

# ナトリウムエトキシド結晶構造の ICT 教材としての可能性

## A possibility as ICT learning material of the crystal structure of sodium ethoxides

○野口大介

NOGUCHI Daisuke

長崎大学

【キーワード】 アルコキシド, 教材開発, 結晶構造, 中等教育, 有機化合物

### 1 目的

高等学校の化学では無機物質の単位格子が学ばれ、物性を深く理解する上で重要な役割を果たしている。一方、有機化合物の結晶構造教材はほとんどない。このため、化学に対する生徒の興味関心を引く新たな教材開発にとって、有機化合物の結晶構造データは有用である<sup>1)</sup>。有機化学分野では、アルコールとエーテルの性質が必ず教えられる。その際、それぞれの水への溶解性の違いとともに、金属ナトリウムとの反応性の違いが、ナトリウムをエタノールに加えナトリウムエトキシド ( $\text{C}_2\text{H}_5\text{ONa}$ ) が溶媒中に生じる例で扱われる。 $\text{C}_2\text{H}_5\text{ONa}$  は有機溶媒中で強い塩基としてはたらき、これに水を加えると  $\text{NaOH}$  を生じることから、エタノールと水の酸の強さの違いが可視化される。

最近、リービッヒによる合成報告から 180 年の時を経て、 $\text{C}_2\text{H}_5\text{ONa}$  およびエタノール分子を結晶溶媒として含む  $\text{C}_2\text{H}_5\text{ONa} \cdot 2\text{C}_2\text{H}_5\text{OH}$  の結晶構造が、X 線回折法によって初めて明らかになった<sup>2)</sup>。これら 2 つの結晶構造データは、 $\text{C}_2\text{H}_5\text{ONa}$  (無溶媒) が溶媒であるエタノール中に分散する溶解過程を可視化する ICT 教材の基盤となりうるのではないかと考え、その可能性を検討することとした。

### 2 方法

$\text{C}_2\text{H}_5\text{ONa}$  と  $\text{C}_2\text{H}_5\text{ONa} \cdot 2\text{C}_2\text{H}_5\text{OH}$  の結晶構造データは、ケンブリッジ結晶学データセンター (CCDC) から cif ファイルとして取得した。結晶構造描画ソフトウェアである VESTA で cif ファイルを表示させ図を出力した。図中では白色が水素原子、褐色が炭素原子、赤色が酸素原子、黄色がナトリウム原子を表している。

### 3 結果と考察

$\text{C}_2\text{H}_5\text{ONa}$  結晶中では、ナトリウムイオンに酸素原子が 4 個結合した正方形平面格子が形成され、その前後にエチル基 (disorder している) が配列している (図 1)。 $\text{C}_2\text{H}_5\text{ONa}$  の組成

式のみからは想像もつかない構造である。 $\text{C}_2\text{H}_5\text{ONa} \cdot 2\text{C}_2\text{H}_5\text{OH}$  の結晶構造も、エタノールへの溶解初期状態に似たものとして、合わせて報告されている<sup>2)</sup>。エタノール分子は結晶格子内へと入り込み、ナトリウムイオン周りの酸素原子の配置は互いの距離が正方形よりも離れた四面体型へと近付いているのが明らかである (図 2)。以上から、両結晶構造を組み合わせれば、ナトリウムフェノキシド結晶に関する先行研究<sup>3)</sup>と同様に、固体でありながら溶解挙動を提示しうる新規教材となると考えられる。

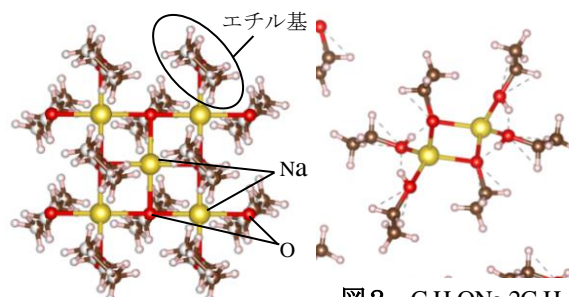


図 1  $\text{C}_2\text{H}_5\text{ONa}$  の結晶構造。

図 2  $\text{C}_2\text{H}_5\text{ONa} \cdot 2\text{C}_2\text{H}_5\text{OH}$  の結晶構造。

### 4 まとめ

Beske et al. (2020) の成果は、高校化学で必ず学ばれる  $\text{C}_2\text{H}_5\text{ONa}$  の興味深い結晶構造を可視化しつつ、さらにはその溶解過程までもを想起させる新たな ICT 教材の基盤となりうる点で注目に値する。今後は溶解過程をアニメーションでモデル化するよう、更に検討を進めたい。

### 参考文献

- 1) 野口大介 (2020) 「分子構造 ICT 教材開発を志向したナトリウムフェノキシド類結晶構造の文献調査」 日本科学教育学会研究会研究報告, Vol. 34 (2019-2020), Issue 10, pp. 23-28.
- 2) M. Beske, L. Tapmeyer and M. U. Schmidt (2020) "Crystal structure of sodium ethoxide ( $\text{C}_2\text{H}_5\text{ONa}$ ), unravelled after 180 years" *Chem. Comm.* Vol. 56, No. 24, pp. 3520-3523.