

## Izračunavanje stabilizacionih energija za aromatične molekule u školama – Kvantna hemija, značajno oruđe za predavanje i obrazovanje

**Ralph Puchta<sup>1-6\*</sup>, Thomas Capponi<sup>5</sup>, Dušan Čović<sup>7</sup>, Basam M. Alzoubi<sup>8</sup>, Ilka Shook<sup>1</sup>**

*1- Nirnberška državna tehnička gimnazija, Škola Lothar von Faber, Schafhofstr. 25, 90411 Nirnberg, Nemačka*

*2- Univerzitet u Erlangen-Nurembergu, Departman za hemiju i farmaciju, Neorganska hemija, Egerlandstr. 1, 91058 Erlangen, Nemačka*

*3- Univerzitet u Erlangen-Nurembergu, Departman za hemiju i farmaciju, Centar kompjuterske hemije, Nögelsbachstr. 25, 91052 Erlangen, Nemačka*

*4- Univerzitet u Erlangen-Nurembergu, Centralni institut za naučno računarstvo, Martensstr. 5a, 91058 Erlangen, Nemačka*

*5- Univerzitet u Erlangenu, Državni stručni školski centar za zdravstvene profesije, Stručna škola za tehničke asistente u medicini, Universitätsstr. 42-44/91054 Erlangen, Nemačka*

*6- Tehnički univerzitet u Nirnbergu Georg Simon Ohm, Fakultet primenjene matematike, fizike i opštih nauka, Keßlerplatz 12, 90489 Nirnberg, Nemačka*

*7- Univerzitet u Kragujevcu, Prirodno-matematički fakultet, Institut za hemiju, Radoja Domanovića 12, P. O. Box 60, 34000 Kragujevac, Srbija*

*8- Al-Balqa primenjeni univerzitet, Al-Huson univerzitetski koledž, Odeljenje osnovnih nauka, Irbid, Jordan*

### SAŽETAK

Aromatičnost spada u jedan od fundamentalnih koncepta u razumevanju hemije. Iako prisutna u mnogim elementarnim organskim hemijskim kursevima, veoma je teško podstaći učenike i studente da nezavisno van svojih predavanja i dalje istražuju temu aromatičnosti jedinjenja. Primenom kompjuterske hemije, a naročito kvantne kompjuterske hemije, u ovom radu predstavljamo mogućnost da se studenti više zainteresuju za polje aromatičnosti u hemiji, omogućavajući im da individualno testiraju naučne koncepte i rade sopstvene “eksperimente” na jednostavan i siguran način. U okviru ovog rada fokusirali smo se samo na strukturni i energetski

aspekt aromatičnosti jedinjenja, jer su ovi aspekti najkompatibilniji sa ostalim lekcijama tipičnog časa hemije. Da bi odredili energiju stabilizacije uzrokovanu od strane aromatičnosti sistema, predstavljamo izomerizacionu energiju stabilizacije (engl. isomerisation stabilization energy (ISE)), koja je po sebi jednostavna za računanje kao i razumevanje, a popularizovana je od strane Paula fon Raga Šlajera (Paul von Ragué Schleyer) i Franka Pilhoferera (Frank Pühlhofer) pre 20 godina. Kao praktične primere predstavljamo naš koncept benzenskih i piridinskih sistema, i predložimo teme za male istraživačke projekte studentima i đacima.

*Ključne reči: aromatičnost, eksperimenti kompjuterske hemije, obrazovanje*