

# 結晶構造データに基づいた物質構造ICT教材ライブラリの 拡充と実践報告

笠井 香代子<sup>1</sup>, 山田 聖<sup>2</sup>, 反畑 爽<sup>3</sup>, 大宮 峻<sup>3</sup>, 森 友康<sup>4</sup>

<sup>1</sup>宮城教育大学 教育学部, <sup>2</sup>宮城県宮城野高等学校, <sup>3</sup>宮城教育大学 教育学部 中等教育教員養成課程 理科教育専攻,  
<sup>4</sup>宮城教育大学 教育学部 初等教育教員養成課程 理科コース

概要：当研究室ではこれまで中学校や高等学校の生徒や教員を対象として、結晶性物質より得られた X線結晶構造解析の実測データや、無償のデータベースを活用した物質構造ICT教材の開発を行ってきたが、教材の実践はほとんど行われていなかった。本研究では高等学校での授業実践を行い、有機分子の構造への理解に、分子構造の動画教材が従来の組立式模型のかわりに使用できる可能性が示唆された。また、GIGA スクール構想や指導要領の改訂に伴い、生徒の主体性や探求する態度に対応できる ICT教材やライブラリが求められる中で、これらの教材をさらに拡充し、物質の性質や利用法などを記載して集約したライブラリとして再構築した。高校生を対象とした教材実践を行い、これらのライブラリや、結晶・分子構造の可視化プログラム「VESTA」を使用した教材が、物質に対する生徒の理解度や主体性に関して有効である可能性が示唆された。

キーワード：結晶構造, 分子構造, ICT教材, ライブラリ, 高等学校化学

## 1. はじめに

現在の科学技術において、物質を構成する原子や分子を可視化できる最適な測定方法は、X線結晶構造解析である。原子が規則的に配列した結晶に X線を照射して発生する回折 X線の位置と強度より、結晶中での原子の位置がわかるため、物質の構造そのものを知ることができる。当研究室ではこれまで X線結晶構造解析に基づいた分子構造ICT教材を開発してきた。イオン性化合物や有機化合物などの結晶性物質や(笠井, 山田, 奈良, 2017; 笠井, 橋本, 鎌田, 藤原, 緑川, 高崎, 2019), 結晶スポンジ法(猪熊, 藤田, 2013)を利用して得られた細孔性錯体結晶の単結晶 X線構造解析を行い、分子の三次元構造を可視化できるデータやアニメーション動画などを作成した(笠井, 戸田, 後藤, 高橋, 鎌田, 2019; 橋本, 齋藤, 笠井, 2020)。また、無償のデータベースより入手した結晶構造データも活用し、金属やイオン結晶のような無機物質や、炭水素やアルコール, 芳香族化合物のような有機化合物など、幅広い物質を対象とした分子構造 ICT教材ライブラリ作成してきた(伊藤, 小原, 鎌田, 笠井, 2021; 笠井, 大宮, 反畑, 森, 2021)。

本ライブラリには、物質構造ICT教材として、結晶・分子構造の可視化プログラム「VESTA」(Momma, Izumi, 2011)で扱うことができるテキストファイルを公開している。使用者はこのファイルをダウンロードし、PCにインストールした「VESTA」上で開くことで、物質の正確な構造を閲覧することができる。また、各物質のページには、1つの分子または単位結晶格子を縦方向と横方向に回転させたアニメーション動画を掲載し、VESTAを使用できない環境、例えばタブレットでも分子構造の全体像を把握することができる。通信環境が備わっていない状態で授業を行う場合でも、動画を事前にダウンロードしておけば、ライブラリを活用できる。

これまでの研究では、本教材を使用した授業等の提案のみに留まっており、授業実践はほとんど行われていなかった。文部科学省が推進する GIGA スクール構想(文部科学省, 2020)により、児童生徒への「1人1台端末」が着実に進行している中で、これらの ICT教材の教育効果の検証や、より充実した内容の教材への発展が早急に求められている。さらに、高等学校学習指導要領(平成30年告示)には、化学の目標の

1つとして、「化学的な事物・現象に主体的に関わり、科学的に探究しようとする態度を養う」ことが挙げられており(文部科学省, 2019), 生徒の興味関心に応じて主体的に情報を収集できる物質のライブラリがあれば, 授業や探究活動などで活用されることが期待できる。

そこで本研究では, まずこれらの分子構造動画教材を高等学校の有機化学分野の授業で実践し, 有機分子の構造への理解に対する本教材の有効性について検証した。次に, 物質の構造のみならず, 性質・反応性・用途などの包括的な内容を含んだ物質構造データベースとして再構築し, 主に高等学校の化学分野で扱う物質をできるだけ網羅できるように物質数の拡充を行い, 物質構造ライブラリとして公開した (<https://sites.google.com/staff.miyakyo-u.ac.jp/crystals>)。さらに, このライブラリ中の「VESTA」用のテキストファイルやデータベース教材を, 高校生を対象とした大学での公開講座で実践し, 物質に対する生徒の理解度や主体性に関する教材の有効性について検証した。

## 2. 高等学校有機化学分野での授業実践

M高等学校1年生を対象として、「X線構造解析データによる分子模型を用いた分子構造の考察」の授業を4回実施した(計118名)。既習事項として, 炭素の原子価が4で, メタンが平面正方形ではなく正四面体であることを確認し, 平面から表現される構造式から, 分子の立体構造を捉えられるようになることをねらいとした。

分子の立体構造の学習には, 従来より組立式分子模型, 特に有機化学では原子を球, 結合を棒で表す球-棒モデルを使用することが多いが, 最も普及しているHGS®分子構造模型(丸善)の中でも入手しやすいセット(A型セット, 有機化学入門用)が1,600円(税別, 2021年12月現在)であり, 実際に1クラス分の生徒全員に行き渡る分子模型を揃えるのは容易ではないと思われる。そこで, 組立式分子模型のかわりに, 先述のICT教材が分子の立体構造の理解に役立つかどうかを授業実践で検証することとした。

M高等学校では, 生徒1人あたり1台のiPadを備えており, 通信環境も整っているため, 授業中にライブラリから目的の物質を検索し, 分子構造の回転動画を閲覧することとした。なお, 「VESTA」はPCでし

か動作しないため, これらの教材は使用しなかった。

授業概要を以下に示す。授業の導入において, 有機化合物の鏡像異性体(エナンチオマー)の人体に対する動態が異なることを, リモネンとメントールの鏡像異性体の臭気から実感させた(図1)。鏡像異性体とは, 右手と左手のように, 立体構造において空間的な配置が異なり, 実像と鏡像が同一ではない一対の異性体のことで, このような性質をキラリティという。鏡像異性体では, 偏光に対する性質以外はほとんどの物理的・化学的性質は同じであるが, 味やにおいなどの生理作用が異なることがある。リモネンの鏡像異性体のうち, (+)-リモネンはオレンジのような柑橘類の精油に多量に含有し, (-)-リモネンはハッカやミントなどのMentha属の精油中に存在する。メントールの鏡像異性体では, (-)-メントールはペパーミント特有の冷涼な臭気で, (+)-メントールは(-)-メントールより冷涼感が少なく甘みを帯びた臭気である(中島編著, 1995)。

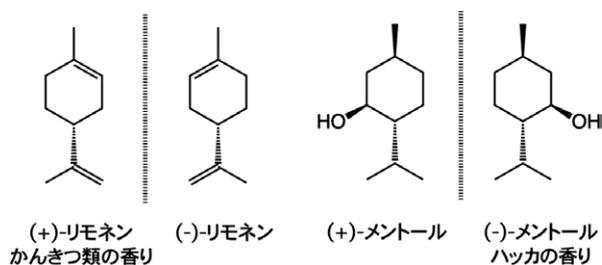


図1 リモネンとメントールの構造式

学習指導上工夫したことは, このほかに以下の点が挙げられる。

- ① 授業の導入・展開において授業内で取り組む事項の確認をペアと全体で行い, 目標と併せて確認した。
- ② ICT機器としてiPadを使用し, X線構造解析データによる分子模型(メタノールと酢酸の分子構造回転動画)を活用して生徒自身に分子構造の特徴に気づかせた。
- ③説明部分をiPadから投影し, 板書時間を削減するとともに生徒の対話活動の時間を保した。

授業の展開を表1に示す。ICT教材の有効性は, 授業前後での同一内容のテストとアンケート調査により評価した。テストにおける正解率の変化と, 授業後のアンケート集計結果を図2に示す。授業実践後にテストの正解率が上昇しており, アンケート結果からも,

表1 「X線構造解析データによる分子模型を用いた分子構造の考察」授業の展開

段階	学習活動と主な発問(●予想される生徒の反応)	形態	指導上の留意点
導入 (10分)	<b>1 既習事項の確認</b> ●元素記号を線でつないだものが構造式 ●メタンは正方形ではなく正四面体	一斉	構造式と分子の形について復習する。
	<b>2 本時のねらいの提示</b>	一斉	
平面で表現される構造式から、分子の形を捉えられるようになる。			
展開 (25分)	<b>3 分子のキラリティについて確認する</b>  ●構成原子が同じでも、異なる構造をもつものがある。	一斉	分子模型の写真をつかって、4つの異なる置換基と結合している炭素があれば鏡像異性体を持つことに気づかせる。
	<b>4 キラルな物質の人体へのはたらきを体感する</b>  ●リモネンは片方がレモンの香りがする。 ●メントールは片方がミントの香りがする。 ●必ずしもエナンチオマーの両方が人体に有益ではない。	個人	リモネンとメントールを用いて、その臭気を体感させる。 サリドマイド事件の話などから、医薬の分野においてはエナンチオマーの片方のみが人体に対して有効だが、もう片方は有害であることもあると教える。
	<b>5 分子の構造を予想する。</b>  ●全く分からない。 ●2個～8個までさまざま	ペア	酢酸とメタノールの構造式から分子の形を予想し、同一平面上に並ぶことができる原子の最大数を考えさせる。
	<b>6 X線構造解析データによる分子模型から分子の構造を考える。</b>  ●同一平面上に位置する原子の数は、単結合を回転させることで考えられる	個人	個人毎に iPad で笠井研究室の X 線構造解析データのページを検索し、それぞれ分子構造の詳細を確認する。
まとめ (15分)	<b>7 ロイロノートでアンケートを行い、まとめる</b>  ●分子構造がイメージしやすい ●同一平面上に位置する原子の数が分かる ●分子構造の解析がさまざまな場面で役に立っている	一斉	ロイロノートからアンケートを配布し、同一平面上に位置することができる原子の数についてもう一度答えてもらう。  答え合わせをしながら、X線構造解析と分子構造について話しながら本字のまとめを行う

分子構造への理解に役立った旨の記述があり、分子構造の回転動画教材が従来の組立式分子模型の代わりに使用できる可能性が示唆された。また、「組立式の分子模型よりも楽であった」との感想もあり、この点は従来の教材より優れていると思われる。

### 3. 物質構造ライブラリの再構築と拡充

従来のライブラリでは、Google ドライブにこれらの動画を掲載し、ホームページに埋め込んでいたが、動画の処理やページの読み込みに時間を要していた。宮城教育大学情報活用能力育成機構では、オンライン

授業などで動画を配信する際に、視聴者側の回線状況により自動的に画質を変更できるオンライン動画共有プラットフォーム「YouTube」を推奨していたため、本研究で再構築したライブラリでは動画を YouTube に掲載した。この YouTube 動画は、授業者や生徒が通信環境を備えた場所で、授業中にオンラインで使用することを想定している。

一方、YouTube では動画のダウンロードが困難であるため、ダウンロード用の動画は Google ドライブに掲載した。これにより、通信環境を備えていない場所での利用も、事前にダウンロードすることで可能と

### 授業前後のテストにおける正解率の変化

1. 酢酸分子において同一平面上に存在することができる原子は最大何個あるか。  
→ 31%から 55%に向上した。
2. メタノール分子において同一平面上に存在することができる原子は最大何個あるか。  
→ 32%から 78%に向上した。

### アンケート集計結果



3. この授業で学んだことをおしえてください (一部)
  - ・構造が鏡合わせになるだけで、人体に対して有害になったり有益になったりすること
  - ・いままでやってきた化学の計算とは異なり、物質そのものをイメージすることが難しく検討 (原文ママ) もつかなかった。分子の動画を見ることで分子構造のイメージが明確になりいろいろな見方で考えることができた
  - ・原子の立体的な構造を考慮することが、物質の仕組みや性質の違いを知ることに繋がると知った
4. 授業内で使用した教材について良かった点・悪かった点をおしえてください (一部)
  - ・3Dで見ることにより、分子構造のイメージがつかみやすかった
  - ・家でも授業内容が振り返られる
  - ・動画が回転していたことで結合の角度や結合がかぶっているところなどが判別できた
  - ・分子模型を組み立てなくて良いので楽だった

図2 「X線構造解析データによる分子模型を用いた分子構造の考察」授業のテストとアンケート集計結果

した。これは主に授業者が事前にダウンロードした動画を、授業で生徒に提示して使用することを想定している。

図3に物質構造ライブラリの様子を示す。これらは当研究室の単結晶X線構造解析装置での測定で得られた構造データより教材を作成した。有機化合物については、水素原子以外の原子の温度因子パラメータが記載されている構造データを用いて ICT教材を作成している。この温度因子パラメータは、結晶中での原子の熱振動の様子を楕円体で表示するもので、原子や分子の粒子性を実感できる教材となっている。

次にライブラリの拡充を図った。無償のデータベースに掲載されている物質を中心に物質の種類を増やして、従来はデータベースの結晶構造データと、当研究室での単結晶X線構造解析より得られた実測データより教材化した物質は50種類程度であったが、2021年9月21日時点の時点で150種類とした。その際に従来使用してきたデータベース (伊藤, 小原, 鎌田, 笠井, 2021)に加えて、以下の無償のデータベースを使

用した。

① 産業技術総合研究所研究情報公開データベース結晶構造ギャラリー  
<https://staff.aist.go.jp/nomura-k/japanese/itscgallery.htm>

② The Materials Project  
<https://materialsproject.org/>

本研究により物質数が大幅に増加したため、ライブラリのサブページを、当研究室の実測データについては「無機化合物」「有機化合物」「その他の物質」の3ページに、無償のデータベースの結晶構造データについては「無機化合物・金属結晶」「有機化合物 (脂肪族)」「有機化合物 (芳香族)」「有機化合物 (高分子など)」の4ページに再編成することで、教材ライブラリとしての利用しやすさの向上に取り組んだ (図4)。なお、実測データでは先述のように温度因子パラメータが含まれており、使用者はVESTAを用いて原子を熱振動楕円体として表示することができるが、無償データベースによる外部データの大部分には含まれていない。

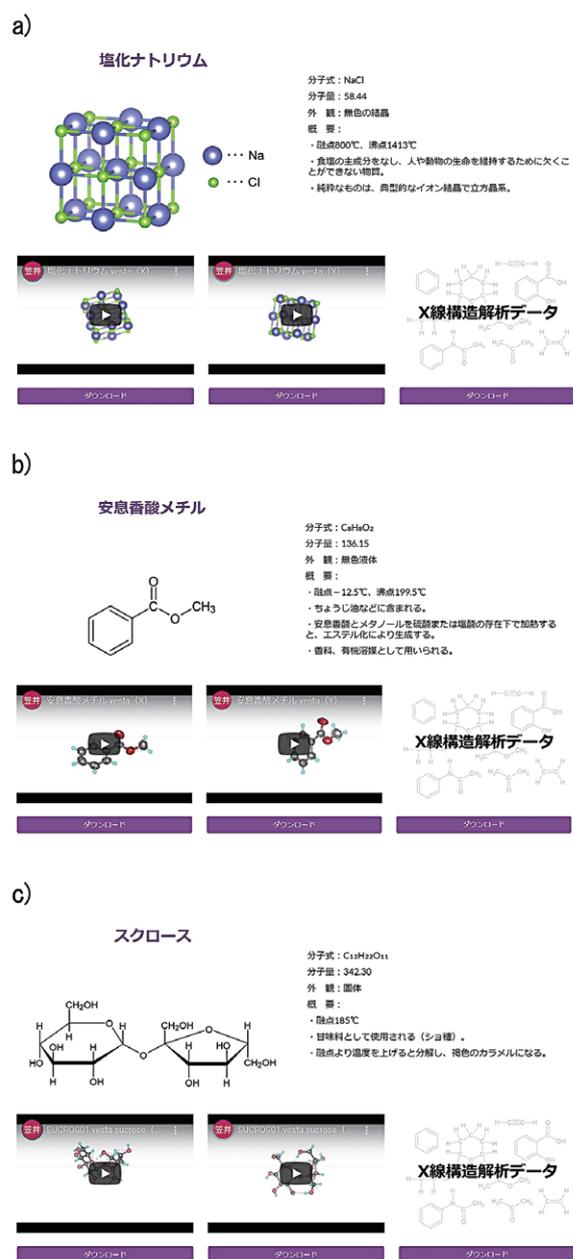


図3 物質構造ライブラリの様子 a) 塩化ナトリウム b) 安息香酸メチル c) スクロース, b) とc) では, 水素以外の原子を確率50%の熱振動楕円体で示す

また、ライブラリの目次にはVESTAで作成した結晶構造のイラストや、化学構造式描画ソフト「ACD/ChemSketch」で作成した構造式を掲載した。「ACD/ChemSketch」は、研究用や個人での使用であれば、有償パッケージと比較して機能が制限されている無償パッケージをインストールできる (Windows 64bitのみ, <https://www.acdlabs.com/resources/freeware/chemsketch/index.php>)。さらに、各物質のページには式量や外観、製法、利用法などの概要を記載した (O'Neil, 2013; 大木, 大沢, 田中, 千原 編, 1994)。

これらのライブラリの再構築と拡張によって、質・量ともに充実したものに更新することができた。各物質について構造式や物質概要を記載することで、ライブラリとしての機能性がより向上したといえる。中学校から高等学校の教科書 (東京書籍) に掲載されている物質の総数は、中学校の理科で65種類 (梶田ほか, 2000), 高等学校の化学基礎で107種類 (竹内ほか, 2017), 化学で480種類 (竹内 ほか, 2018) である。ただし、高等学校化学に掲載されている480種類の中には、中学校65種類と高等学校の化学基礎107種類の大部分が重複していることを考えると、従来の50種類ではライブラリとして明らかに不十分であろう。本研究での150種類でも十分な数ではないかもしれないが、480種類のうち、約30%を掲載することができた。特に有機化合物においては、中学や高等学校で学習する基本的な物質の大部分を掲載することができ、教育現場での効果的な活用、例えば有機化合物の立体構造から性質の違いを理解したり、身近な食品や医薬品などで興味関心を持った物質に関する探究活動で利用したりするなどの活用が期待できるものとなった。

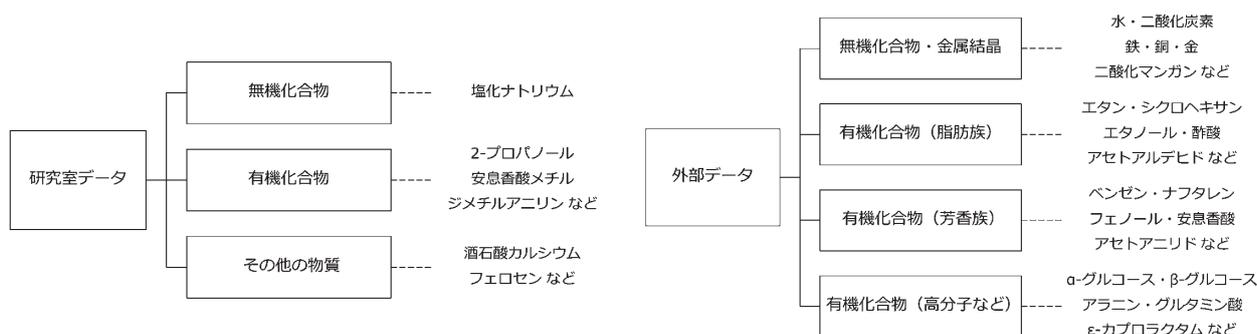


図4 物質構造ライブラリの構成

#### 4. 高校生を対象とした大学公開講座での教材実践

宮城教育大学公開講座「結晶中の有機分子を見てみよう」で参加した宮城県内の高校生7名(1年生3名, 2年生1名, 3年生3名)を対象として, 結晶構造データの ICT教材を VESTA で閲覧したり, ライブラリを用いて生徒の興味関心に応じて物質に関する情報収集したりする教材実践を行った。前半では, 身近な結晶化合物の理解を深めるために, ミョウバン, グルタミン酸ナトリウム(味の素®), 食塩, グラニュー糖の結晶を顕微鏡で観察した。また, 健康飲料に多く含まれるタウリン(2-アミノエタンスルホン酸)の結晶を取り出すため, タウリンをほとんど溶かさないうエタノールを加えて結晶化し, 顕微鏡観察で純粋なタウリンの結晶との比較を行った(笠井, 橋本, 小原, 渡辺, 2018)。後半では, 情報基盤推進室の PC を使用して, 結晶構造ライブラリに掲載している結晶構造のデータをダウンロードして VESTA で開き, 結晶の構造を見たり, 結合の角度や長さを調べてもらったりした。図5は VESTA で水(結晶の水, すなわち氷)の結晶構造データを可視化した様子で, 赤が酸素, 水色が水素を示し, 点線は水素結合を表す。2つの原子を選択すると結合距離が, 3つの原子を選択すると結合角度を下に表示することができる。参加者の中には, まだ化学基礎を履修しておらず, ベンゼンやトルエンなどの有機化合物を知らない生徒もいたため, 分子構造の理解が難しかったようであった。それに対し, 化学基礎を履修した生徒, 特に有機化学を履修している生徒には既知の有機化合物が多く, 高校の有機化学分野での既習事項を確認できたり, 結合距離や角度などの分子の正確な立体構造への理解を深めることができ

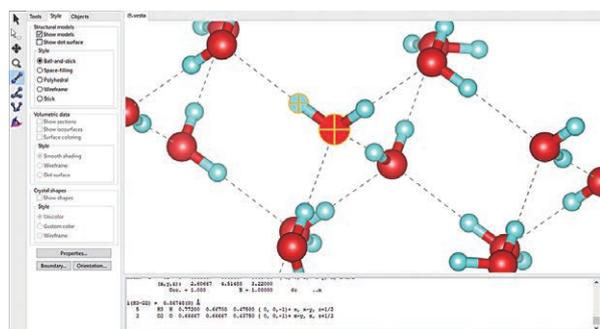


図5 VESTAによる氷の結晶構造データの可視化の様子。赤が酸素, 水色が水素を示し, 点線は水素結合を表す。

たりした。図6に, ワークシートに生徒が記入した分子構造の様子を示す。

また, ワークシートには生徒の興味関心に応じてライブラリを検索し, 構造や性質などの情報収集を行った様子があり, 授業者が提示していないクロロメタン, シクロプロパン, ヘキサクロシクロヘキサンの構造を詳しく調べた図や数値が記載されていた。

アンケート集計結果を図7に示す。ほとんどの生徒が「VESTA は使いやすかった」, 「VESTA を使用して分子構造に対する理解が深まった」と回答していた。さらに, 自由記述で「日常のものでも色々なことができることに興味が深まった」「もっと多くの物質の構造を見たい」など, 結晶や化学に関する一般的な興味関心を喚起できたと思われる記述が複数見られ, 分子構造 ICT教材とそのライブラリが有効である可能性が示唆された。一方で, VESTA を使用する際に構造データのテキストファイルを PC にダウンロードしなければならず, 手間がかかって使いにくいという感想もあった。現時点ではダウンロードなしで VESTA を使用することはできないため, 高校生向けの説明動画や資料などを作成する必要があると思われる。

#### 5. まとめと今後の展望

本研究では, まず分子構造の回転動画を用いて, 高等学校有機化学分野での授業実践を行い, 立体構造への理解に従来の組立式分子模型のかわりにこの教材が使用できる可能性が示唆された。また, GIGA スクール構想による「1人1台端末」の推進や, 平成30年

実践2: それぞれの物質の形, 結合の長さ, 結合の角度について調べよう。

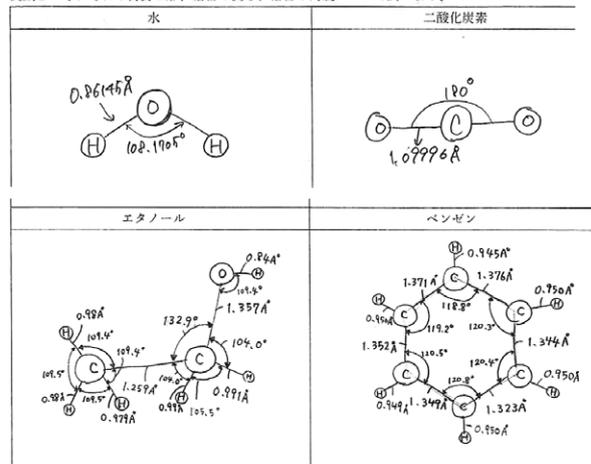
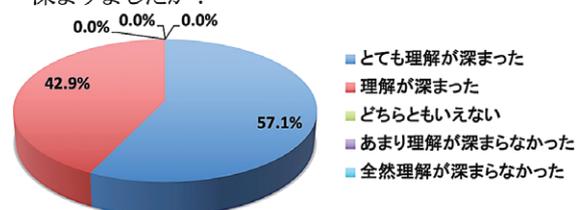


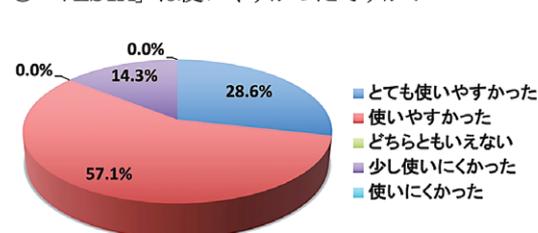
図6 生徒が記入した分子構造の様子

## 各項目に対する5段階評価 (抜粋)

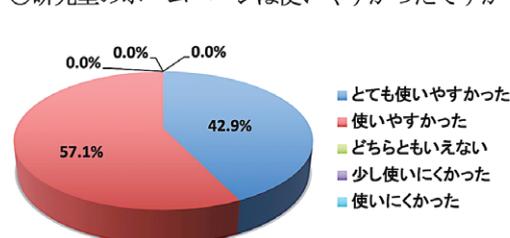
○「VESTA」を使用して、分子構造に対する理解が深まりましたか？



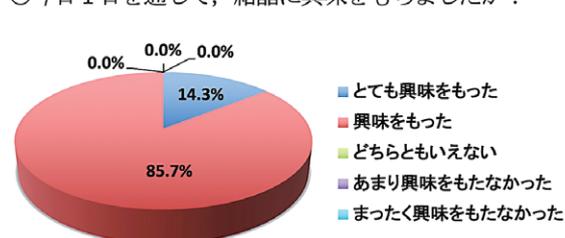
○「VESTA」は使いやすかったですか？



○研究室のホームページは使いやすかったですか？



○今日1日を通して、結晶に興味をもちましたか？



## 自由記述 (抜粋)

○「VESTA」は使いやすかったですか？ その理由を教えてください。

- ・数値がはっきり出てきたため。左側のマークが分かりやすかった。
- ・どれがどの機能なのか明確で、数字とかもどこで見ればいいのかも分かりやすかったから。
- ・立体感があり、見やすかった。
- ・角度や長さ、いろいろな事が出来たので使いやすいなと思いました。
- ・毎回ダウンロードをしなければいけないのが少し手間だと感じた。

○研究室のホームページは使いやすかったですか？ その理由を教えてください。

- ・物質名だけではなく構造が見て分かるように書かれていたし、ページを開いた時に物質の特色が書かれていて整理しやすかった。
- ・物質は紫色、文字は黒などの色のしきべつがあったから
- ・いろいろな分子構造があったり、たくさん情報があったので使いやすいと思いました
- ・物質の構造と名前があり見やすかったため。

○本日の感想

- ・結晶を観察してみて、形なども興味深かったが、エタノールとドリンクで結晶を取り出す実験の少しの刺激で結晶が変化するというのに興味をもち調べてみたいと思った。
- ・将来の事にも結晶が入りました。とても興味がでました。
- ・小、中、高と結晶については学んでいたものの、深くまではしなかったもので、最初のほうは難しいと思ったけど、友人との交流(考えを共有)や先生の解説で意外とすんなり理解ができた。
- ・今回、午前の講義で物質によって形が違うことを体感でき、またタウリンは有機溶媒には溶けず親水性である性質を用いた実験が面白かったです。午後には物質のことを平面上でしか知らず、また知ろうとあまりしていなかったのもっと多くの物質の構造も見かけたかったです。

図7 公開講座「結晶中の有機分子を見てみよう」アンケート集計結果

告示の学習指導要領で示されている主体的な関わりや探究しようとする態度が教科の目標の1つとされている中で求められるICT教材として、本研究で物質構造ライブラリの再構築と拡充を図った。主に高等学校の化学分野で扱う物質をできるだけ網羅できるように150種類の物質に拡充し、結晶構造に基づいた従来の分子や結晶構造のICT教材に加えて、結晶構造のイラスト、物質の構造式、式量、外観、製法、利用法などの概要を記載したライブラリとして再構築した。

このライブラリや、結晶・分子構造の可視化プログラム「VESTA」を使用した教材を用いて、高校生を対象とした大学公開講座での教材実践を行い、物質に対する生徒の理解度や主体性に関して有効である可能性が示唆された。

特に、分子や結晶構造の回転動画教材の効果は、100名以上を対象とした教材実践により有効である可能性が高いと思われるが、「VESTA」を使用した教材実践の対象が7名と少数であり、使いにくいという意

見もあったため、今後は教材やライブラリの改善を図りつつ教材実践を重ねていく必要がある。物質構造ライブラリの掲載物質の種類も今後拡充していく予定である。

## 付記

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た。論文は、大宮峻、反畑爽、森友康、笠井香代子(2021)「結晶構造データに基づいた化学物質ライブラリの構築」『令和3年度化学系学協会東北大会講演予稿集』p. 386と、反畑爽、山田聖、大宮峻、笠井香代子(2021)「X線結晶構造解析に基づく分子構造ICT教材を活用した高等学校有機化学分野における実践」『令和3年度化学系学協会東北大会講演予稿集』p. 384をもとに大幅にデータを追加した上で加筆修正し、山田が2., 大宮が3., 反畑が4. の原案を、その他を笠井が執筆し、著者5名全員で加筆修正した。教材実践は山田が2., 反畑が4. を実施した。教材とライブラリは大宮・反畑・森が分担して作成し、笠井が監修した。著者全員が利益相反はない。

## 参考文献

伊藤友広, 小原浩平, 鎌田康平, 笠井香代子(2021)「結晶構造データベースを利用した分子および結晶構造ICT教材の開発」『宮城教育大学情報活用能力育成機構研究紀要』Vol.1, pp. 29-34.  
猪熊康英, 藤田誠(2013)「常識を覆す結晶構造解析『結晶スポンジ』法」『化学』Vol. 68 (8), pp. 35-40.  
大木道則, 大沢利昭, 田中元治, 千原秀昭 編(1994)『化学辞典』東京化学同人  
O'Neil, M. J. ed.(2013)The Merck Index: An Encyclopedia of Chemicals, Drugs, and Biological, 15th ed., Royal Society of Chemistry  
笠井香代子, 山田聖, 奈良静(2017)「X線結晶構造解析による分子構造の Web教材の開発」『宮城教育大学情報処理センター研究紀要 COMMUE』Vol. 24,

pp. 15-18.

笠井香代子, 橋本樹, 小原典紘, 渡辺聡(2018)「身のまわりのものから取り出せる結晶性物質に関する教材開発(2) 食品に含まれる有機化合物をテーマとして」『宮城教育大学紀要』Vol. 53, pp. 159-166.  
笠井香代子, 戸田雄哉, 後藤太成, 高橋美沙輝, 鎌田真衣(2019)「X線結晶構造解析によるアルコールの分子構造教材を目指した細孔性錯体の構築」『宮城教育大学紀要』Vol. 54, pp. 177-184.  
笠井香代子, 橋本樹, 鎌田真衣, 藤原雄太, 緑川歩, 高崎大輝(2019)「X線結晶構造解析による分子構造ICT教材の開発」『日本科学教育学会研究会研究報告』Vol. 34 (1), pp. 51-54.  
笠井香代子, 大宮峻, 反畑爽, 森友康(2021)「結晶構造データベースを活用した分子構造ICT教材と実践研究」『日本科学教育学会研究会研究報告』, Vol. 35 (5), pp. 5-8.  
梶田隆章 ほか 134名(2020)『新しい科学 1~3』東京書籍  
竹内敬人 ほか 19名(2017)『改訂 化学基礎』東京書籍  
竹内敬人 ほか 20名(2018)『改訂 化学』東京書籍  
中島基貴 編著(1995)『香料と調香の基礎知識』産業図書  
橋本樹, 齋藤充志, 笠井香代子(2020)「細孔性錯体結晶による芳香族化合物の分子構造ICT教材の開発」『宮城教育大学情報処理センター研究紀要 COMMUE』Vol. 27, pp. 41-44.  
文部科学省(2019)「第5 化学」『高等学校学習指導要領(平成30年告示)』東山書房, pp. 114-117.  
文部科学省(2020)「(リーフレット) GIGA スクール構想の実現へ」[https://www.mext.go.jp/content/20200625-mxt\\_syoto01-000003278\\_1.pdf](https://www.mext.go.jp/content/20200625-mxt_syoto01-000003278_1.pdf) (2022年1月31日閲覧)  
Momma, K. and Izumi, F.(2011)VESTA 3 for three-dimensional visualization of crystal, volumetric and morphology data, Journal of Applied Crystallography, Vol. 44, pp. 1272-1276.