
211 INTENSIDADES VIBRACIONAIS ABSOLUTAS: CONFECÇÃO DE MATERIAL INSTRUCCIONAL. A. F. Trapp (IC), M. L. Eichler lig, J. C. Del Pino (Área de Educação Química Instituto de Química - UFRGS).

C) presente trabalho visa analisar a utilização de recursos computacionais no auxílio da construção de modelos concretos da realidade para conceitos químicos de elevado nível de abstração. Neste sentido está sendo realizada uma análise comparativa entre espectros de IV e as Intensidades Vibracionais Absolutas obtidas através de cálculos computacionais do pacote Unichem. Estes cálculos se utilizam de padrões semi-empíricos na minimização das energias de ligação, aproximando os valores de ângulos e distâncias de ligação da molécula criada no computador, dos valores conhecidos experimentalmente, para tanto utilizando-se como controle um grupo de moléculas orgânicas. A comparação entre os diferentes espectros obtidos permitirá concluir a viabilidade da utilização de tais recursos para a produção de vídeo instrucional do estudo de IV, mostrando os diferentes tipos de estiramento para a molécula. Que, posteriormente, poderão ser utilizados em cursos de Química a nível de graduação. Esta pesquisa conta com o apoio do Centro Nacional de Supercomputação.