

仕 様 書

1. 件名

ケイ素化合物合成

2. 研究の概要

国立研究開発法人産業技術総合研究所触媒化学融合研究センター（以下、「産総研」という。）は、水素結合性無機構造体（HIF）を開発し、HIF を用いた革新的な材料開発に向けた取り組みを行っている。本件では、当該 HIF の原料であるシリカの合成を行う。

3. 合成作業の概要

本化合物は当該研究開発における原料となるものである。本件では、当該研究開発の材料開発を加速することを目的とし、産総研では達成できないスケールにおける合成作業である。

4. 合成の化合物

4-1. $Q_{12}K_{12}$

5. 化合物仕様

5-1. $Q_{12}K_{12}$

- ① $Q_{12}K_{12}$ を 100L の反応装置を用いて、20kg 程度合成し単離すること。
※誤差については±2kg 以内を許容する。
- ② 合成・単離方法は別紙に記載の方法によること。
※別紙については機密性が高いため、秘密保持誓約書を提出した者にのみ公開する。
- ③ 「6. 支給品」に記載の原料以外に必要なものは請負者にて用意すること。
- ④ 1H , ^{29}Si NMR を測定し、 $Q_{12}K_{12}$ であることを確認すること。
- ⑤ 極力水分に接触しないように密閉梱包し、納入すること。
- ⑥ 合成・単離後の化合物の写真も納入すること。その際、重量が分かるように撮影すること。

6. 支給品

- | | |
|----------------------------------|--------|
| ・水酸化カリウム（関東化学社製、粒状） | 6.5kg |
| ・テトラメトキシシラン（コルコート社製） | 15kg |
| ・ α -シクロデキストリン（日本ガーリック社製） | 12.5kg |
| ・アセトニトリル（関東化学社製） | 70kg |

※合成に使用しなかった分は請負者で処分すること。

7. 確認試験

精製操作を行い単離した後に、 ^1H NMR および ^{29}Si NMR を測定した結果をスペクトルにより、目的化合物であることを調達請求者が確認する。また、フェノールフタレイン溶液を用い、酸で中和滴定を行う事で組成を確認し、分析結果を提出すること。

8. 納入の完了

「9. 納入物品」に記載された納入物品が過不足なく納入され、仕様を満たしていることを確認して、納入の完了とする。

9. 納入物品

- (1) $\text{Q}_{12}\text{K}_{12}$ 20kg 程度
- (2) $\text{Q}_{12}\text{K}_{12}$ の ^1H NMR, ^{29}Si NMR スペクトル 一式
- (3) 単離した重量が分かる写真の画像データ (ファイル形式 .JPG) 一式
- (4) 中和滴定の分析結果 一式

10. 納入期限及び納入場所

納入期限：2025年2月28日

納入場所：茨城県つくば市東1-1-1

国立研究開発法人産業技術総合研究所 触媒化学融合研究センター
つくばセンター中央事業所5群 5-2棟 6310室

11. 付帯事項

- ①本仕様書の技術的内容および知り得た情報に関しては、守秘義務を負うものとする。
- ②本仕様書の技術的内容に関しては、調達請求者と協議すること。
- ③本仕様書に定めのない事項および疑義が生じた場合は、調達担当者と協議のうえ決定する。

以上