

量子技術を適用した生命科学基盤の創出
2018 年度採択研究者

2020 年度 年次報告書

楊井 伸浩

九州大学 大学院工学研究院
准教授

超核偏極ナノ空間の創出に基づく高感度生体分子観測

§ 1. 研究成果の概要

核磁気共鳴を用いた分光法(NMR)や画像化法(MRI)は現代の科学や医療において不可欠な測定手法であるが、核スピンの偏極率が低いため感度が非常に低いという問題がある。感度を向上させる技術として動的核偏極法(DNP)があり、中でも光励起三重項の大きな電子スピン偏極を核スピン偏極へと移行する triplet-DNP は室温付近でも核スピンの偏極率を高めることが出来るため注目を集めている。しかし、これまでの triplet-DNP の対象は主に芳香族化合物に限られ、生体分子を高感度化した例は無かった。その原因は、従来 triplet-DNP の偏極源はペンタセンなどのアセン類に限られており、アセン類が親水性の生体分子への分散性が低く、凝集により偏極性能を失ってしまうためであった。

そこで親水性のポルフィリン類を triplet-DNP の偏極源として初めて用い、生体分子マトリックスへと分散させることで、生体分子の triplet-DNP による高核偏極化に初めて成功した(J. Phys. Chem. Lett., 2021,12, 2645-2650)。ポルフィリン誘導体が平面性の分子であることから凝集しても偏極性能を失わない事に着目し、アモルファスだけでなく結晶性の生体分子マトリックス中においても偏極性能を保持していることを実証した。実際に凝集したポルフィリン誘導体を偏極源として用い、結晶性の生体分子であるエリスリトールの高核偏極化に成功した。ポルフィリン類は生体適合性も高いことから、今後の triplet-DNP の応用において重要な役割を果たすと期待される。

【代表的な原著論文情報】

- 1) Koki Nishimura, Hironori Kouno, Yusuke Kawashima, Kana Orihashi, Saiya Fujiwara, Kenichiro Tateishi, Tomohiro Uesaka, Nobuo Kimizuka and Nobuhiro Yanai*, “Materials chemistry of triplet dynamic nuclear polarization”, *Chem. Commun.* **2020**, *56*, 7217–7232.
- 2) Koki Nishimura, Hironori Kouno, Kenichiro Tateishi,* Tomohiro Uesaka, Keiko Ideta, Nobuo Kimizuka,* and Nobuhiro Yanai*, “Triplet dynamic nuclear polarization of nanocrystals dispersed in water at room temperature”, *Phys. Chem. Chem. Phys.* **2019**, *21*, 16408–16412.
- 3) Hironori Kouno, Kana Orihashi, Koki Nishimura, Yusuke Kawashima, Kenichiro Tateishi,* Tomohiro Uesaka, Nobuo Kimizuka,* and Nobuhiro Yanai*, “Triplet dynamic nuclear polarization of crystalline ice using water-soluble polarizing agents”, *Chem. Commun.* **2020**, *56*, 3717–3720.
- 4) Hironori Kouno, Yusuke Kawashima, Kenichiro Tateishi,* Tomohiro Uesaka, Nobuo Kimizuka,* and Nobuhiro Yanai*, “Non-Pentacene Polarizing Agents with Improved Air-Stability for Triplet Dynamic Nuclear Polarization at Room Temperature”, *J. Phys. Chem. Lett.* **2019**, *10*, 2208–2213.
- 5) Tomoyuki Hamachi, Koki Nishimura, Hironori Kouno, Yusuke Kawashima, Kenichiro Tateishi*, Tomohiro Uesaka, Nobuo Kimizuka*, Nobuhiro Yanai*, “Porphyrins as Versatile, Aggregation-Tolerant, and Biocompatible Polarizing Agents for Triplet Dynamic Nuclear Polarization of Biomolecules”, *J. Phys. Chem. Lett.* **2021**, *12*, 2645–2650.