

筑波大学理工学群化学類

筑波大学大学院数理物質科学研究群化学学位プログラム

筑波大学エネルギー物質科学研究センター (TREMS)

第16回元素化学セミナー・講演会

◆講師◆ University of Murcia

Prof. Dr. Arturo Espinosa Ferao

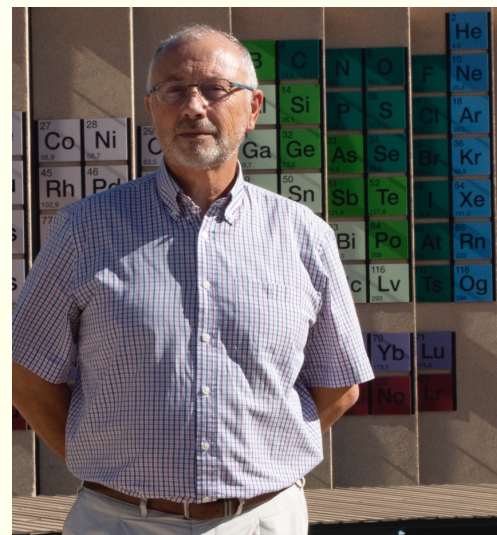
◆日時◆ 令和7年 7月8日 (火)

16:00 ~ 17:30

◆場所◆ 総合研究棟 B 1 1 0 室

◆演題◆

Three-Membered Rings with p-Block Elements: Scope, Ring Strain and Aromaticity



The talk will focus on the variety of three-membered rings (3MRs) containing p-block elements (groups 13 to 16) that have been studied computationally so far. Some three-atom combinations lead only to acyclic structures, while others do not form proper rings (pseudorings). Accurate ring strain energy (RSE) values for all other proper 3MRs are presented, and the main geometric and electronic factors affecting the RSE are discussed. Among the latter, the fate of 2π -electron Hückel aromaticity is explored for rings with two triels and one atom bearing a lone pair (pnictogen or chalcogen). An additive method based on atomic or bond strain contributions will be proposed for rapid estimation of the RSE.

ムルシア大学（スペイン）のArturo Espinosa Ferao先生は、理論化学の分野で研究を展開し、特に無機化学・典型元素化学分野の分子構造、電子状態、歪みエネルギー、有機反応機構など、理論計算を使った多岐にわたる研究テーマに取り組んでいます。

今回、IMECS-2025国際WSの特別セッションとして、本講演会を企画しました。

本講演会は参加費無料です。どうぞ奮ってご参加ください。

*この講演会は、「有機化学特論I (FE14131)」(化学類)の一部になります。

◆問合せ先◆ 笹森貴裕（筑波大学数理物質系化学域・TREMS）
029-853-4412、sasamori@chem.tsukuba.ac.jp