

ガラスホストを用いた低温トリプレット DNP による ^{19}F スピンの高偏極化

(阪大院基¹・名大院情²・愛工大工³・大阪大学先導的学際研究機構量子情報・量子生命研究センター⁴・JST さきがけ⁵) ○今若 寛己¹・畑中 悠子⁴・宮西 孝一郎¹・香川 晃徳^{1,4,5}・根来 誠⁴・塚本 眞幸²・村田 剛志³・森田 靖³・北川 勝浩^{1,4}

Hyperpolarization of ^{19}F spins by triplet DNP using glassy matrix at low temperature (¹*Graduate School of Engineering Science, Osaka University*, ²*Graduate School of Informatics, Nagoya University*, ³*Faculty of Engineering, Aichi Institute of Technology*, ⁴*Center for Quantum Information and Quantum Biology Division, Institute for Open and Transdisciplinary Research Initiatives, Osaka University*, ⁵*JST, PRESTO*) ○Hiroki Imawaka,¹ Yuko Hatanaka,⁴ Koichiro Miyanishi,¹ Akinori Kagawa^{1,4,5}, Makoto Negoro⁴, Masaki Tsukamoto², Tsuyoshi Murata³, Yasushi Morita³, Masahiro Kitagawa^{1,4}

The sensitivity of NMR/MRI depends on the number of nuclear spins and the nuclear spin polarization in the sample. Dynamic nuclear polarization (DNP), a technique that transfers high electron spin polarization to nuclear spins using microwave irradiation, has been implemented to enhance the low NMR/MRI sensitivity. DNP using optically polarized triplet electrons (Triplet-DNP) is a promising candidate to polarize the nuclear spins because the polarization of triplet electrons does not depend on the magnetic field strength and temperature. However, the low dopability of pentacene limits the applicability of the triplet-DNP to NMR and MRI.

In this study, we used diphenyl sulfoxide (DPSO) as a new glassy host molecule to which pentacene can be doped. DPSO is a polar molecule that can mix with target molecules of interest at a ratio of one to one while maintaining the pentacene-doped glassy state. The achieved polarization of ^{19}F of RNA polymerase inhibitors was 0.31%, 1007 times larger than the ^{19}F spin polarization in thermal equilibrium at 0.4 T and 120 K.

Keywords : Triplet-DNP; Glassy Matrix; Pentacene

NMR/MRI の感度は、観測対象の核スピン数と核スピンの揃い具合を示す偏極率に比例する。低い核スピン偏極率を向上させる方法として、高い電子スピン偏極率をマイクロ波照射によって核スピンへと移す動的核偏極 (DNP) が注目されている。我々は、ペンタセン分子にレーザーを照射すると磁場強度や温度に依らず高い偏極率を持つ三重項状態電子が生成されることを利用し、これを偏極源とする Triplet-DNP の研究を行っている。これまで、ガラスホストや共晶を用いることで、ペンタセンを直接ドーブできない分子の Triplet-DNP を可能にし、その応用範囲を広げてきた^{1,2)}。

本研究では、 ^{19}F 核スピンを含む対象分子を高い割合で含有できる新たなガラスホスト分子としてジフェニルスルホキシド (DPSO) を見出し、低温 Triplet-DNP による ^{19}F 核スピンの高偏極化を行った。その結果、RNA ポリメラーゼ阻害剤の ^{19}F スピンで 0.31% (熱平衡時の 1007 倍) の偏極率が得られた。

- 1) Dynamic Nuclear Polarization with Photoexcited Triplet Electrons in a Glassy Matrix. Kenichiro Tateishi et al, *Angew. Chem. Int. Ed.* **2013**, 52, 13307–13310.
- 2) Dynamic Nuclear Polarization using Photoexcited Triplet Electron Spins in Eutectic Mixtures. Akinori Kagawa et al, *J. Phys. Chem. A* **2018**, 122, 9670–9675.