

## 仕様書

1. 件名 新規イメージング剤候補化合物及び前駆体の合成作業
2. 数量 7種、50ミリグラム
3. 化学物質種：化学構造式の詳細は秘密保持誓約書の提出後に別紙にて開示する。
  - (1) 化合物Ⅰ：ピロロピリジン骨格にアザインドールを有する化合物の前駆体
  - (2) 化合物Ⅱ：キナゾリン骨格にフルオロ基を有する化合物の前駆体。
  - (3) 化合物Ⅲ：キナゾリン骨格にメチル基を有する化合物の前駆体。
  - (4) 化合物Ⅳ：アザインドール骨格にスルホンアミド、ピラゾールを有する化合物の前駆体。ピラゾールを有する化合物。
  - (5) 化合物Ⅴ：アザインドール骨格にスルホンアミド、ピラゾールを有する化合物の前駆体。メチルピラゾールを有する化合物。
  - (6) 化合物Ⅵ：ベンゼンとピロールを有する三環性骨格を母核とする化合物。
  - (7) 化合物Ⅶ：化合物Ⅵの前駆体。
4. 目的 新規イメージング剤開発に必要な標品、前駆体化合物として使用する。
5. 必要とする実績・条件
  - ① 本化合物を合成するために必要な精製装置である高速液体クロマトグラフィー、分取超臨界流体クロマトグラフィーを自社で所有し、精製できること。
  - ② 本化合物を合成するために必要な分析機器である核磁気共鳴 (NMR)、質量分析装置 (MS)、示差走査熱量計 (DSC)、X線回折装置 (XPRD)、誘導結合プラズマ質量分析装置 (ICP-MS) を自社で所有し、分析できること。
  - ③ 自社で化合物合成に加え、創薬研究に関する試薬管理、スクリーニング試験、薬物動態試験が実施できる施設を有すること。
  - ④ 日本国内で要求者と緊密な連絡を取りながら、化合物合成の最適化検討に関する進捗報告が逐次できること。
  - ⑤ 化合物合成の最適化検討を円滑に進めるため、契約期間内に契約期間内において、要求者が検索ツールである reaxyx や SciFinder の使用が可能であること。
6. 納入期限 令和8年3月13日
7. 納入場所 千葉市稲毛区穴川 4-9-1  
国立研究開発法人量子科学技術研究開発機構  
量子医科学研究所 探索研究棟 3階 N301居室
8. 納入条件 持込渡し

## 9. 仕様・性能

以下の条件を満たすこと

- ・ 化学的純度は 95%以上 (HPLC) を目標とする。
- ・ 秤量可能な粉体であることが望ましい。

## 10. 納品物

- |                               |     |
|-------------------------------|-----|
| ① 化合物                         | 納品時 |
| ② 純度検定結果 分析チャート (電子データ 1 式含む) | 納品時 |
| ③ 合成報告書 化合物 1 種あたり 1 部        | 納品時 |

- ・ 合成の過程で生じた成果化合物 (中間体) もあわせて納品すること。
- ・ 目的物の合成に失敗した時は、その旨の報告書と得られた中間体などを納品すること。

## 11. 検査条件

納入完了後、当機構職員が所定の要件を満たしていることを確認したことをもって検査合格とする。

## 12. グリーン購入法の推進

- (1) 本契約において、グリーン購入法 (国等による環境物品等の調達の推進等に関する法律) に適用する環境物品 (事務用品、OA 機器等) の採用が可能な場合は、これを採用するものとする。
- (2) 本仕様書に定める提出図書 (納入印刷物) については、グリーン購入法の基本方針に定める「紙類」の基準を満たしたものであること。

## 13. 協議

本仕様書に記載されている事項及び本仕様書に記載のない事項について疑義が生じた場合は、量研と協議のうえ、その決定に従うものとする。

## 14. その他：

- ・ 化合物の分析チャート (NMR、HPLC) で目的の構造を有する化合物が得られたことを示唆する資料を納品時に提出すること。
- ・ 合成の進捗に関する報告を逐次行い、報告時に資料を提出すること。
- ・ 納入完了後 10 日を超えて見出された契約不適合については、受託者は担保責任を負わない。
- ・ 本仕様書に記載のある事項について疑義のある場合は、当機構職員と協議の上、その決定に従うこと。
- ・ 受注者は業務を実施することにより取得した当該業務及び作業に関する各データ、技術情報、成果その他のすべての資料及び情報を量研の施設外に持ち出して発表もしくは公開し、または特定の第三者に対価をうけ、もしくは無償で提供することはできない。ただし、あらかじめ書面により量研の承認を受けた場合はこの限りではない。

(要求者)

部課 (室) 名：量子医科学研究所

脳機能イメージング研究センター

脳疾患トランスレーショナル研究グループ

使用者：樋口 真人  
担当者：水間 広