

零磁場分裂パラメーターを制御した偏極源による高効率トリプレット超核偏極

(九大院工¹・理研仁科セ²・京大院理³・JST創発⁴) ○坂本 啓太¹・濱地 智之¹・立石 健一郎²・上坂 友洋²・倉重 佑輝³・御代川 克輝³・楊井 伸浩^{1,4}

Highly Efficient Triplet Dynamic Nuclear Polarization by Polarizing Agents with Controlled Zero-Field Splitting Parameters (¹Grad. Sch. Eng., Kyushu Univ., ²RIKEN Nishina Center for Accelerator-Based Science., ³Grad. Sch. of Scie., Kyoto Univ ⁴FOREST, JST) ○Keita Sakamoto¹, Tomoyuki hamachi¹, Kenichiro tateishi², Tomohiro Uesaka², Yuki Kurashige³, Katsuki Miyokawa,³ Nobuhiro Yanai^{1,4}

Triplet dynamic nuclear polarization (triplet-DNP) is a method to achieve the nuclear hyperpolarization by transferring polarization from triplet electron spins to nuclear spins. However, large nuclear spin polarization can only be obtained with single crystals with controlled polarizing agents orientation that exhibit sharp ESR spectra, and this hinders their practical application. In this study, in order to achieve highly efficient triplet-DNP independent of molecular orientation, we propose a new approach to sharpening ESR spectra based on the design of polarizing agents.

Keywords : Dynamic nuclear polarization; Triplet excited state; Nuclear magnetic resonance

光励起三重項電子を利用した動的核偏極法 (triplet-DNP) は温和な条件下で NMR の感度を向上させる手法である。Triplet-DNP で高い核スピンの偏極を得るためには先鋭な ESR スペクトルを利用することが重要である。そのためにこれまでは偏極源分子の配向を厳密に揃えた単結晶が用いられてきたが、単結晶中に真に有用なターゲット分子を導入することが困難であり、応用の妨げとなっていた。そこで本研究では偏極源の電子構造に着目した分子設計により、応用に重要なガラスマトリックス中において無配向でも ESR スペクトルの先鋭化することで triplet-DNP の高効率化を目指す。

新規偏極源分子としてペンタセンにチエニル基を修飾した 6,13-di(thiophen-2-yl)pentacene (DTP) を合成した。その結果 ESR スペクトルを先鋭化させることに成功した。重水素化した *o*-terphenyl (OTPd) に DTP をドープしたサンプルで triplet-DNP を行ったところ最終偏極率 7.5% (Enhancement factor : 10500) を達成し、これまでの最高値である 1.5%²⁾を大きく上回る値を得ることに成功した。

1. Takeda, K. et al., *J. Phys. Soc. Jpn.*, **2004**, 73, 2319-2322.
2. Tateishi, K. et al., *Angew. Chem. Int. Ed.*, **2013**, 52, 13307-13310.

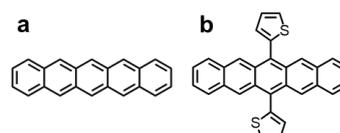


Fig. 1 Chemical structure of a) Pentacene, b) DTP

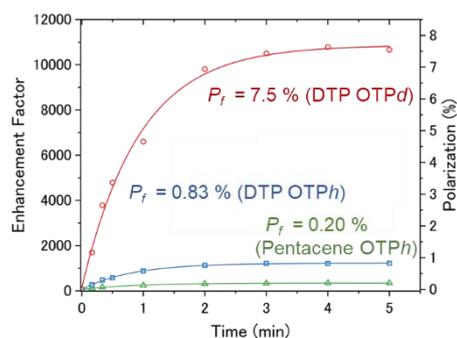


Fig. 2 Build up curve of ¹H signal intensity