細孔性錯体を用いた分子構造 ICT 教材の開発と実践

（宮城教育大学）○笠井 香代子・森 友康・大宮 崚・反畑 爽
Development and Practice of ICT-based Teaching Materials for Understanding of Molecular Structures Using Porous Coordination Networks (*Miyagi University of Education*) ○Kayoko Kasai, Tomoyasu Mori, Ryo Omiya, Sayaka Tambata

Molecular models used in chemical education do not always show the real molecular structures. In X-ray crystallographic analysis, that is the best way to know the molecular structure directly, it cannot be measured unless it is a crystal. In recent years, a crystal sponge method has been developed that enables X-ray crystallographic analysis even non-crystalline using porous coordination networks. Therefore, we developed ICT-based teaching materials for understanding of molecular structures based on the data of X-ray crystallographic analysis of porous coordination networks **1**-**5** including organic molecules that is liquid at room temperature, and practiced them in classes for undergraduate students.
Keywords : Porous Coordination Network; Crystal Sponge Method; X-ray Crystallographic Analysis; Molecular Model; ICT-based Teaching Material

化学教育において使用される分子模型やモデルは、必ずしも本来の分子構造を示しているとは限らない。分子構造を直接知るには X 線結晶構造解析が最適だが、結晶でないと測定できない。近年細孔性錯体を用いて、結晶でなくても X 線結晶構造解析を可能とする結晶スポンジ法 [1]が開発された。そこで、常温で液体の有機分子を取り込んだ細孔性錯体 **1**–**5**[2]の X 線結晶構造解析のデータを基に分子構造 ICT 教材を開発し [3),4)]、大学での授業で実践した。

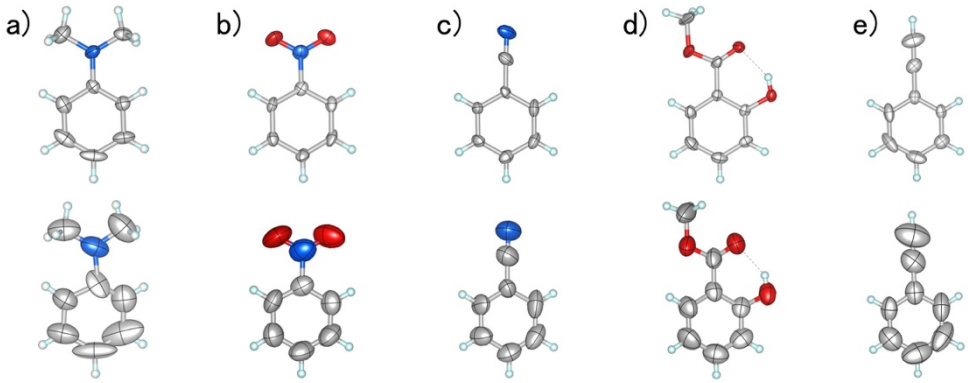

図　細孔性錯体 **1**-**5** に取り込まれた芳香族化合物の分子構造（熱振動楕円体、確率 50%）。上が低温（-172～-143 ℃）、下が室温（23 ℃付近）で測定したもの。点線は水素結合を示す。 a) *N*,*N*-ジメチルアニリン b) ニトロベンゼン c) ベンゾニトリル d) サリチル酸メチル e) エチニルベンゼン

【参考文献】1) 猪熊康英・藤田誠, *化学* **2013**, *68(8)*, 35. 2) K. Kasai, M. Fujita, *Chem. Eur. J.* **2007**, *13*, 3089. 3) K. Momma, F. Izumi, *J. Appl. Crystallogr.* **2011**, *44*, 1272. 4) 橋本樹・齋藤充志・笠井香代子, 宮城教育大学情報処理センター研究紀要 COMMUE **2020**, *27*, 41.
【謝辞】本研究の一部は、公益財団法人日本化学研究会 化学研究連絡助成金および宮城教育大学重点支援研究経費の支援により実施されました。

© The Chemical Society of Japan