

光駆動型超核偏極を志向したトリプレットとラジカルの複合化

(1. 九大院工、2. 九大 CMS、3. 理研仁科セ、4. JST さきがけ) ○西村 亘生¹、立石 健一郎³、上坂 友洋³、君塚 信夫^{1,2}、楊井 伸浩^{1,2,4}

Hybridization of triplets and organic radicals towards photo-driven hyperpolarization (1. Grad. Sch. Eng., Kyushu Univ., 2. CMS, Kyushu Univ., 3. RIKEN Nishina Center for Accelerator-Based Science, 4. PRESTO, JST) ○Koki Nishimura¹, Kenichiro Tateishi³, Tomohiro Uesaha³, Nobuo Kimizuka^{1,2}, Nobuhiro Yanai^{1,2,4}

Dynamic nuclear polarization (DNP) is one of the powerful methods to improve the NMR sensitivity, however, there are some problems for the applications. The photo-driven Overhauser DNP can be achieved by light irradiation only using the reaction between the photo-excited triplets and the radicals. However, the efficiency of dynamic electron polarization, the most important process, is quite low. Here we synthesized several novel triplet-radical hybrid systems and observed hyperpolarized electron spins from time-resolved ESR. We will discuss the design guideline for efficient photo-driven Overhauser DNP.

Keywords : *Dynamic nuclear polarization; Dynamic electron polarization; Photo-excited triplet state; Magnetic resonance; Overhauser effect*

NMR の感度を改善する技術として動的核偏極 (DNP) は強力な手法である一方で課題も多い。光駆動型のオーバーハウザー DNP は光励起三重項とラジカルの反応を用いて光照射のみで駆動するものの、報告例は限られており、電子偏極生成効率の低さが課題となっている^{1)~4)}。そこで、種々の色素と安定有機ラジカルを複合した分子を合成し、電子偏極生成効率を評価した。

ポルフィリン誘導体と安定有機ラジカルであるニトロキシラジカルを連結した分子を合成した。この分子を 1 mM 含むトルエン溶液を調製し、室温・脱気下で時間分解 ESR 測定を行ったところ、ラジカル由来の時間減衰する ESR 信号が得られた。他の連結様式の結果も総合し、高効率な光駆動型 DNP の実現に向けた偏極源分子の設計指針について議論する。

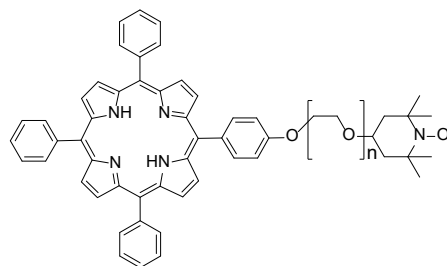


Fig. 1 Molecular structure

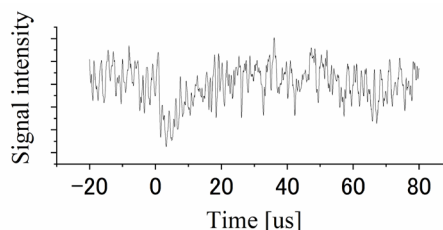


Fig. 2 ESR signal decay (n = 2)

- 1) M. W. Dale and C. J. Wedge, *Chem. Commun.*, **2016**, 52, 13221-13224
- 2) G. Liu, S.-H. Liou, N. Enkin, I. Tkach and M. Bennati, *Phys. Chem. Chem. Phys.*, **2017**, 19, 31823-31829
- 3) D. J. Cheney and C. J. Wedge, *J. Chem. Phys.*, **2020**, 152, 034202
- 4) M. W. Dale, D. J. Cheney, C. Vallotto and C. J. Wedge, *Phys. Chem. Chem. Phys.*, **2020**, 22, 28173-28182