

報道機関 各位

国立大学法人電気通信大学

原子レベルで「電気を蓄える力」を可視化 —ダイヤモンド表面に隠された驚異の性質を発見—

【ポイント】

* 世界初

：材料表面の「電気を蓄える力（誘電率）」が原子レベルでどのように分布しているかを、3D で描き出す新しい手法を開発しました。

* 常識を覆す発見

：現代の電子機器に欠かせないシリコンは表面でこの力が弱まるのに対し、ダイヤモンドは逆に表面の方が内部よりも力が強くなるという特殊な現象を突き止めました。

* 次世代の省エネ機器へ

：この発見により、スマートフォンやパソコンをより小さく、より高性能で省電力にする「夢の炭素デバイス」の実現へ大きく近づきました。

【概要】

電気製品の心臓部である半導体デバイスの小型化が進む中、材料の「表面」で電気がどう振る舞うかを原子レベルで知ることが不可欠となっています。電気通信大学大学院情報理工学研究科基盤理工学専攻博士前期課程 2 年の小林隼人氏と同専攻中村淳教授らの研究チームは、材料表面の「電気を蓄える能力（誘電率（※1））」を 3D で詳細にシミュレーションできる新手法を開発しました。これを用いて調べたところ、シリコンでは表面でこの能力が低下するのに対し、ダイヤモンド（水素終端されたもの）では表面で大幅に高まるという新たな性質を発見しました。これはダイヤモンド表面に特有の「ふわふわと浮いた電子の状態」が原因です。この成果は、超省エネな電子部品や、次世代の高速通信デバイスなどの開発に新たな指針を与えるものです。これらの成果は、アメリカ化学会（ACS）が発行するフルオープンアクセス誌、ACS Omega の最新号に ASAP article として掲載されました。

【背景】

現代のスマートフォンやパソコンが一貫して小さく、高性能となる要因として、内部の電子部品の大きさが原子の大きさに迫るほど極限まで小さくなっていることが挙げられます。しかし、ここまで小さくなると、材料の「表面」の電気の振る舞いが電子部品の電氣的な性質に与える影響を無視できなくなります。これまで、材料の内部（バルク）の性質はよく分かっていましたが、表面のごくわずかな領域で「電気を蓄える力（誘電率）」がどう変化しているかを正確に捉えるのは非常に困難でした。

【手法】

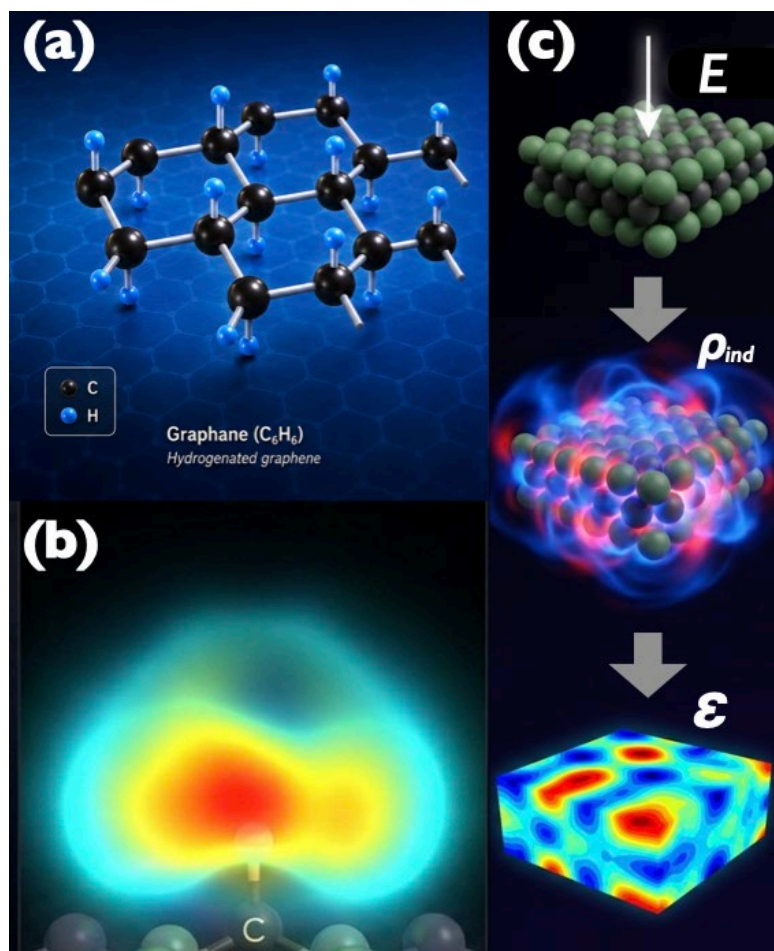
研究チームは、コンピュータ上で原子一つひとつの動きや電子の振る舞いを計算する「第一原理

計算（※2）」という手法をベースに、誘電率の分布を原子スケールで 3D マップ化する新しい解析手法を開発しました。

この手法を、現在の電子機器の主役である「シリコン」と、次世代材料として期待される「ダイヤモンド」の表面に適用し、両者の違いを詳しく比較しました。

【成果】

分析の結果、シリコンは他の半導体物質と同様に、表面に近づくほど「電気を蓄える力」が弱まっていくのに対し、ダイヤモンドは逆に表面でその力が内部よりも強くなる（異常増大現象）ことを発見しました。この原因は、ダイヤモンドの表面付近に存在する「ほとんど自由な電子（※3）」と呼ばれる特殊な電子の状態にあります。この電子は材料の表面から真空側へと広くはみ出しており、外部からの電氣的な揺さぶりに対して非常に敏感に反応します。この「反応の良さ」が、ダイヤモンド表面の電気を蓄える力を引き上げていたのです。



(a) 水素で終端された炭素極薄膜（Graphane）と (b) 表面における誘電率のカラーマップ（模式図：赤い部分では値が大きい）。(c) 誘電率可視化の手順。

【今後の期待】

今回の発見は、ダイヤモンドをはじめとする炭素材料を使った新しいナノデバイス設計の「設計図」となります。例えば、低い電圧で効率よく電子を取り出せる「冷陰極（※4）」という部品の開発や、熱を持ちにくく壊れにくい超小型スイッチなどへの応用が期待されます。

（論文情報）

タイトル：Method for Evaluating the Spatial Distribution of Dielectric Constants: Application to hydrogenated C(111) and Si(111) surfaces

著者：Hayato Kobayashi, Sadakazu Wakui, Akira Sumiyoshi, Ranferi Cancino Betancourt,

Shota Sato, and Jun Nakamura

掲載誌 : American Chemical Society (ACS) 発行、ACS Omega 2026, ASAP article

論文 URL : <https://pubs.acs.org/acsodf/article/doi/10.1021/acsomega.6c03652/>

DOI : 10.1021/acsomega.6c03652/

(外部資金情報)

本研究は日本学術振興会 (JSPS) 科学研究費助成事業 基盤研究 (C) 「一酸化炭素還元能を発現させる非平面 π 共役系原子配列の設計と評価」 (JP24K08242) の支援を受けて行われました。

(用語説明)

※1 : 誘電率

材料が電気をどれくらい蓄えられるか、または外部の電場に対してどれくらい敏感に反応するかを示す数値のことです。

※2 : 第一原理計算

実験データに頼らず、量子力学という物理の基本法則だけを使って、コンピュータ上で原子や電子の状態をシミュレーションする手法です。

※3 : ほとんど自由な電子

材料の表面にゆるやかに縛られ、まるで真空中にふわふわと浮いているかのように振る舞う電子のことです。

※4 : 冷陰極

通常、電子を取り出すには材料を加熱する必要がありますが、熱を使わずに低い電圧で効率よく電子を放出させる部品のことです。省エネデバイスの鍵となります。

【連絡先】

<研究内容に関すること>

電気通信大学 大学院情報理工学研究科 基盤理工学専攻

【職名】 教授

【氏名】 中村 淳

Tel : 042-443-5156 E-Mail : jun.nakamura@uec.ac.jp

<報道に関すること>

電気通信大学 総務部総務企画課 広報係

Tel : 042-443-5019 Fax : 042-443-5887

E-Mail : kouhou-k@office.uec.ac.jp