

量子状態の高度な制御に基づく革新的量子技術基盤の創出
2016 年度採択研究代表者

2020 年度 年次報告書

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・量子生命研究センター センター長

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)と磁気共鳴画像法(MRI)の感度をトリプレット DNP によって飛躍的に向上し、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 への応用では低磁場下で高感度化した試料を、NMR 分光で用いられている高磁場に転送し液体状態での信号を観測する。開発した液転送装置を用いて、結合阻害剤を注入した際のサリチル酸と人血清アルブミンの結合を化学シフトの変化から測定した。これにより結合が阻害されたことが観測でき、創薬スクリーニング応用への可能性を示した。MRI では、マウスの腹腔内に高偏極化した分子を注射し、撮像を行った。転送チューブ先端から高感度化された試料が出ていることが観測でき、本手法の有効性を示した。

ペンタセンの光励起三重項電子を用いた安息香酸の ^{13}C スピンの直接偏極を実現した。これとダイヤモンドの NV 中心を用いた ^{13}C スピン高偏極化を比較し、偏極移動メカニズムを解析した。また量子鈍感符号化状態を含む核スピン緩和時間を計算するプログラムを改良して、緩和時間の溶媒依存性と同位体分子の緩和時間を計算した。分子内双極子相互作用や化学シフト相互作用による緩和時間を高い精度で予測できることがわかった。これらの結果から、さらなる高偏極化に向けた試料作製や長寿命な分子の合成設計に指針与えること可能となった。

汎用的な応用には多くのセンサー分子を高偏極化する必要があるため、新規な試料作製方法について研究を行った。様々な分子や試料作製条件でスクリーニングを行い、これまで高偏極源となるペンタセンの添加が困難であった生体関連分子への高分散化に初めて成功した。また位置選択的 ^{13}C 置換した分子について cold run での合成手法を確立した。

§ 2. 研究実施体制

(1) 北川グループ

- 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

- ① 主たる共同研究者:吉岡芳親(大阪大学生命機能研究科 特任教授(常勤))
- 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

- 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

- 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ならびにペンタセンドープ試料の作製法の改良

(4)有川グループ

- ① 主たる共同研究者:有川安信(大阪大学レーザー科学研究所 講師)
- ② 研究項目
 - トリプレット DNP のためのレーザー光源の開発

(5)塚本グループ

- ① 主たる共同研究者:塚本眞幸(名古屋大学情報学研究科 講師)
- ② 研究項目
 - ペンタセンドープ試料の作製法の改良－添加剤の検討－

【代表的な原著論文情報】

- 1) Koichiro Miyanishi, Takuya F.Segawa, Kazuyuki Takeda, Izuru Ohki, Shinobu Onoda, Takeshi Ohshima, Hiroshi Abe, Hideaki Takashima, Shigeki Takeuchi, Alexander I. Shames, Kohki Morita, Yu Wang, Frederick T.-K. So, Daiki Terada, Ryuji Igarashi, Akinori Kagawa, Masahiro Kitagawa, Norikazu Mizuochi, Masahiro Shirakawa, and Makoto Negoro “Room-temperature hyperpolarization of polycrystalline samples with optically polarized triplet electrons: pentacene or nitrogen-vacancy center in diamond?”, Magn. Reson., 2, 33-48, 2021