

光励起三重項電子スピンを用いた混晶の室温核スピン超偏極

(徳島大学¹・大阪大学²) ○佐藤 晴紀¹・宮西 孝一郎²・根来 誠²・香川 晃徳²・中村 浩一¹・犬飼 宗弘¹

Hyperpolarized NMR for cocrystals at room temperature using photoexcited triplet states electron spins (¹Tokushima University, ²Osaka University) ○Haruki Sato,¹ Koichiro Miyanishi,² Makoto Negoro,² Akinori Kagawa,² Koichi Nakamura,² Munehiro Inukai¹

Hyperpolarized nuclear magnetic resonance (NMR) using dynamic nuclear polarization with photo-excited triplet states electron spins (Triplet-DNP) provides high sensitive NMR signals up to ~ 100-10000 times at room temperature. In this study, we demonstrated Triplet-DNP of cocrystals composed of two types of organic molecules, which is applied in drugs and functional solids. We synthesized a cocrystal composed of benzamide, benzoic acid, and pentacene (polarizing agents). The cocrystal showed a polarization ratio of P=0.2% (1500 times at room temperature).

Keywords : Nuclear magnetic resonance; Dynamic nuclear polarization; cocrystal

核スピンの偏極率を向上させる手段の一つに光励起三重項状態の電子スピンを用いた動的核偏極法 (Triplet-DNP) が挙げられ、室温・低磁場で巨大な偏極率を得ることができ、NMR 測定感度を大幅に向上させることができる¹⁻²⁾。しかしながら、偏極源であるペンタセンは溶媒に難溶のため、適用範囲例が限られている。これまでに、それら課題解決に向けて、可溶性ペンタセンや共晶法などの新たな方法が提案されている³⁾。

本研究では、創薬や機能性有機物に応用されている混晶 (2 種類以上の有機低分子が混じる結晶) の Triplet-DNP に取り組んだ。デモンストレーションとして、多くの医薬品の基本骨格であるベンズアミドと安息香酸にペンタセンを添加した混晶を合成した。XRD により、ベンズアミドと安息香酸が固溶した構造であることが確認できた。得られた混晶の室温における Triplet-DNP の最大偏極率は、偏極率 P=0.2% (1500 倍の感度向上) であった (Fig.1)。

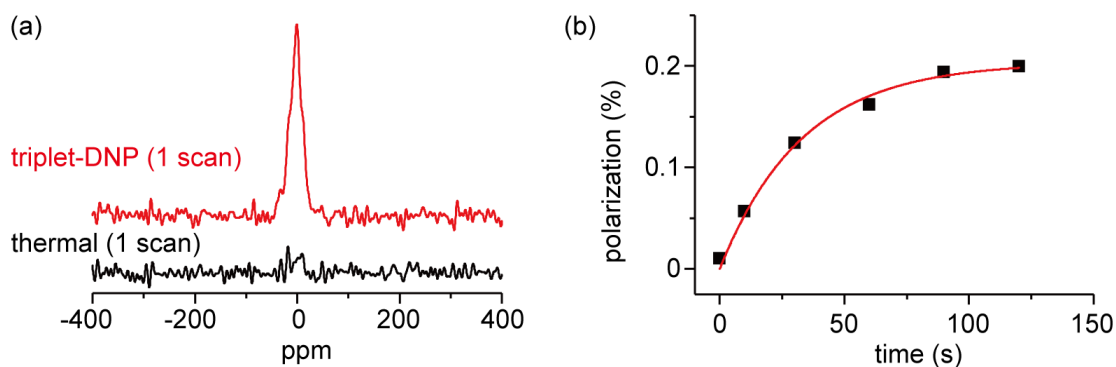


Fig.1. (a) ¹H NMR signals and (b) polarization buildup curve at room temperature.

1) *Chem. Phys. Lett.* 1990, **165**, 6-10. 2) *Proc. Natl. Acad. Sci. U. S. A.* 2014, **111**, 7527-7530. 3) *J. Phys. Chem. Soc.* 2018, **140**, 15606-15610.