

西田 辰介 (Shinsuke Nishida, PhD.)

略歴

平成24年11月 大阪大学 博士研究員 (CREST) (物性有機化学研究室 (森田 靖准教授グループ))  
平成20年4月 大阪市立大学 博士研究員 (大阪市立大学、物理化学第二研究室 (佐藤和信教授))  
平成17年4月 日本学術振興会特別研究員-PD (大阪市立大学、物理化学第二研究室  
(工位武治教授))  
平成17年3月 大阪大学大学院理学研究科化学専攻 修了 (理学博士、中筋一弘研究室)

受賞等

日本化学会 第92春季年会 優秀講演賞 (学術) (平成24年4月)  
受賞演題: テーラーメイド分子スピン電池: トリオキソトリアンギュレンの分子修飾による出力電圧とサイクル特性の向上  
平成16年度大阪大学自然共生化学COEフェロー  
大阪大学21世紀COEプログラム「自然共生化学の創成」  
平成16年度若手研究者支援研究成果発表会における優秀発表賞 (平成16年12月)  
受賞演題: フェナレニル骨格を基盤とした安定開殻有機分子の設計・合成とそのスピン構造の制御  
第43回電子スピンサイエンス学会年会 (SEST2004) 優秀発表賞 (平成16年11月)  
受賞演題: 溶媒和様式の制御によるスピン中心移動: TTF導入型6-オキソフェナレノキシル安定中性ラジカルの電子構造  
平成15年度大阪大学自然共生化学COEフェロー  
日本化学会 第83春季年会 口頭B講演 学生講演賞 (平成15年3月)  
受賞演題: MO-based VB法を用いた開殻有機分子の電子構造の解釈: オキソフェナレノキシル系ラジカルのスピン密度分布  
平成14年度大阪大学自然共生化学COEフェロー

論文リスト

(26) A Synthetic Two-Spin Quantum Bit: g-Engineered Exchange-Coupled Biradical Designed for Controlled-NOT Gate Operations

Nakazawa, S.; Nishida, S.; Ise, T.; Yoshino, T.; Mori, N.; Rahimi, R.; Sato, K.; Morita, Y.; Toyota, K.; Shiomi, D.; Kitagawa, M.; Hara, H.; Carl, P.; Höfer, P.; Takui, T. *Angew. Chem., Int. Ed.* **2012**, *51*, 9860-9864.

(25) Pulsed Electron Spin Nutation Spectroscopy of Weakly Exchange-Coupled Biradicals: A General Theoretical Approach and Determination of the Spin Dipolar Interaction

Ayabe, K.; Sato, K.; Nishida, S.; Ise, T.; Nakazawa, S.; Sugisaki, K.; Morita, Y.; Toyota, K.; Shiomi, D.; Kitagawa, M.; Takui, T. *Phys. Chem. Chem. Phys.* **2012**, *14*, 9137-9148.

(24) 空気中でも安定な開殻有機分子: 電子スピン非局在型中性ラジカルの合成と動的電子スピン物性 (Air-Stable Open-shell Organic Molecules: Syntheses of Electronic-Spin Delocalized Neutral Radicals and Dynamic Electronic-Spin Physical Properties)

森田 靖、西田辰介、工位武治、中筋一弘

有機合成化学協会誌 (総合論文) (*J. Synth. Org. Chem. Jpn.*) **2012**, *70*, 50-59.

(23) Organic Tailored Batteries Materials using Stable Open-shell Molecules with Degenerate Frontier

## Orbitals

Morita, Y.; Nishida, S.; Murata, T.; Moriguchi, M.; Ueda, A.; Satoh, M.; Arifuku, K.; Sato, K.; Takui, T. *Nature Mater.* **2011**, *10*, 947-951.

(22) Electronic Stabilization Effect of Spin-Delocalized Neutral Radical: Synthesis of An 8-Cyano-6-oxophenalenoxyl Derivative and Quantitative Evaluation of the Electronic-Spin Structure in terms of Resonance Structures

Nishida, S.; Kariyazono, K.; Yamanaka, A.; Fukui, K.; Sato, K.; Takui, T.; Nakasuji, K.; Morita, Y. *Chem. An Asian J.* **2011**, *6*, 1188-1196.

(21) ESR and <sup>1</sup>H-,<sup>19</sup>F-ENDOR/TRIPLE Study of Fluorinated Diphenylnitroxides as Synthetic Bus Spin-Qubit Radicals with Client Qubits in Solution

Yoshino, T.; Nishida, S.; Sato, K.; Nakazawa, S.; Rahimi, R.; Toyota, K.; Shiomi, D.; Morita, Y.; Kitagawa, M.; Takui, T. *J. Phys. Chem. Lett.* **2011**, *2*, 449-453.

(20) Air-stable Curved  $\pi$ -Radical Based on Corannulene: Dynamic Electronic-spin Structure Induced by Temperature-dependent Conformational Changes

Ueda, A.; Ogasawara, K.; Nishida, S.; Fukui, K.; Sato, K.; Takui, T.; Nakasuji, K.; Morita, Y. *Aust. J. Chem.* **2010**, *63*, 1627-1633.

(19) Molecular Electron-spin Quantum Computers and Quantum Information Processing: Pulse-based Electron Magnetic Resonance Spin Technology Applied to Matter Spin-qubits

Sato, K.; Nakazawa, S.; Rahimi, R.; Ise, T.; Nishida, S.; Yoshino, T.; Mori, N.; Toyota, K.; Shiomi, D.; Yakiyama, Y.; Morita, Y.; Kitagawa, M.; Nakasuji, K.; Nakahara, M.; Hara, H.; Carl, P.; Höfer, P.; Takui, T. *J. Mater. Chem.* **2009**, *19*, 3739-3754.

(18) Curve-Structured Phenalenyl Chemistry: Synthesis, Electronic Structure, and Bowl-Inversion Barrier of a Phenalenyl-Fused Corannulene Anion

Nishida, S.; Morita, Y.; Ueda, A.; Kobayashi, T.; Fukui, K.; Ogasawara, K.; Sato, K.; Takui, T.; Nakasuji, K. *J. Am. Chem. Soc.* **2008**, *130*, 14954-14955

(17) Oxophenalenoxyl: Novel Stable Neutral Radical with Unique Spin-Delocalized Natures Depending on Topological Symmetries and Redox State

Morita, Y.; Nishida, S.; Kawai, J.; Takui, T.; Nakasuji, K. *Pure Appl. Chem.* **2008**, *80*, 507-517

(16) Curved Aromaticity of a Corannulene-based Neutral Radical: Crystal Structure and 3D Unbalanced-delocalization of Spin

Morita, Y.; Ueda, A.; Nishida, S.; Fukui, K.; Ise, T.; Shiomi, D.; Sato, K.; Takui, T.; Nakasuji, K. *Angew. Chem. Int. Ed.* **2008**, *47*, 2035-2038

(15) Implementation of Molecular Spin Quantum Computing by Pulsed ENDOR Technique: Direct Observation of Quantum Entanglement and Spinor

Sato, K.; Rahimi, R.; Mori, N.; Nishida, S.; Toyota, K.; Shiomi, D.; Morita, Y.; Ueda, A.; Suzuki, S.; Furukawa, K.; Nakamura, T.; Kitagawa, M.; Nakasuji, K.; Nakahara, M.; Hara, H.; Carl, P.; Höfer, P.; Takui, T. *Physica E: Low-dimensional Systems and Nanostructures* **2007**, *40*, 363-366

(14) Control in Spin-delocalization into The 2-Substituted  $\pi$ -Systems in 3-Oxophenalenoxyl Neutral Radicals: Evaluation by Their Dimeric Structures and DFT Calculations

Nishida, S.; Morita, Y.; Ohba, T.; Fukui, K.; Sato, K.; Takui, T.; Nakasuji, K.

*Tetrahedron* **2007**, *63*, 7690-7695

(13) Spin Transfer and Solvato-/Thermochromism Induced by Intramolecular Electron Transfer in A Purely-Organic Open-Shell System.

Nishida, S.; Morita, Y.; Fukui, K.; Sato, K. Shiomi, D.; Takui, T.; Nakasuji, K.  
*Angew. Chem. Int. Ed.* **2005**, *44*, 7277-7280

(12) Spin Delocalization on Curved Surface p-System: Corannulene with Iminonitroxide

Nishida, S.; Kobayashi, T.; Morita, Y.; Ueda, A.; Fukui, K.; Sato, K.; Shiomi, D.; Takui, T.; Nakasuji, K.  
*Polyhedron* **2005**, *24*, 2200-2204

(11) 2-Aryl Substituted 3-Oxophenalenoxyl Radicals: p-Spin Structures and Properties Evaluated by Dimer Structure

Morita, Y.; Nishida, S.; Hatanaka, K.; Ohba, T.; Fukui, K.; Sato, K.; Shiomi, D.; Takui, T.; Yamamoto, G.; Nakasuji, K.  
*Polyhedron* **2005**, *24*, 2194-2199.

(10) Deflected Spin Transmission from Radical Substituent to Corannulene's Curved Surface: Density Functional Theory Calculations.

Fukui, K.; Morita, Y.; Nishida, S.; Kobayashi, T.; Sato, K.; Shiomi, D.; Takui, T.; Nakasuji, K.  
*Polyhedron* **2005**, *24*, 2326-2329

(9) The First Bowl-Shaped Stable Neutral Radical with a Corannulene System: Synthesis and Characterization of the Electronic Structure

Morita, Y.; Nishida, S.; Kobayashi, T.; Fukui, K.; Sato, K.; Shiomi, D.; Takui, T.; Nakasuji, K.  
*Org. Lett.* **2004**, *6*, 1397-1400

(8) A Novel Organic Neutral Radical System: Topological Effects in Oxophenalenoxyl

Morita, Y.; Kawai, J.; Nishida, S.; Fukui, K.; Nakazawa, S.; Sato, K.; Shiomi, D.; Takui, T.; Nakasuji, K.  
*Polyhedron* **2003**, *22*, 2205-2208

(7) Redox-Based Spin Diversity: A Reversible Topological Spin Switching in Oxophenalenoxyl Systems.

Morita, Y.; Nishida, S.; Kawai, J.; Fukui, K.; Nakazawa, S.; Sato, K.; Shiomi, D.; Takui, T.; Nakasuji, K.  
*Polyhedron* **2003**, *22*, 2209-2213

(6) A Synthetic Study of a Homospin Diradical Based on 6-Oxophenalenoxyl

Morita, Y.; Nishida, S.; Oguchi, N.; Kawai, J.; Fukui, K.; Nakazawa, S.; Sato, K.; Shiomi, D.; Takui, T.; Nakasuji, K.  
*Synth. Met.* **2003**, *137*, 1207-1208

(5) Generation and Properties of 2,5,8-Tri-tert-butyl-6-oxo-7,9-diazaphenalenoxyl

Morita, Y.; Suzuki, S.; Kawai, J.; Nishida, S.; Fukui, K.; Nakazawa, S.; Sato, K.; Shiomi, D.; Takui, T.; Nakasuji, K.  
*Synth. Met.* **2003**, *137*, 1209-1210

(4) Synthesis and Spin Structure of 8-(p-Halophenyl)-6-oxophenalenoxyl Derivative.

Morita, Y.; Kawai, J.; Nishida, S.; Haneda, N.; Fukui, K.; Sato, K.; Shiomi, D.; Takui, T.; Nakasuji, K.  
*Synth. Met.* **2003**, *137*, 1217-1218

(3) Redox-Based Spin Diversity in a 6-Oxophenalenoxyl System: Generation, ESR/ENDOR/TRIPLE, and Theoretical Studies of the 2,5,8-Tri-tert-butylphenalenyl-1,6-bis(olate) Salts

Morita, Y.; Nishida, S.; Kawai, J.; Fukui, K.; Nakazawa, S.; Sato, K.; Shiomi, D.; Takui, T.; Nakasuji, K.

*Org. Lett.* **2002**, *4*, 1985-1988

(2) ESR/ENDOR Study for New Radical Dianion Species of 6-Oxophenalenoxyl Derivative

Morita, Y.; Nishida, S.; Kawai, J.; Fukui, K.; Nakazawa, S.; Shiomi, D.; Sato, K.; Takui, T.; Nakasuji, K.  
In *EPR in the 21st Century: Basics and Applications to Material, Life, and Earth Sciences*; Kawamori, A.,  
Yamauchi, J., Ohta, H., Eds.; Elsevier: 2002; 384-388

(1) 6-Oxophenalenoxyl Derivatives Covalently Linked to the TTF Moieties: Synthesis, ESR/ENDOR Measurements, and DFT Calculations.

Y. Morita, J. Kawai, N. Haneda, S. Nishida, K. Fukui, S. Nakazawa, D. Shiomi, K. Sato, T. Takui, T. Kawakami, K. Yamaguchi and K. Nakasuji  
*Tetrahedron Lett.* **2001**, *42*, 7991-7995

#### 著書

(2) Morita, Y.; Nishida, S. Phenalenyls, Cyclopentadienyls, and Other Carbon-Centered Radicals, In *Stable Radicals: Fundamentals and Applied Aspects of Odd-Electron Compounds*; Hicks, R. Ed.; John Wiley & Sons: Chichester, 2010; pp 81-145

(1) Sato, K.; Nakazawa, S.; Rahimi, R. D.; Nishida, S.; Ise, T.; Shiomi, D.; Toyota, K.; Morita, Y.; Kitagawa, M.; Carl, P.; Höfer, P.; Takui, T. Quantum Computing using Pulse-based Electron-nuclear Double Resonance (ENDOR): Molecular Spin-qubits, In *Molecular Realizations of Quantum Computing 2007*; Nakahara, M.; Ota, Y.; Rahimi, R.; Kondo, Y.; Tada-Umehara, M. Eds.; Kinki University Series on Quantum Computing, World Scientific: 2009; pp 58-162

#### 学会誌記事

(1) 純有機安定開殻分子におけるスピン中心移動の実現：TTF 導入型 6-オキソフェナレキシル中性ラジカル  
西田辰介  
*電子スピンサイエンス* **2006**, *4*, 69-70