

Calcul des énergies de stabilisation des molécules aromatiques dans les écoles - la chimie quantique, un outil précieux pour l'enseignement et l'éducation

Ralph Puchta^{1-6*}, Thomas Capponi⁵, Dušan Čović⁷, Basam M. Alzoubi⁸, Ilka Shook¹

1- Lycée technique d'État à Nuremberg, École Lothar-von-Faber, Schafhofstr. 25, 90411 Nuremberg, Allemagne

2- Université d'Erlangen-Nuremberg, Département de chimie et de pharmacie, Chimie inorganique, Egerlandstr. 1, 91058 Erlangen, Allemagne

3- , Université d'Erlangen-Nuremberg, Département de chimie et de pharmacie, Centre de chimie informatique, Nögelsbachstr. 25, 91052 Erlangen, Allemagne

4- Université d'Erlangen-Nuremberg, Institut central de calcul scientifique (ZISC), Martensstr. 5a, 91058 Erlangen, Allemagne

5- École professionnelle d'État Centre des professions de la santé d'Erlangen à l'hôpital universitaire d'Erlangen, École professionnelle pour assistants techniques en médecine Universitätsstr. 42-44, 91054 Erlangen, Allemagne

6- TH Nürnberg Georg Simon Ohm, Faculté de mathématiques appliquées, physique et sciences générales, Keßlerplatz 12, 90489 Nürnberg, Allemagne

7- Université de Kragujevac, Faculté des sciences, Département de chimie, Radoja Domanovića 12, P. O. Box 60, 34000 Kragujevac, Serbie

8- Université appliquée Al-Balqa, Collège universitaire Al-Huson, Département des sciences fondamentales, Irbid, Jordanie

RÉSUMÉ

Alors que l'aromaticité est l'un des concepts les plus fondamentaux de la chimie et elle est enseignée dans de nombreux cours élémentaires de chimie organique, il n'est guère possible d'inciter les élèves et les étudiants à apprendre et à explorer ce sujet de manière indépendante. En

appliquant la chimie computationnelle et en particulier la chimie quantique, nous introduisons une possibilité d'activer les étudiants en leur permettant de tester les concepts enseignés et de faire leurs propres "expériences" à moindre coût et en toute sécurité. Nous nous sommes concentrés dans le rapport actuel sur les aspects structurels et énergétiques de l'aromaticité, car ils sont les plus compatibles avec d'autres sujets de cours de chimie typiques. Pour évaluer l'énergie de stabilisation aromatique, nous suggérons l'énergie de stabilisation d'isomérisation (ISE) simple à calculer et facile à comprendre, popularisée par Paul von Ragué Schleyer et Frank Pühlhofer il y a une vingtaine d'années. Comme exemples pratiques, nous démontrons notre concept avec des systèmes à base de benzène et de pyridine et suggérons des sujets pour de petits projets pour les étudiants et les élèves.

Mots-clés: aromaticité, expériences de chimie computationnelle, éducation