

Расчет энергий стабилизации ароматических молекул в школах - квантовая химия, ценный инструмент для обучения и образования

Ральф Пухта¹⁻⁶, Томас Каппони⁵, Душан Чочич⁷, Басам М. Алзуби⁸, Илка Шук¹

1- Государственный технический колледж в Нюрнберге, Школа Лотара фон Фабера, Шафхофстр. 25, 90411 Нюрнберг, Германия

2- Университет Эрланген-Нюрнберг, Кафедра химии и фармации, Неорганическая химия, Эрландстр. 1, 91058 Эрланген, Германия

3- Университет Эрланген-Нюрнберг, Кафедра химии и фармации, Центр компьютерной химии, Негелсбахстр. 25, 91052 Эрланген, Германия

4- Университет Эрланген-Нюрнберг, Центральный институт научных вычислений, Мартенсстр., 91058 Эрланген, Германия

5- Государственный профессиональный школьный Центр медицинских профессий Эрлангена при университетской больнице Эрлангена, Профессиональная школа технических помощников в медицине, Университатстр. 42-44, 91054 Эрланген, Германия

6- ТН Нюрнберг Георг Симон Ом, Факультет прикладной математики, физики и общих наук, Кесслерплац 12, 90489 Нюрнберг, Германия

7- Университет в Крагуевце, Факультет естественных наук, Кафедра химии, Радоя Домановича 12, П.П. 60, 34000 Крагуевац, Сербия

8- Прикладной университет Аль-Балка, Университетский колледж Аль-Хусон, Кафедра фундаментальных наук, Ирбид, Иордания

АННОТАЦИЯ

Ароматичность относится к одному из фундаментальных понятий в понимании химии, хотя она и присутствует во многих курсах элементарной органической химии, очень трудно побудить школьников и студентов к самостоятельному изучению темы ароматичности соединений вне лекций. Применяя вычислительную химию и особенно квантовую химию, мы представляем возможность активизировать студентов, позволяя им проверять преподаваемые концепции и проводить свои собственные «эксперименты» дешево и безопасно. В настоящем отчете мы сосредоточились на структурных и энергетических аспектах ароматичности, поскольку они наиболее совместимы с другими темами типичных

уроков химии. Для оценки энергии стабилизации ароматических соединений мы предлагаем простую для расчета и понимания энергию стабилизации изомеризации (ISE), популяризованную Паулем фон Раге Шлейером и Франком Пюльхофером около 20 лет назад. В качестве практических примеров мы демонстрируем нашу концепцию с системами на основе бензола и пиридина и предлагаем темы для небольших проектов для студентов и школьников.

Ключевые слова: *ароматичность, компьютерно-химические эксперименты, образование*