

北川勝浩

大阪大学大学院基礎工学研究科システム創成専攻 教授/大阪大学先導的学際  
研究機構量子情報・量子生命研究部門 部門長

室温超核偏極と量子符号化による超高感度生体 MRI/NMR

## § 1. 研究成果の概要

本研究は、量子技術を駆使して、核磁気共鳴 (NMR) と核磁気共鳴画像法 (MRI) の感度を飛躍的に向上することによって、従来不可能であった生体内の微量分子の代謝やダイナミクスを可視化できる革新的技術を創出することを目標としている。

NMR/MRI の飛躍的な高感度化は、ペンタセン分子の光励起三重項状態を利用した動的核偏極 (トリプレット DNP) を用いる。これは室温、低磁場中でも大幅な高感度化が行えるため、従来法のような液体ヘリウム、数百 GHz の高周波機器を必要としないので、広く普及できる技術となり得る。ペンタセン分子をドーピングするのが困難な分子においても、ペンタセンがドーピング可能な安息香酸と共晶を形成させることでトリプレット DNP が可能となることを示した (図 1)。この手法によりトリプレット DNP で高感度化可能なセンサー分子が大幅に増加することが期待できる。また  $^{13}\text{C}$  スピンを位置選択的に同位体置換したそれらのセンサー分子の  $^{13}\text{C}$ -NMR 信号の取得にも成功した。さらに、それらの試料を高分解能 NMR が行える高磁場中へとシャトルし、線幅が 15Hz 程度の NMR 信号を観測することに成功した。

*p*-クロロ安息香酸の 4 つの  $^1\text{H}$  スピンから成る量子鈍感符号化状態が、長寿命化することを超高感度 *in vitro* NMR 装置でデモンストレーションすることに成功した。2 スピン以上の系における量子敏感・鈍感符号化状態の緩和時間を予測可能にするために計算プログラムを改良した。

いくつかの入力を教師データとして実際の量子系に入力し出力が望みのものとなるように量子回路をチューニングしながら、その最適な回路パラメーターを発見する「量子回路学習」と呼ばれるアルゴリズムを開発した。これは誤り訂正を用いない NISQ デバイス(ノイズあり中規模量子デバイス)での教師あり機械学習にも応用できるため非常に重要な成果と言える。

トリプレット DNP の MRI への応用のために装置開発を行った。トリプレット DNP と交差偏極を用いて  $^{13}\text{C}$  スピンを高偏極化した後、溶解した試料を MRI 測定が行える高磁場中へ転送する系を構築した。その結果、高偏極化した  $^{13}\text{C}$ スピンの MRI ファントム画像の取得に成功した。

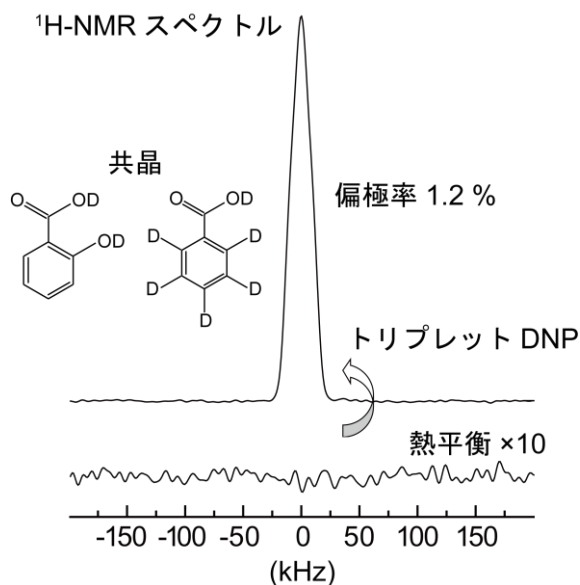


図 1 安息香酸とサリチル酸共晶の  $^1\text{H}$ -NMR スペクトル。

#### 【代表的な原著論文】

1. Makoto Negoro, Akinori Kagawa, Kenichiro Tateishi, Yoshiki Tanaka, Tomohiro Yuasa, Keigo Takahashi, Masahiro Kitagawa, "Dissolution Dynamic Nuclear Polarization at Room Temperature Using Photoexcited Triplet Electrons", J. Phys. Chem. A, 122, 17, pp.4294-4297, 2018
2. Akinori Kagawa, Makoto Negoro, Ryohei Ohba, Naoki Ichijo, Kota Takamine, Yushi Nakamura, Tsuyoshi Murata, Yasushi Morita, and Masahiro Kitagawa, "Dynamic Nuclear Polarization using Photoexcited Triplet Electron Spins in Eutectic Mixtures", J. Phys. Chem. A, 122, 50, pp.9670-9675, 2018
3. Kousuke Mitarai, Makoto Negoro, Masahiro Kitagawa, Keisuke Fujii, "Quantum circuit learning", Phys. Rev. A, 98, pp.032309-1-6, 2018

## § 2. 研究実施体制

### (1) 北川グループ(研究機関別)

- ① 研究代表者:北川勝浩 (大阪大学基礎工学研究科、教授)
- ② 研究項目
  - ・室温超偏極と量子符号化による in vitro NMR と MRI の超高感度化

### (2) 吉岡グループ(研究機関別)

- ① 主たる共同研究者:吉岡芳親 (大阪大学免疫学フロンティア研究センター、特任教授)
- ② 研究項目
  - ・トリプレット DNP を用いた超高感度生体 MRI とその免疫学・生命科学への応用

### (3)「森田」グループ(研究機関別)

- ① 主たる共同研究者:森田 靖 (愛知工業大学 工学部応用化学科、教授)
- ② 研究項目
  - ・トリプレット DNP による超高感度 MRI/NMR のための位置選択的に同位体で修飾された分子の設計と化学合成