

研究課題別事後評価結果

1. 研究課題名： 生体内反応による核スピン量子もつれ生成の検証

2. 個人研究者名

香川 晃徳 (大阪大学大学院基礎工学研究科 助教)

3. 事後評価結果

本研究では、Quantum Dynamical Selection (QDS) と呼ばれる新規な量子生命現象の理論に焦点をあて、生体内反応によって核スピンの量子もつれが生成される現象について、(1)核スピンの向きを揃えて飛躍的に感度向上を実現する動的核偏極 (DNP)、(2)核スピンのコヒーレンス時間が長くなるラジオ波パルスによるシングレット状態生成など、核磁気共鳴 (NMR) 分野で近年注目されている 2 つの量子技術を用いて実験的検証を目指した。

[どのような量子性をどのように扱ったのか]

- ・小分子中の核スピン状態がシングレットかトリプレットかによって酵素反応が大きく変化する核スピン選択化学反応である新現象 Quantum Dynamical Selection (QDS)。
- ・その実証に向けた装置開発と解析。

[達成状況とインパクト]

香川研究者は、 ^4He 冷凍機を用いた極低温動的核偏極装置を開発し、2 核スピン系であるピロリン酸の ^{31}P スピンにおいて 6% の高偏極状態の生成に成功するとともに、分子動力学を用いてシングレット状態の緩和時間計算の高精度化を行った。この過程において、動的核偏極 (DNP) によって核スピン偏極を熱平衡状態より大きく変化させる視点から、リアルタイムな酵素反応を NMR で測定できる溶解 DNP 装置を構築している。具体的には、極低温 DNP プロブ、サンプル転送装置、サンプル溶解装置、高分解能 NMR 用プロブなどの開発を行い、高偏極化したピロリン酸のリアルタイム液体 NMR 測定に成功した。特に溶解装置と組み合わせることができ液体 NMR プロブを開発することで、リアルタイムな液体 NMR 測定を実現している。 ^{31}P スピン偏極を 9.4 テスラ、300 K の熱平衡状態と比較して約 4500 倍の 6% へと向上させたことは、当初の目標を達成していると評価できる。QDS の実験的な実証へ向けた技術基盤を得たと言えよう。高偏極化した状態にラジオ波パルスを照射してシングレット状態を生成するデモンストレーション実験、シングレット状態の緩和時間を理論的に計算するプロトコルの構築にも精力的に取り組んだ。分子動力学と量子化学計算を組み合わせるにより、従来は剛体球モデルで計算していたものをより高精度で計算するためのプロトコルを開発したことも評価できる。一方で、QDS の酵素反応の変化を定量的に検証するには、 ^{31}P スピン偏極が 20% 程度必要と見積もっているが、現状の核偏極率 6% でも酵素反応の確認実験に取り組む価値はあると思われる。実際の酵素反応速度論にあわせた解析を行いつつ、早期に確認実験を行うことを望みたい。現状において極低温下の固体中では 50% 程度の核偏極を実現していることから、液体中のさらなる核偏極率の改善に期待したい。

本技術がどのような生命活動・分子挙動への計測に応用できるかの方向性について、香川研究者は液体 NMR の感度を飛躍的に向上させることを挙げている。 ^{13}C 、 ^{15}N 、 ^{31}P などの核種は生体に多く含まれているが、従来の NMR では低感度のため信号を得るために積算を必要としている。本研究で開発した溶解 DNP 装置は、その積算を必要としないリアルタイム測定が期待できる。今後、生命科学系の研究者との研究ネットワークを拡げ、ピロリン酸の酵素反応実験や多段階の酵素反応に向けたリアルタイム測定に向けて、さらに発展させて欲しい。