

2017年度（平成29年度）

研究部門名 化学研究部門

講座名 基盤物質化学講座

教員名 二木 かおり

電子メール niki 理 chiba-u.jp

※メール送信の際は、「理」を半角@に変更してください。

(1) 研究論文などのリスト（印刷中を含む）

	著者・発表者等	タイトル	発表雑誌・会 合等	巻・号	頁	発行・発表年等	掲載論文の DOI(付与さ れている場 合)
(1)	N. Komiya, K. Hatada, F. Ota, P. Krüger, T. Fujikawa, and <u>K. Niki</u>	Multiple scattering approach to photoemission from the highest occupied molecular orbital of pentacene	J. Electron Spectros. Relat. Phenom.	220	pp.21—24	2017	

(2) 卒業研究、大学院修士および博士論文修了指導人数

- ・卒業研究 1 名
- ・大学院修士 3 名
- ・大学院博士 1 名

(3) 教育業績（自己申告、テキストの作成など、授業の工夫など）

授業はわかりやすくなるよう、要点をまとめたり、小テストを行った。
新たな内容を付け加え、ブラッシュアップをした。

(4) 国際会議出席と招待リスト

Construction of an amorphous structural model and XMCD analysis

T. Takeuchi, N. Komiya, J. Kogo, T. Fujikawa and K. Niki

International Symposium on Novel Energy Nanomaterials, Catalysts and Surfaces for Future Earth
(Japan), 28-30 October 2017 (Poster)

Theoretical calculation of molecular frame X-ray photoelectron angular distributions for observation
of chemical reaction by X-ray Free Electron Laser

F. Ota, N. Komiya, K. Niki, D. Sébilleau and K. Hatada

Xtram17 XUV time resolved advanced methods experiments and ab-initio modeling
Erice (Italy), 23-28 July 2017 (Oral)

Theoretical calculation of X-ray photoelectron angular distributions from molecules in gas phase using Full-potential Multiple Scattering theory

F. Ota, N. Komiya, K. Niki, D. Sébilleau and K. Hatada

Xtram17 XUV time resolved advanced methods experiments and ab-initio modeling,
Erice (Italy), 23-28 July 2017 (Poster)

Theoretical study of Atomic XAFS (AXAFS) with full potential multiple scattering approach

J. Kogo, F. Ota, N. Komiya, K. Niki and K. Hatada

Xtram17 XUV time resolved advanced methods experiments and ab-initio modeling,
Erice (Italy), July 23-28, 2017 (Poster)

Theoretical study for X-ray photoelectron angular distributions of gas-phase molecules

F. Ota, N. Komiya, K. Niki, D. Sébilleau and K. Hatada

EUSpec COST meeting for Working Group 3: Time-resolution
Erice (Italy), 27 July 2017 (Oral)

(5) 新聞や雑誌等で報道された研究成果等（報道媒体，報道年月日，報道内容等）

(6) 国際並びに国内学会での受賞（賞名，その内容，受賞理由等）

(7) 国際共同研究（共同研究名，研究内容等）

所属	職名	氏名	共同研究名	研究内容	年度
レンヌ大学	教授	Didier Selbiu	グラフェンのプラズモンロスについて	グラフェンのプラズモンロスについて計算を行った。 Didier研は非常にプログラムに特化しているため、当研究室が理論式を立て、Didier研にプログラムを作成してもらった	29

(8) 地域・社会と連携した教育・研究活動，学会、国、県などへの協力，など

(9) 特許（発明者名，発明の名称，出願日，出願番号，整理番号等）（現時点で公表できるもののみ）