelo autor (2024)

6. CONSIDERAÇÕES FINAIS

O objetivo deste trabalho foi desenvolver um protótipo que consiga realizar os cálculos dos parâmetros de pressão, volume, temperatura nos estágios inicial e final utilizando a equação dos gases ideais, prever corretamente a variação de energia interna, calor e trabalho para gases monoatômicos em processos reversíveis isotérmicos, isovolumétricos e isobáricos.

Com base nos testes realizados para a simulação e descritos na metodologia, constatou-se que o protótipo desenvolvido conseguiu realizar os cálculos satisfatoriamente. A divergência de valores entre o teórico e o calculado pelo algoritmo no cenário de testes apresentou diferença apenas no último algarismo significativo, ou seja, no algarismo duvidoso.

Com relação à análise comparativa entre o protótipo desenvolvido e as ferramentas *online* gratuitas que simulam conteúdos semelhantes, há pontos interessantes que foram avaliados pelo estudo e que podem servir como sugestões futuras. Observou-se que não há a presença de material auxiliar e ilustrações interativas na ferramenta desenvolvida. O conteúdo didático corrobora para a explicação e melhor compreensão dos fenômenos termodinâmicos enquanto que as ilustrações representam visualmente o estado do sistema para o usuário. A explicação para tais ausências foi atribuída ao fato de que essas adições trariam mais complexidade ao código e também seria necessário uma nova organização do *design* da tela para evitar poluição visual, visto que a página de simulação já possui muitos elementos inseridos. Além disso, a simulação não prevê a inserção de outros tipos de átomos, e a quantidade é fixa e igual a 1 mol.

Por outro lado, analisou-se os aspectos positivos e de destaque na análise comparativa. O primeiro ponto consiste que todo o projeto possui como idioma nativo o português, fator de maior usabilidade para usuários brasileiros. Há uma facilidade de encontrar o código fonte do projeto através do *link* do *GitHub*, disponível na página inicial, que direciona para o repositório. O usuário consegue utilizar prontamente o protótipo independente do nível de conhecimento nas ferramentas de desenvolvimento do algoritmo através do *link* no qual o projeto está disponível na *internet*. Além disso, a

ferramenta possibilita visualizar todo o processo da transformação reversível do gás perfeito com os parâmetros (pressão, volume e temperatura) iniciais e finais calculados, acrescida da informação da variação da energia interna, calor e trabalho envolvidos. Há a exposição completa do cenário simulado, não apenas da etapa final.

As informações obtidas podem ser exploradas graficamente através dos dados de pressão-volume (PV), pressão-temperatura (PT) ou volume-temperatura (VT). No protótipo há a funcionalidade de exportá-los nos formatos de SVG, PNG e CSV. A capacidade do sistema em criar e baixar gráficos em diferentes formatos pode ser uma opção que auxilia na elaboração de relatórios pelos usuários.

Dentre os simuladores analisados, apenas o protótipo do trabalho foi capaz de fazer tanto as previsões de todos os parâmetros quanto o desenvolvimento de gráficos para visualizar isotermas, isóbaras e isovolumétricas e a possibilidade de exportação dos resultados gráficos.

Portanto, o projeto demonstrou sua relevância e potencial ao abordar a previsão de propriedades termodinâmicas em processos reversíveis. Com base nas análises e resultados obtidos, ficou claro que este protótipo tem a capacidade de expandir suas funcionalidades, oferecendo uma plataforma flexível e adaptável para futuras inovações. Além disso, o projeto possui o potencial de competir com outras iniciativas de ponta, incluindo aquelas desenvolvidas por instituições internacionais que são referências em simulações científicas. A possibilidade de integrar novos módulos e algoritmos, assim como de melhorar a eficiência das simulações, destaca ainda mais a importância e a promessa deste trabalho.

7. REFERÊNCIAS BIBLIOGRÁFICAS

ACHUTHAN, K.; FRANCIS, S. P.; DIWAKAR, S. Augmented reflective learning and knowledge retention perceived among students in classrooms involving virtual laboratories. *Education and Information Technologies*, v. 22, n. 6, p. 2825–2855, 2017.

ACHUTHAN, K.; KOLIL, V. K.; DIWAKAR, S. Using virtual laboratories in chemistry classrooms as interactive tools towards modifying alternate conceptions in molecular symmetry. *Education and Information Technologies*, v. 23, n. 6, p. 2499–2515, 2018.

AHMED ALNAGRAT, A. J.; ISMAIL, R.; SYED IDRUS, S. Z. The Significant and Challenges of Extended Reality Technologies in Learning and Training during Covid-19 Pandemic. *Journal of Human Centered Technology*, v. 1, n. 2, p. 44–55, 2022. Disponível em: <https://doi.org/10.11113/humentech.v1n2.21>.

AIELLO-NICOSIA, M. L.; SPERANDEO-MINEO, R. M. Computer simulation of a two-dimensional ideal gas: a simple molecular dynamics method for teaching purposes. *European Journal of Physics*, v. 6, n. 3, p. 148–153, 1985.

ATKINS, P.; DE PAULA, J. *Físico-química*. Volume 1. Tradução de Rodrigo de Almeida Ferreira et al. 10. ed. Rio de Janeiro: LTC, 2012.

BARRIE, P. J. JavaScript Programs To Calculate Thermodynamic Properties Using Cubic Equations of State. *Journal of Chemical Education*, v. 82, n. 6, p. 958, 2005.

BRASIL. Ministério da Educação. Base Nacional Comum Curricular. Brasília, 2017. Disponível em: <http://basenacionalcomum.mec.gov.br/>. Acesso em: 3 nov. 2024.

BEN OUAHI, M.; AIT HOU, M.; HASSOUNI, T.; AL IBRAHIMI, E. M. Opinions of Moroccan teachers towards the use of PhET simulations in teaching and learning physics – chemistry. In: 2020 6th IEEE Congress on Information Science and

Technology (CiSt), 2020.

BRINSON, J. R. Learning outcome achievement in non-traditional (virtual and remote) versus traditional (hands-on) laboratories: A review of the empirical research. *Computers & Education*, v. 87, p. 218–237, 2015.

CANEPA, P.; HANSON, R. M.; UGLIENGO, P.; ALFREDSSON, M. J-ICE: a new Jmol interface for handling and visualizing crystallographic and electronic properties. *Journal of Applied Crystallography*, v. 44, n. 1, p. 225–229, 2010.

CHAO, J.; CHIU, J. L.; DEJAEGHER, C. J.; PAN, E. A. Sensor-augmented virtual labs: Using physical interactions with science simulations to promote understanding of gas behavior. *Journal of Science Education and Technology*, v. 25, n. 1, p. 16–33, 2016.

CHEMISTRY 301. Disponível em:
<https://ch301.cm.utexas.edu/simulations/js/idealgaslaw/>. Acesso em: 16 de março de 2024.

CHEN, S. The view of scientific inquiry conveyed by simulation-based virtual laboratories. *Computers & Education*, v. 55, n. 3, p. 1123–1130, 2010.

CORREIA, J. J.; OLIVEIRA, W. C. A definição de 'entalpia' em livros didáticos. *Revista Binacional Brasil-Argentina: Diálogo Entre As Ciências*, v. 8, n. 1, p. 327–353, 2019. Disponível em: <https://doi.org/10.22481/rbba.v8i1.4912>.

EL KHARKI, K.; BERRADA, K.; BURGOS, D. Design and Implementation of a Virtual Laboratory for Physics Subjects in Moroccan Universities. *Sustainability*, v. 13, p. 3711, 2021.

GAS PROPERTIES - PhET. Disponível em:
https://phet.colorado.edu/sims/html/gas-properties/latest/gas-properties_en.html. Acesso

em: 16 de março de 2024.

HALLIDAY, D.; RESNICK, R.; WALKER, J. Fundamentos de Física. Volumes 1 e 2. 8ª ed. Rio de Janeiro: LTC, 2009.

IDEAL GAS LAW - LearnChemE. Disponível em: <https://learncheme.com/simulations/thermodynamics/thermo-1/ideal-gas-law/>. Acesso em: 16 de março de 2024.

LIMA, J. A.; CHAGAS, J. F. B.; COSTA, M. S. S. P. Simuladores virtuais no ensino de ciências: elaboração de uma cartilha como ferramenta para a educação básica. In: CONGRESSO NACIONAL DE PESQUISADORES EM EDUCAÇÃO E CIÊNCIAS, 7., 2022.

MOORE, E. B.; CHAMBERLAIN, J. M.; PARSON, R.; PERKINS, K. K. PhET Interactive Simulations: Transformative Tools for Teaching Chemistry. *Journal of Chemical Education*, v. 91, n. 8, p. 1191–1197, 2014.

MORAES, E. et al. Integration of Industry 4.0 technologies with Education 4.0: advantages for improvements in learning. *Interactive Technology and Smart Education*, v. 20, 2022. Disponível em: <https://doi.org/10.1108/ITSE-11-2021-0201>.

NETO, B. P. S. Em defesa do modelo invertido de aprendizagem: a sala de aula invertida como proposta para o ensino de termodinâmica. 2022. Dissertação (Mestrado) – Universidade Federal de Pernambuco, 2022.

PESENTE, G. M. O ensino de matemática por meio da linguagem de programação Python. 2019. Dissertação (Mestrado em Ensino de Ciência e Tecnologia) – Universidade Tecnológica Federal do Paraná, Campus Ponta Grossa, Ponta Grossa, 2019.

RAUPP, D.; SERRANO, A.; MARTINS, T. L. C. A evolução da química computacional e sua contribuição para a educação em Química. *Revista Liberato, Novo Hamburgo*, v. 9, n. 12, p. 13–22, jul./dez. 2008.

RUTTEN, N.; VAN JOOLINGEN, W. R.; VAN DER VEEN, J. T. The learning effects of computer simulations in science education. *Computers & Education*, v. 58, n. 1, p. 136–153, 2012. Disponível em: <https://doi.org/10.1016/j.compedu.2011.07.017>.

SASKA, A. et al. ccNetViz: A WebGL based Javascript library for visualization of large networks. *Bioinformatics*, 2020.

SEARA, F.; ZEMANSKY, M. W.; YOUNG, H. D. Física, volume 2: mecânica dos fluidos, calor e movimento ondulatório. Rio de Janeiro: LTC, 1984.

SILVA, J. C. Linguagem de programação e raciocínio computacional como mediadores em uma estratégia interdisciplinar no ensino de química. 2022. Trabalho de Conclusão de Curso (Graduação) – Universidade Federal de Pernambuco, Campus Agreste, Caruaru, 2022.

SILVA, R. Análogo mecânico para a discussão de conceitos da Termodinâmica. 2020. Dissertação (Mestrado) – Universidade Federal de São Carlos, Campus Sorocaba, Sorocaba, 2020.

SILVA, M. G. A. Utilização de Simulações PhET para o Ensino da Termodinâmica na Universidade Nacional Timor Lorosa'e: uma proposta para o ensino e aprendizagem da física no departamento do ensino de física. 2024. Dissertação (Mestrado em Ensino e Divulgação das Ciências) – Unidade de Ensino das Ciências, Faculdade de Ciências da Universidade do Porto, Porto, 2024.

SIMULADOR DE QUÍMICA. Disponível em: <https://simulador-quimica-react.vercel.app/>. Acesso em: 7 nov. 2024.

SMITH, J. M.; VAN NESS, H. C.; ABBOTT, M. M. Introdução à Termodinâmica da Engenharia Química. 5. ed. LTC Editora, 2000.

THEISEN, K. J. Programming languages in chemistry: a review of HTML5/JavaScript. J Cheminform, v. 11, 11, 2019.

VOSEGAARD, T. JsNMR: An Embedded Platform-independent NMR Spectrum Viewer. Magnetic Resonance in Chemistry, v. 53, n. 4, p. 285–290, 2015.

WING, J. Pensamento computacional – um conjunto de atitudes e habilidades que todos, não só cientistas da computação, ficaram ansiosos para aprender e usar. Revista Brasileira de Ensino de Ciência e Tecnologia, Ponta Grossa, v. 9, n. 2, p. 1–10, maio/ago. 2016.

8. ANEXOS

Anexo I - Implementação dos cálculos via código TypeScript do projeto

Dropdown com as opções de processo (src/components/Dropdown/index.tsx)

```
import React, { useContext, useState } from 'react';
import './styles.css';
import MyContext from '../../../contexts/MyContext';

export default function Dropdown() {
  const [isOpen, setIsOpen] = useState(false);
  const [selectedOption, setSelectedOption] = useState(null);
  const {setFinalPression, setFinalTemperature, setFinalVolume,
    setInitialPression, setInitialTemperature, setInitialVolume,
    setQ, setW, setU,
    setProcessType} = useContext(MyContext);

  const resetValues = () => {
    setFinalPression("");
    setFinalTemperature("");
    setFinalVolume("");
    setInitialPression("");
    setInitialTemperature("");
    setInitialVolume("");
    setQ("0");
    setW("0");
    setU("0");
  };

  const toggleDropdown = () => {
    setIsOpen(!isOpen);
  };

  const handleOptionClick = (option) => {
    setSelectedOption(option);
    setProcessType(option);
    resetValues();
    setIsOpen(false);
  };
};
```

```

return (
  (
    <div className="dropdown">
      <button className="dropdown-toggle" onClick={toggleDropdown}
type="button">
        {selectedOption ? selectedOption : 'Selecione o tipo de
processo'}
        {isOpen ? <div>#9651;</div> : <div>#9661;</div>}
      </button>
      {isOpen && (
        <ul className="dropdown-menu">
          <li onClick={() => handleOptionClick('Processo
isobárico')}>Processo isobárico</li>
          <li onClick={() => handleOptionClick('Processo
isotérmico')}>Processo isotérmico</li>
          <li onClick={() => handleOptionClick('Processo
isovolumétrico')}>Processo isovolumétrico</li>
        </ul>
      )}
    </div>
  )
)
};

```

Input dos parâmetros iniciais e finais (src/components/Input/index.tsx)

```

import React, { useContext, useEffect, useState } from 'react';
import './styles.css';
import Dropdown from '../Dropdown';
import Calculator from '../Calculator';
import MyContext from '../../contexts/MyContext';
var R = 0.08206;

export default function Input() {
  const {finalPression, setFinalPression,
    finalTemperature, setFinalTemperature,
    finalVolume, setFinalVolume,
    initialPression, setInitialPression,

```

```

initialTemperature, setInitialTemperature,
initialVolume, setInitialVolume,
processType} = useContext(MyContext);

const [constChanged, setConstChanged] = useState("");
const [tempI, setTempI] = useState(0);
const [tempF, setTempF] = useState(0);

useEffect(() => {
    if (processType=="Processo isobárico")
    {setFinalPression(initialPression)}
    if (processType=="Processo isotérmico")
    {setFinalTemperature(initialTemperature)}
    if (processType=="Processo isovolumétrico")
    {setFinalVolume(initialVolume)}

    const volumeInicial = initialVolume ? parseFloat(initialVolume) :
null;
    const pressaoInicial = initialPression ? parseFloat(initialPression)
: null;
    const temperaturaInicial = tempI;
    const volumeFinal = finalVolume ? parseFloat(finalVolume) : null;
    const pressaoFinal = finalPression ? parseFloat(finalPression) :
null;
    const temperaturaFinal = tempF;

    if (processType=="Processo isobárico" && volumeInicial &&
pressaoInicial && temperaturaInicial!=0) {
        constChanged == "initialVolume" ?
            setInitialTemperature((((pressaoInicial * volumeInicial) /
R)-273.15).toFixed(4)) :

setInitialVolume(((R*temperaturaInicial)/pressaoInicial).toFixed(4))
    }
    if (processType=="Processo isobárico" && volumeFinal && pressaoFinal
&& temperaturaFinal!=0) {
        constChanged == "finalVolume" ?
            setFinalTemperature((((pressaoFinal * volumeFinal) /
R)-273.15).toFixed(4)) :

```

```

setFinalVolume(((R*temperaturaFinal)/pressaoFinal).toPrecision(4))
    }
    if (processType=="Processo isotérmico" && volumeInicial &&
    pressaoInicial && temperaturaInicial!=0) {
        constChanged == "initialVolume" ?
            setInitialPression(((R * temperaturaInicial) /
    volumeInicial).toPrecision(4)) :

setInitialVolume(((R*temperaturaInicial)/pressaoInicial).toPrecision(4))
    }
    if (processType=="Processo isotérmico" && volumeFinal &&
    pressaoFinal && temperaturaFinal!=0) {
        constChanged == "finalVolume" ?
            setFinalPression(((R * temperaturaFinal) /
    volumeFinal).toPrecision(4)) :

setFinalVolume(((R*temperaturaFinal)/pressaoFinal).toPrecision(4));
    }
    if (processType=="Processo isovolumétrico" && volumeInicial &&
    pressaoInicial && temperaturaInicial!=0) {
        constChanged == "initialPression" ?
            setInitialTemperature(((pressaoInicial * volumeInicial) /
    R)-273.15).toPrecision(4)) :
            setInitialPression(((R * temperaturaInicial) /
    volumeInicial).toPrecision(4))
    }
    if (processType=="Processo isovolumétrico" && volumeFinal &&
    pressaoFinal && temperaturaFinal!=0) {
        constChanged == "finalPression" ?
            setFinalTemperature(((pressaoFinal * volumeFinal) /
    R)-273.15).toPrecision(4)) :
            setFinalPression(((R
    *(temperaturaFinal+273.15))/volumeFinal).toPrecision(4))
    }

    if(volumeInicial!=null && pressaoInicial!=null &&
    temperaturaInicial==0) {
        var temperatura = ((pressaoInicial * volumeInicial) / R)-273.15);
        setInitialTemperature(temperatura.toPrecision(4));
    }

```

```

        if(volumeInicial!=null    &&    pressaoInicial==null    &&
temperaturaInicial!=0) {
            var pressao= ((R*(temperaturaInicial))/ volumeInicial);
            setInitialPression(pressao.toPrecision(4));
        }

        if(volumeInicial==null    &&    pressaoInicial!=null    &&
temperaturaInicial!=0) {
            var volume= ((R * (temperaturaInicial)) / pressaoInicial);
            setInitialVolume(volume.toPrecision(4));
        }

        if(volumeFinal!=null && pressaoFinal!=null && temperaturaFinal==0) {
            var temperatura = (((pressaoFinal * volumeFinal) / R)-273.15);
            setFinalTemperature(temperatura.toPrecision(4));
        }
        if(volumeFinal!=null && pressaoFinal==null && temperaturaFinal!=0) {
            var pressao= ((R*(temperaturaFinal))/ volumeFinal);
            setFinalPression(pressao.toPrecision(4));
        }
        if(volumeFinal==null && pressaoFinal!=null && temperaturaFinal!=0) {
            var volume= ((R * (temperaturaFinal)) / pressaoFinal);
            setFinalVolume(volume.toPrecision(4));
        }

    }, [finalPression, finalVolume, initialVolume, initialPression, tempI,
tempF])

    useEffect(() => {
        setTempI(0);
        setTempF(0)
    }, [processType])

    const handleInitialChange = (e) => {
        if(processType == "") {
            return alert("Selecione um tipo de processo.")
        } else {
            if (e.target.name=="initialPression") {
                if (parseFloat(e.target.value) <=0) {
                    return alert("Selecione um valor maior que zero.")
                } else {setInitialPression(e.target.value);

```

```

setConstChanged(e.target.name);}
    }
    if (e.target.name=="initialTemperature") {
        setInitialTemperature(e.target.value);
        e.target.value == "0" ? (setTempI(273.15)) :
setTempI(parseFloat(e.target.value)+273.15);
        setConstChanged(e.target.name);
            if (processType=="Processo isotérmico")
{setFinalTemperature(e.target.value);
setTempF(parseFloat(e.target.value)+273.15)}
    }
    if (e.target.name=="initialVolume") {
        if (parseFloat(e.target.value) <=0) {
            return alert("Selecione um valor maior que zero.")
        } else {setInitialVolume(e.target.value);
setConstChanged(e.target.name);}
    }
}
};

const handleFinalChange = (e) => {
    if(processType == "") {
        return alert("Selecione um tipo de processo.")
    } else {
        if (e.target.name=="finalPression") {
            if (parseFloat(e.target.value) <=0) {
                return alert("Selecione um valor maior que zero.")
            } else {setFinalPression(e.target.value);
setConstChanged(e.target.name);}
        }
        if (e.target.name=="finalTemperature") {
            setFinalTemperature(e.target.value);
            e.target.value == "0" ? (setTempF(273.15)) :
setTempF(parseFloat(e.target.value)+273.15);
            setConstChanged(e.target.name)
        }
        if (e.target.name=="finalVolume") {
            if (parseFloat(e.target.value) <=0) {
                return alert("Selecione um valor maior que zero.")
            } else {setFinalVolume(e.target.value);

```

```
setConstChanged(e.target.name) }
    }
  }
};

return (
  <form className="inputs-form">
    <Dropdown/>
    <div className="form-group">
      <h3>Estado Inicial</h3>
      <input
        type="number"
        name="initialPression"
        placeholder="Pressão inicial (atm)"
        min="1" max="5" step="2"
        value={initialPression==""? '' : initialPression}
        onChange={handleInitialChange}
      />
      <input
        type="number"
        name="initialTemperature"
        placeholder="Temperatura inicial (°C)"
        min="0" max="300" step="1"
        value={initialTemperature==""? '' : initialTemperature}
        onChange={handleInitialChange}
      />
      <input
        type="number"
        name="initialVolume"
        placeholder="Volume inicial (L)"
        min="1" max="50" step="1"
        value={initialVolume==""? '' : initialVolume}
        onChange={handleInitialChange}
      />
    </div>

    <div className="form-group">
      <h3>Estado Final</h3>
      <input
        type="number"
```

```

        name="finalPression"
        placeholder="Pressão final (atm)"
        min="1" max="5" step="2"
        value={({finalPression===null || processType=="Processo
isobárico"})? '' : finalPression}
        onChange={handleFinalChange}
        disabled={processType=="Processo isobárico"}
    />
    <input
        type="number"
        name="finalTemperature"
        placeholder="Temperatura final (°C)"
        min="0" max="300" step="1"
        value={({finalTemperature===null || processType=="Processo
isotérmico"})? '' : finalTemperature}
        onChange={handleFinalChange}
        disabled={processType=="Processo isotérmico"}
    />
    <input
        type="number"
        name="finalVolume"
        placeholder="Volume final (L)"
        min="1" max="50" step="1"
        value={({finalVolume===null || processType=="Processo
isovolumétrico"})? '' : finalVolume}
        onChange={handleFinalChange}
        disabled={processType=="Processo isovolumétrico"}
    />
</div>
<Calculator/>
</form>
);
};

```

Área de cálculos de calor, trabalho e variação de energia interna do processo (src/components/Calculator/index.tsx)

```

// QWUCalculator.js
import React, { useContext, useEffect } from 'react';

```

```

import './styles.css'; // Arquivo de estilo
import MyContext from '../contexts/MyContext';
var R = 0.08206;
var Cv = 12.47;
let fatorConversaoParaJoule = 101.35;

export default function Calculator() {
  const {finalTemperature, finalVolume,
    initialPression, initialTemperature, initialVolume,
    processType, Q,W,U, setQ, setW, setU,} = useContext(MyContext);

  useEffect(() => {
    if (processType=="Processo isobárico" && finalTemperature!="" &&
initialTemperature!="" && finalVolume!="" && initialVolume!="" &&
initialPression!="") {
      var volumeFinal = parseFloat(finalVolume);
      var volumeInicial = parseFloat(initialVolume);
      var temperaturaInicial = parseFloat(initialTemperature);
      var temperaturaFinal = parseFloat(finalTemperature);
      var pressaoInicial = parseFloat(initialPression);

      var energiaInterna = Cv*(temperaturaFinal-temperaturaInicial);
      var trabalho =
-pressaoInicial*(volumeFinal-volumeInicial)*fatorConversaoParaJoule;
      var calor = energiaInterna - trabalho;

      setQ(calor.toPrecision(4));
      setW(trabalho.toPrecision(4));
      setU(energiaInterna.toPrecision(4))
    }

    if (processType=="Processo isotérmico" && initialVolume!="" &&
finalVolume!="" && initialTemperature!="") {
      var volumeFinal = parseFloat(finalVolume);
      var volumeInicial = parseFloat(initialVolume);
      var temperaturaInicial = parseFloat(initialTemperature);

      let div = volumeFinal / volumeInicial;
      var trabalho =
-R*(temperaturaInicial+273.15)*Math.log(div)*fatorConversaoParaJoule;

```

```

        setU("0");
        setW(trabalho.toPrecision(4));
        setQ((-trabalho).toPrecision(4));
    }

    if (processType=="Processo isovolumétrico" && initialTemperature!=""
&& finalTemperature!="") {
        var temperaturaInicial = parseFloat(initialTemperature);
        var temperaturaFinal = parseFloat(finalTemperature);

        var calor = (Cv*(temperaturaFinal-temperaturaInicial));

        setQ(calor.toPrecision(4));
        setU(calor.toPrecision(4));
        setW("0");
    }

    }, [initialPression, initialTemperature, initialVolume,
finalTemperature, finalVolume, processType, setQ, setW, setU])

return (
    <div className="calculator-container">
        <div className="results">
            <div className="result-block">
                <h3>Q (Calor)</h3>
                <p>{Q} J</p>
            </div>
            <div className="result-block">
                <h3>W (Trabalho)</h3>
                <p>{W} J</p>
            </div>
            <div className="result-block">
                <h3> $\Delta U$  (Energia Interna)</h3>
                <p>{U} J</p>
            </div>
        </div>
    </div>
);
};

```

Área dos gráficos (src/components/Chart/index.tsx)

```
import React, { useContext, useEffect, useState } from 'react';
import './styles.css';
import Chart from 'react-apexcharts';
import MyContext from '../../../contexts/MyContext';
import { ApexOptions } from 'apexcharts';

const R = 0.08206;

interface ChartData {
  series: { name: string; data: number[] }[];
  options: ApexOptions; // Usando ApexOptions diretamente
}

export default function MyChart() {
  const {
    finalPression,
    finalTemperature,
    finalVolume,
    initialPression,
    initialTemperature,
    initialVolume,
    processType,
  } = useContext(MyContext);

  const [chartData, setChartData] = useState<ChartData>({
    series: [{
      name: 'Dados Iniciais',
      data: [],
    }],
    options: {
      chart: {
        type: 'line',
        height: '100%'
      },
      grid: {
        row: {
```

```

        colors: ['#f3f3f3', 'transparent'],
        opacity: 0.5
    },
},
title: {
    text: processType || "",
    align: 'center'
},
xaxis: {
    title: {
        text: processType === 'Processo isotérmico' ? 'Volume (L)' :
'Temperatura (°C)',
    },
    categories: [],
},
yaxis: {
    title: {
        text: processType === 'Processo isobárico' ? 'Volume (L)' :
'Pressão (atm)',
    },
},
},
});

useEffect(() => {
    const volumeInicial = initialVolume ? parseFloat(initialVolume) :
null;
    const pressaoInicial = initialPression ? parseFloat(initialPression) :
null;

        const temperaturaInicial = initialTemperature ?
parseFloat(initialTemperature) : null;
    const volumeFinal = finalVolume ? parseFloat(finalVolume) : null;
        const temperaturaFinal = finalTemperature ?
parseFloat(finalTemperature) : null;

    const intervaloX: string[] = [];
    const intervaloY: number[] = [];

    if (processType === 'Processo isotérmico' && volumeFinal !== null &&
volumeInicial !== null && temperaturaInicial !== null) {

```

```

const incremento = Math.abs((volumeFinal - volumeInicial) / 10);
for (let i = 0; i <= 10; i += 1) {
    const volumeCalculado = (volumeInicial > volumeFinal ? volumeFinal
: volumeInicial) + i * incremento;
    intervaloX.push(volumeCalculado.toFixed(4));
    const pressaoCalculada = (R * (temperaturaInicial + 273.15)) /
volumeCalculado;
    intervaloY.push(parseFloat(pressaoCalculada.toFixed(4)));
}
} else if (processType === 'Processo isobárico' && temperaturaFinal !=
null && temperaturaInicial != null && pressaoInicial != null) {
    const incremento = Math.abs((temperaturaFinal - temperaturaInicial)
/ 10);
    for (let i = 0; i <= 10; i += 1) {
        const temperaturaCalculada = (temperaturaInicial >
temperaturaFinal ? temperaturaFinal : temperaturaInicial) + i *
incremento;
        intervaloX.push(temperaturaCalculada.toFixed(4));
        const volumeCalculado = (R * (temperaturaCalculada + 273.15)) /
pressaoInicial;
        intervaloY.push(parseFloat(volumeCalculado.toFixed(4)));
    }
} else if (processType === 'Processo isovolumétrico' &&
temperaturaFinal != null && temperaturaInicial != null && volumeInicial !=
null) {
    const incremento = Math.abs((temperaturaFinal - temperaturaInicial)
/ 10);
    for (let i = 0; i <= 10; i += 1) {
        const temperaturaCalculada = (temperaturaInicial >
temperaturaFinal ? temperaturaFinal : temperaturaInicial) + i *
incremento;
        intervaloX.push(temperaturaCalculada.toFixed(4));
        const pressaoCalculada = (R * (temperaturaCalculada + 273.15)) /
volumeInicial;
        intervaloY.push(parseFloat(pressaoCalculada.toFixed(4)));
    }
}

setChartData({
    series: [{

```

```

    name: processType,
    data: intervaloY.length > 0 ? intervaloY : Array(6).fill(0),
  }],
  options: {
    ...chartData.options,
    xaxis: {
      ...chartData.options.xaxis,
      title: {
        text: processType === 'Processo isotérmico' ? 'Volume (L)' :
'Temperatura (°C)',
      },
      categories: intervaloX.length > 0 ? intervaloX :
Array(6).fill('0'),
    },
    yaxis: {
      title: {
        text: processType === 'Processo isobárico' ? 'Volume (L)' :
'Pressão (atm)',
      },
      title: {
        text: processType,
        align: 'center'
      },
    },
  },
});
}, [processType, finalPression, finalTemperature, finalVolume,
initialPression, initialTemperature, initialVolume]);

return (
  <div className="chart-container">
    <Chart options={chartData.options} series={chartData.series}
type="line" height="100%" />
  </div>
);
}

```