

Berechnung von Stabilisierungsenergien für aromatische Moleküle in Schulen -Quantenchemie, ein wertvolles Instrument für den Unterricht und Bildung

Ralph Puchta¹⁻⁶, Thomas Capponi⁵, Dušan Čočić⁷, Basam M. Alzoubi⁸, Ilka Shook¹

1- Lothar-von-Faber-Schule, Staatliche Fachoberschule Nürnberg, Schafhofstr. 25, 90411 Nürnberg, Deutschland

2- Anorganische Chemie, Institut für Chemie und Pharmazie, Universität Erlangen-Nürnberg, Egerlandstr. 1, 91058 Erlangen, Deutschland

3- Computerchemiezentrum, Institut für Chemie und Pharmazie, Universität Erlangen-Nürnberg, Nägelsbachstr. 25, 91052 Erlangen, Deutschland

4- Zentralinstitut für Wissenschaftliches Rechnen (ZISC), Universität Erlangen-Nürnberg, Martensstr. 5a, 91058 Erlangen, Deutschland

5- Staatliches Berufliches Schulzentrum für Gesundheitsberufe Erlangen am Universitätsklinikum Erlangen, Berufsfachschule für Technische Assistenten in der Medizin Universitätsstr. 42-44, 91054 Erlangen, Deutschland

6- Fakultät Angewandte Mathematik, Physik und Allgemeinwissenschaften, TH Nürnberg Georg Simon Ohm, Keßlerplatz 12, 90489 Nürnberg, Deutschland

7- Fakultät für Chemie, Fakultät für Naturwissenschaften, Universität Kragujevac, Radoja Domanovića 12, Postfach 60, 34000 Kragujevac, Serbien

8- Abteilung für Grundlagenwissenschaften, Al-Huson University College, Al-Balqa Applied University, Irbid, Jordanien

ABSTRACT

Aromatizität gehört zu den fundamentalen Konzepten in der Chemie und wird deshalb auch in nahezu jeder grundlegenden Lehrveranstaltung für organische Chemie besprochen. Leider ist es aber bisher kaum möglich dieses Thema so zu unterrichten, dass die Lernenden aktiviert und zum Selbststudium angeregt werden. Durch den Einsatz von Computerchemie und hier im speziellen von Quantenchemie ergibt sich eine preisgünstige und sichere Möglichkeit für den Lernenden die unterrichteten Konzepte selbst zu überprüfen und selbstständig eigene Experimente auszuführen.

In dieser Arbeit setzen wir den Schwerpunkt auf die strukturellen und energetischen Aspekte des Phänomens „Aromatizität“. Beide Aspekte passen am besten zu den anderen Themen, die in einer typischen Anfängerlehrveranstaltung für organische Chemie besprochen werden. Zur Ermittlung der aromatischen Stabilisierungsenergie greifen wir auf die einfach zu berechnende und ebenso einfach zu verstehende *isomerisation stabilization energy* (ISE) zurück, wie sie vor rund 20 Jahren von Paul von Ragué Schleyer and Frank Pühlhofer als einfaches Konzept für unterschiedlichste Systeme vorgestellt wurde. Das vorgestellte Konzept wird mit praktischen Beispielen an Hand von Benzol- und Pyridinderivaten verdeutlicht; kleine Projekte zum eigenständigen Üben und Forschen der Lernenden werden vorgeschlagen.

Schlüsselwörter: Aromatizität, Computerchemische Experimente, Bildung