

平成 27 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 27 年 4 月～平成 28 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 3 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。熱平衡状態の電子スピンを偏極源に用いる従来の DNP 法では、一万倍以上の高感度化を実現するために 4.2 K 以下の極低温と 2 T 以上の高磁場を用いていた。一方で光励起三重項状態の電子スピンを偏極源に用いた DNP (トリプレット DNP) 法では、試料を室温に保ったまま低磁場下でも一万倍以上の高感度化が可能である。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、さらに、試料の位置選択的重水素化により 0.75% の水素核スピン偏極率を達成した。

平成 27 年度では、安息香酸粉末の高偏極化を目指し、その溶解実験、液体 NMR 実験の実現を目指した。0.01mol% ペンタセンをドープした安息香酸の粉末において、水素核スピン偏極率を 0.13% まで高めることに成功した (図 1)。単結晶よりも低くなってしまった理由は二つ考えられる。一つは、粉末化プロセスでの不純物混入やメカノケミカル効果等に起因して、スピン格子緩和時間が二割程度短くなってしまったからであると考えている。もう一つは、単結晶と異なり、ペンタセン分子の磁場に対する配向がランダムになってしまったからであると考えている。これにより試料中のそれぞれのペンタセンで DNP の最適条件 (マイクロ波の周波数や強度など) が異なり、試料全体で考えると DNP の効率が落ちてしまうと考えられる。今後、数値的手法などを通じて、粉末状試料に適応した DNP 条件を探索することが今後の課題として挙げられる。

高偏極液体 NMR 実験の実現を目指し、安息香酸をトリプレット DNP で高偏極化した後にソーダ水で溶解し、即座に NMR 測定が行える装置を開発した。この装置を用いて、高偏極化された安息香酸ナトリウムの液体 ¹H NMR 信号の取得に成功した。

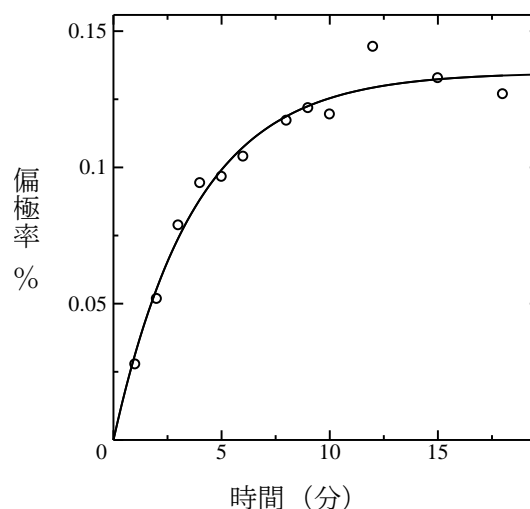


図 1: トリプレット DNP による安息香酸粉末の水素核スピン偏極率向上の様子

キーワード：NMR 分光、MRI、動的核偏極

研究経費（H27 年度）の内訳

備品費	消耗品費	旅費	謝金	その他	合計
0 円	350,000 円	0 円	0 円	0 円	350,000 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 28 年 3 月 31 日現在）

〔雑誌論文〕 Yung Szen Yap, Yutaka Tabuchi, Makoto Negoro, Akinori Kagawa, Masahiro Kitagawa, " A Ku band pulsed electron paramagnetic resonance spectrometer using an arbitrary waveform generator for quantum control experiments at millikelvin temperatures" Rev. Sci. Instrum. 86, 063110 (2015).

〔著書〕 Masahiro Kitagawa, Yasushi Morita, Akinori Kagawa, Makoto Negoro, " Quantum Information Processing Experiments Using Nuclear And Electron Spins in Molecules" pp.587-603 in Principles and Methods of Quantum Information Technologies (Springer 2016).

〔学会発表〕 根来誠、中村謙太、米井佑、田渕豊、北川勝浩、「数値最適化選択的デカップリングパルスの固体 NMR 実験」日本物理学会第 71 回年次大会、東北学院大学、2016 年 3 月 20 日

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、奨学寄付金等を受給された場合、また、申請された場合はその状況を記入ください）

大阪大学 UIC ギャップファンド、平成 27 年度、採択

NMR 分光や MRI を一万倍高感度化するための低価格卓上トリプレット DNP 装置の開発

AMED 橋渡し研究加速ネットワークプログラム新規 A シーズ

常温核スピン偏極技術によるリアルタイム in vitro 代謝測定の実現

参考となるHP等

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