

生態応用を志向した核偏極 NMR 分子プローブの開拓

(東大院工¹) 山東信介¹

Development of Hyperpolarized NMR Molecular Probes for Biological Applications

(¹*Graduate School of Engineering, The University of Tokyo*) ○Shinsuke Sando¹

Techniques for measuring the dynamic behavior of molecules in living organisms, i.e., metabolism, are important for understanding the essence of life as molecules, and for elucidating the causes and results of diseases induced by the aberrant activities. We have been working on the development of molecular probes using nuclear magnetic resonance (NMR) as a measurement modality, and especially on the development of hyperpolarized NMR molecular probes that achieve dramatically higher sensitivity.

On the other hand, hyperpolarized NMR molecular probes have the problem of "polarization relaxation". Hyperpolarized state quickly decays back to the thermal equilibrium state under the physiological conditions. Our research group has been addressing this problem from the viewpoint of molecular design. Specifically, we have revealed the correlation between molecular structure and nuclear spin relaxation, attempted to design molecular structures that are less prone to polarization relaxation, and proposed various ¹³C and ¹⁵N long-lived hyperpolarized molecular scaffold¹⁾. In addition, we have succeeded in developing several hyperpolarized molecular probes. In this talk, I would like to preset our efforts toward the realization of hyperpolarized NMR molecular probes as well as the future prospects.

Keywords : NMR; Molecular Probe; Imaging; Hyperpolarization

生体における分子の動的な挙動(＝代謝)を計測する技術は、分子から構成される生命の本質の理解、並びにその異常が引き起こす疾病の原因や結果を解明する上で重要である。我々は、生体における分子計測を目指し、核磁気共鳴(NMR)を計測モデルティーとする NMR 分子プローブの開拓、特に劇的な高感度化を実現する核偏極 NMR 分子プローブの開拓に取り組んできた。

一方、核偏極 NMR 分子プローブには、偏極緩和という問題点があった。偏極状態の分子プローブは生理条件下において速やかに緩和し、熱平衡状態に戻ってしまう。演者らの研究グループでは、分子デザインの観点から、本問題に取り組んできた。具体的には、分子構造と核スピン緩和の相関を明確にし、偏極緩和が起こりにくい分子構造の探索に挑戦し、様々な ¹³C、¹⁵N 長寿命核偏極分子骨格の提案を実現した¹⁾。さらに、生体応用可能な核偏極分子プローブの開拓にも成功している。本講演では、核偏極 NMR 分子プローブの実現に向けた試行錯誤とともに、今後の展望についてもお話したい。

1) [Review] Design of Nuclear Magnetic Resonance Molecular Probes for Hyperpolarized Bioimaging. Y. Kondo, H. Nonaka, Y. Takakusagi, S. Sando, *Angew. Chem. Int. Ed.* **2021**, 60, 2.

日本化学会学術賞を受賞するにあたり、お世話になった先生、共同研究者、本研究を精力的に実施してくれた研究室スタッフ、メンバーに心より感謝します。