

平成 26 年度 未来研究ラボシステム 研究成果報告書

研究種目：個人研究

研究期間：平成 26 年 10 月～平成 27 年 3 月

研究課題名：光励起三重項状態の電子スピンをを用いた動的核偏極による超高感度液体 NMR
ラボ長

所属：システム創成専攻・電子光科学領域

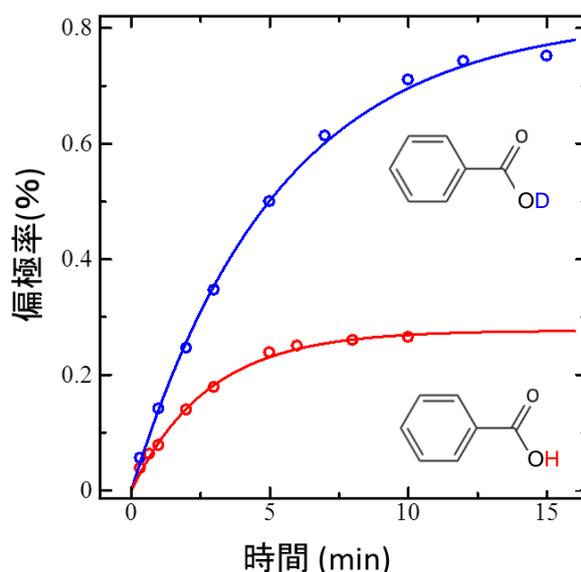
氏名：根来 誠

研究成果（当初の研究目的と得られた結果を記載してください。図表を含め 2 ページ程度）：

マイクロ波を照射することで核スピン偏極率を向上させる動的核偏極 (DNP) と呼ばれる方法が、NMR 分光の感度を向上させる方法として、現在盛んに研究されている。なかでも光励起三重項状態の電子スピンをを用いた動的核偏極 (トリプレット DNP) 法は、試料を室温に保ったまま一万倍以上の高感度化が可能になる手法として注目されている。しかしながら、この手法によってこれまでに高感度化、高偏極化された物質は *p*-ターフェニル単結晶などの水に不溶な固体試料のみであった。そこで本研究では水に可溶性物質の高偏極化を実現し、高偏極化後に水に溶かして超高感度液体 NMR が可能であることを実証し、MRI の超高感度化の道を拓くことを目的とする。

平成 26 年度では、水に可溶性安息香酸単結晶の高偏極化の実現を目指した。安息香酸を再結晶法とゾーンメルト法により精製し、ブリッジマン法によって 0.01 mol% ペンタセンをドープした単結晶を作成した。トリプレット DNP を行うことで安息香酸単結晶の水素核スピンの偏極率を 0.26% まで向上することに成功した (図)。この時のスピン格子緩和時間は 4.3 分であった。スピン格子緩和時間を長くすることができれば、トリプレット DNP での最終到達偏極率は高くなる。安息香酸単結晶でのスピン格子緩和は、水素結合により振動しているカルボキシル基の水素核スピンの主原因と考えられる。そこで、安息香酸を重水で再結晶化することにより、カルボキシル基の水素だけを重水素化したもので試料を作成した。この試料ではスピン格子緩和時間が 7.5 分に伸び、0.75% の水素核スピン偏極率を達成した (図)。これは標準的な MRI の環境である 1.5 T、室温下の熱平衡状態の偏極率の約 1500 倍に相当する。また、現在使用しているものよりもパルス長が長いレーザーを使用することで、さらなる高偏極化が可能であることをシミュレーションによって示した。

安息香酸は常温の水 100 cc には 0.3 g しか溶解できないが、約 80 °C の炭酸ソーダ水 100 cc には 8 g 溶解できることが分かった。平成 27 年度では、高偏極化後に溶解した試料を用いて、超高感度液体 NMR 分光の実現を目指す。



図：トリプレット DNP による安息香酸単結晶の水素核スピン偏極率向上の様子 (青：安息香酸、赤：カルボキシル基を重水素化した安息香酸)

キーワード：NMR 分光、MRI、動的核偏極

研究経費（H26 年度）の内訳

備品費	消耗品費	旅費	謝金	その他	合計
円	492,290 円	7,710 円	円	円	円

共同研究者等

(1) 共同研究者（氏名・所属）

(2) 研究協力者（氏名・所属・学年（学生の場合））

発表論文等（平成 27 年 3 月 31 日現在）

〔雑誌論文〕 なし

〔著書〕 なし

〔学会発表〕 なし

〔その他〕 なし

外部資金獲得状況・申請状況（本研究課題に関連して、科研費、JST 等の競争的資金、受託研究、奨学寄付金を受給された場合、また、申請された場合はその状況を記入ください）

科研費・挑戦的萌芽研究（研究代表者）2014 年度配分額：1690 千円

「光励起三重項電子を用いた動的核偏極による NMR 分光高感度化の汎用性向上」

科研費・新学術領域（連携研究者）申請中

「分子スピン量子多体系の創成と制御」

科研費・基盤研究 A（連携研究者）申請中

「光励起三重項電子を用いた動的核偏極による超高感度 NMR 分光の実現」

科研費・若手研究 A（研究代表者）申請中

「常温核スピン偏極技術：トリプレット DNP」

参考となるHP等

http://www.qc.ee.es.osaka-u.ac.jp/~qc/index_j.html