

トリプレット超核偏極の効率向上に向けた新規偏極源の開発

(九大工¹・九大院工²・九大 CMS³・JST さきがけ⁴・理化学研究所⁵) ○坂本 啓太¹・濱地 智之²・立石 健一郎⁵・上坂 友洋⁵・君塚 信夫^{2,3}・楊井 伸浩^{2,3,4}

Development of novel polarizing agents for improving the efficiency of triplet dynamic nuclear polarization (¹Sch. Eng., Kyushu Univ., ²Grad. Sch. Eng., Kyushu Univ., ³CMS Kyushu Univ., ⁴PRESTO, JST., ⁵RIKEN) ○Keita Sakamoto,¹ Tomoyuki hamachi,² Kenichiro Tateishi,⁵ Tomohiro Uesaka,⁵ Nobuo Kimizuka,^{2,3} Nobuhiro Yanai,^{2,3,4}

Dynamic nuclear polarization achieves nuclear hyperpolarization by polarization transfer from electron spins to nuclear spins. In particular, DNP using photoexcited triplet electrons (triplet-DNP) can achieve nuclear hyperpolarization at room temperature. Although high nuclear polarization of glass matrices has been reported, further improvement of the polarization is necessary for practical applications. In this study, we aim to develop a new polarizing agent with higher performance than the conventional polarizing agent, pentacene. We synthesized a series of new pentacene-based polarizing agents and compared their electron spin polarization and triplet-DNP performance with those of pristine pentacene.

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

動的核偏極法 (dynamic nuclear polarization: DNP) は電子スピンから核スピンへと偏極を移行することによって NMR (nuclear magnetic resonance) を高感度化する手法である。特に光励起三重項電子を用いた DNP (triplet-DNP) は室温での高核偏極化を実現できることから注目されている¹。これまで多様な分子を導入可能なガラスマトリックスの高核偏極化が報告されたが、実用化に向けてさらなる偏極率の向上が必要である²。そこで本研究では、従来用いられてきた偏極源 pentacene よりも高性能な新規偏極源分子を開発し、triplet-DNP 効率の向上を目指した。

新規偏極源として複数のペンタセン誘導体を合成し、pentacene と偏極率や triplet-DNP 効率の比較を行った (Fig. 1 (a), (b))。Triplet-DNP 測定では 0.05 mol % の偏極源を *o*-terphenyl 中に分散させたガラスを用いた (Fig. 1 (c))。その結果、6,13-bis(benzo[b]thiophen-2-yl)pentacene (DBTP) を偏極源として用いた場合、triplet-DNP 後の ¹H-NMR 信号強度は pentacene 用いた場合に対して約 6 倍増大したことを確認した (Fig. 2)。

1. Nishimura, K. et al., *Chem. Commun.*, **2020**, 56, 7217-7232.
2. Tateishi, K. et al., *Angew. Chem. Int. Ed.*, **2013**, 52, 13307-13310.

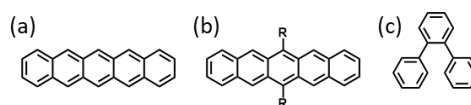


Fig. 1 Chemical structures of (a) pentacene, (b) pentacene derivative and (c) *o*-terphenyl

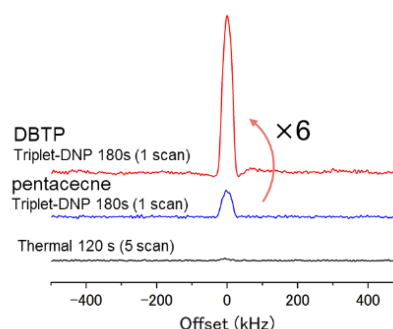


Fig. 2 ¹H-NMR spectra after triplet DNP