

分子科学研究所 協力研究申請の記載内容について

NOUS 上での「研究目的と実施計画」欄において記載内容が不十分な申請が散見されます。

各施設において受付をする施設利用とは異なり，協力研究は共同利用委員会において所内外の幅広い領域の委員によって審査されますので，申請にあたっては各研究領域や申請課題周辺の固有の状況・事情を前提とせず，広く別領域の研究者にも理解される記載を心がけてください。

特に「(2) 実施計画」において「使用機器及びこの研究を分子科学研究所で実施することの必要性，所内対応者（分子研）がどのように関わるかを具体的に記入してください」という要求に十分な記載がない申請が目立ちます。以下の例を参考に一般性と具体性を併せ持った記述をお願いいたします。

(1) 研究目的（記述例）

光学活性化化合物の自在な合成（不斉合成）は医薬・農薬・電子材料などの供給に貢献してきた。中でも有機分子の骨格をなす炭素-炭素結合を触媒的に不斉合成する新反応開発は重要な課題である。申請者は分子科学研究所が開発した BINAP-Ru 錯体を触媒的不斉炭素-炭素結合に適用展開し，特に不斉4級炭素の高選択的な構築を達成する。具体的にはアセトフェノンに代表される一連のアリアルアルキルケトンへのビニル基の付加反応を BINAP-Ru 錯体触媒を用いて実施し，不斉誘起の可能性を探る。また同反応の反応機構について高磁場 NMR，UVSOR を含む各種分光分析手法によって解析し，また DFT 計算による反応機構解析も試みる。

(2) 実施計画（記述例）

具体的には分子研・川井Gが開発した各種 BINAP-Ru 錯体を利用し，申請者が開発したアセトフェノンのビニル化反応に適用する。アセトフェノンの芳香環上に多様な置換基を導入することで反応に対する電子的效果を評価し，触媒錯体の最適化・精密設計に繋げる。反応の分光学的解析及び計算科学的解析には，賀屋Gが開発した NMR-KAYAZY 測定及び小峯Gによる 4D-RYSM 理論による計算を利用する。また UVSOR における XAFS 測定（BL8M 利用）においては大杉Gと協働する。本研究推進にあたっては申請者が独自に開発した反応系に対し，分子研チーム（川井（受入対応教員），賀屋，小峯，大杉）が錯体創製・提供（川井），分光分析（賀屋），計算化学（小峯），XAFS 測定（大杉）において各々協働する。各協働項目は分子研チームの参加者が独自に開発した分子や手法を必要としており，分子研との協力研究が必要不可欠である。特に対応教員（川井）は不斉触媒創製において世界のトップランナーであり国際的にみても最適の協力研究パートナーである。また BL8M は一般施設利用のラインとは異なる協力研究ビームラインであり，同ラインにおいて大杉Gが開発した溶液フローセルを利用する測定が研究対象とする触媒反応の機構解析において必須である。同観測によって世界に先駆けて C-O 結合の直接測定による求核付加反応における芳香環上置換基の電子効果の評価が実現する。