

# アドバンス・シミュレーション・ニュース

Vol.2, No.10 (2025年4月4日発行)

## 第10回アドバンス・シミュレーション・セミナー2024 開催報告

東北大学 未来科学技術共同研究センター

特任教授 柿本 浩一 様

### 「AI や電気自動車用半導体単結晶育成のための数値解析と実験」

アドバンス・シミュレーション・ニュースは、アドバンスソフト株式会社が2021年度から、我が国における計算科学技術の振興を目的として、幅広い分野の最先端研究を対象として開催している「アドバンス・シミュレーション・セミナー」の開催報告と今後の開催予定をご案内するサービスです。

本セミナーで紹介される多種多様な最先端研究をきっかけに、企業の研究開発を担う技術者の方が新たな視点を持つこと、最先端研究を産業に応用する起点となること、長期的には計算科学シミュレーション分野の裾野が広がること等を期待しています。

#### 開催概要

- 日時：2025年1月17日（金）10:30～12:00
- 開催方法：オンラインセミナー（Zoomにて開催）
- 主催：アドバンスソフト株式会社 出版事業部
- 講演概要

昨今、AIや電気自動車は毎日のようにニュースやインターネットで話題になっている。これらの中心素子を構成する電子部品は、論理回路、記憶回路、電力回路を半導体結晶中に形成することにより実現できる。このためには、原子レベルの解析から流体解析まで幅広い時間空間スケールにおける物理化学現象の制御が必要となる。さらに、原子レベルと連続体レベルの解析の融合が必須となり、これにより、定量的な物理量の予測が可能となる。今講演では、これらを総合的に解析することが可能なマルチフィジックス・マルチスケール数値解析に基づく解析例を紹介する。



本稿は、2025年1月17日に開催した「アドバンス・シミュレーション・セミナー2024」において、柿本 浩一様にご講演いただいた内容をアドバンスソフトがまとめたものです。

#### ご講演内容

##### 1. 講演内容

###### 1.1. 講演内容

本講演では、半導体の結晶成長に関する研究の権威である東北大学 未来科学技術共同研究センター 特任教授の柿本浩一先生を講師にお迎えして、長年にわたる研究活動から、主に SiC や GaN などの結晶成長に関する理論的および実験的な研究事例についてご講演頂いた。本講演の内容は、現代社会における課題のひとつであるパワーデバイス半導体に関する結晶成長研究の面白さや難しさ、理論的研究と実験的研究の双方に取り組む大切さ、数値計算コードや実験装置を自分の手で作り上げる重要性、AIや機械学習など最新の情報科学技術に対する期待、そして、研究成果を社会貢献に資するために研究者・技術者が持つべき意識など多岐に渡るものであり、半導体分野に限らず多くの研究者・技術者にとって今後

の研究・開発活動への指針を示すものであった。

## 1.2. AI やパワーに対する社会的要請

AI と電気自動車は現代社会で非常に重要なテーマであり、社会的な要請も高い。

AI 分野では、コンピューターの性能向上が不可欠であり、特に HBM (High Bandwidth Memory) と呼ばれる DRAM が重要視されている。HBM はプロセッサとメモリ間のデータ転送を高速化し、消費電力を削減するために開発されている。

パワー半導体は、電車や電気自動車などの電力制御に不可欠なデバイスである。現在、パワー半導体には主にシリコンが使用されているが、SiC (炭化ケイ素) などの新材料が注目されている。SiC は、シリコンに比べて高い耐圧、低損失、高温動作が可能であり、電力効率の向上に貢献する。SiC の課題はコストであり、結晶の直径を大きくするだけでなく、結晶の長さを長くすることでコストを削減する必要がある。

## 1.3. 半導体シリコン結晶の結晶成長と欠陥に関する解析例と実験との比較

半導体シリコン結晶の成長と欠陥制御は、デバイス性能を最大限に引き出すために非常に重要である。

- 結晶成長では、原料を溶かす段階から不純物の混入が始まるため、溶解プロセスの詳細な解析が必要である。特に、SiO<sub>2</sub> (石英) とカーボンが反応して CO ガスが発生する現象は、熱力学的な観点から理解する必要がある。
- 結晶成長シミュレーションでは、成長時だけでなく冷却プロセスも考慮する必要がある。冷却速度や温度勾配が、結晶中の欠陥密度や応力分布に大きな影響を与える。
- シリコン結晶中のボイド (空孔) は、デバイスの性能に影響を与える。ボイドの発生を抑制するためには、過剰なシリコン原子を空孔に埋め込むなどの対策が必要である。
- エミシビティ (放射率) は、シリコンの結晶成長において重要なパラメータであり、温度やドーピング濃度によって大きく変化する。
- 結晶の方位によって、転位の入りやすさが異なる。
- 不純物 (酸素など) の濃度も、転位の移動に影響を与える。
- 結晶成長シミュレーションでは、応力の解析が重要であり、有限要素法などが用いられる。
- 結晶成長の数値解析においては、多次元スケールでの現象を考慮する必要がある。
- 実験による観察とシミュレーションによる予測を組み合わせることで、結晶成長のメカニズムをより深く理解することができる。

## 1.4. 半導体 SiC の結晶成長と欠陥に関する解析例

SiC (炭化ケイ素) は、次世代のパワー半導体材料として期待されており、その結晶成長と欠陥制御に関する研究が盛んに行われている。

- SiC 結晶は、主に昇華法 (Physical Vapor Transport method) で製造される。昇華法は、SiC 粉末を高温で加熱し、発生したガスを種結晶上に再結晶させる方法である。昇華法は高温プロセスであるため、内部の観察が難しく、数値解析が重要な役割を果たす。
- 結晶中の転位は、デバイスの性能に大きな影響を与えるため、転位密度を制御する必要がある。転位密度を低減するためには、結晶成長条件の最適化や、新しい結晶成長技術の開発が必要である。
- アレクサンダー・ハーゼンモデルを拡張したモデルが、SiC 結晶の転位密度分布の計算に用いられている。SiC 結晶の転位密度分布は、6 回対称性を示すことが知られている。
- 結晶の方位をわずかに傾けることで、転位密度分布が大きく変化する。例えば、結晶軸を 4 度傾けることで、転位密度分布が 6 回対称から 2 回対称に変化する。BPD (Basal Plane Dislocation) などのライフタイムキラーとなる欠陥を制御する必要がある。

## 1.5. 半導体 GaN や Ga<sub>2</sub>O<sub>3</sub> の結晶成長と欠陥に関する解析例

GaN (窒化ガリウム) や Ga<sub>2</sub>O<sub>3</sub> (酸化ガリウム) は、SiC に並ぶ次世代のパワー半導体材料として注目されており、その結晶成長と欠陥制御に関する研究が盛んに行われている。

- Ga<sub>2</sub>O<sub>3</sub> 結晶は透明であり、熱伝導率の異方性が結晶成長に影響を与える。透明性が高い場合、ヒーターパワーを高くする必要がある。Ga<sub>2</sub>O<sub>3</sub> 結晶の成長には、通常、イリジウム製の坩堝が用いられるが、高価なため、コールドクルーシブル法による代替が検討されている。
- 結晶成長方向によって転位密度が異なり、最適な成長方向の選択が重要である。
- 応力と欠陥の制御が非常に重要であり、ウェハーに加工する際に割れてしまうことがある。
- Ga<sub>2</sub>O<sub>3</sub> は単斜晶という複雑な結晶構造を持つ。

## 1.6. おわりに

半導体単結晶育成における数値解析と実験では、材料の物性、結晶成長プロセス、欠陥制御など、多岐にわたる要素を考慮する必要がある。

- 実験装置や計算コードを自作することで、現象に対する理解を深めることができる。
- 現象の表現は、数式と図で具現化することが重要である。
- 数値解析は予測が使命であり、2 つ以上の物理量を定量的に予測することが理想である。
- 境界条件の設定には注意が必要であり、境界層を考慮したグリッド設計が重要である。
- 実験結果と数値解析結果を比較する際は、対称性や普遍性を考慮し、現象の本質を見抜くことが重要である。

- 数値解析を行うには、基礎学力（物理、化学、数学）が必要である。
- 自然の対称性や美しさを追求することが、研究の正当性を判断する上で重要である。
- 研究開発の最終目的は、社会に貢献することである。

### 1.7. 課題と解決策

- SiCのコスト：結晶の直径を大きくすることによるコスト削減が課題となっている。結晶成長のシミュレーションと実験を組み合わせることで、成長プロセスを最適化し、より低コストで高品質なSiC結晶を製造する方法を模索している。
- 結晶成長の予測の困難さ：正確な現象予測は依然として難しい。3次元の計算が必要な箇所限定して3次元解析を行い、他の2次元の部分は軸対称として計算する2D/3Dカップリングというアルゴリズムを開発し、計算コストを削減している。
- 結晶中の欠陥：ボイドなどの点欠陥が存在し、デバイスの性能に影響を与えるため、これらの欠陥を抑制することが重要な課題である。シリコン融液中の過剰なシリコン原子を利用して空孔を埋めることで、ボイドの形成を抑制する試みが行われている。
- 成長方位による転位の発生：成長方位によって転位の発生しやすさが異なる。数値シミュレーションを用いて、成長方位と転位密度の関係を解析し、転位の少ない結晶成長の最適化を目指している。
- ガス流れの制御と評価：炉内のガス組成をガスクロマトグラフィーで測定し、数値解析の結果と比較することで、ガス流れのモデルの妥当性を検証している。また、炉内の炭素や酸素のコンタミネーション源を特定し、熱力学的な考察に基づいて汚染を抑制するプロセスを開発している。
- 酸化ガリウム(Ga<sub>2</sub>O<sub>3</sub>)の結晶成長：結晶の透明性を考慮した熱伝導解析や、冷却方法の最適化によって、結晶の品質向上を目指している。また、コールドクルーシブル法という新しい結晶成長法を適用することで、高品質な結晶を成長させることを試みている。

### 2. 聴講における感想（アドバンスソフト）

講演から、数値解析には対称性、境界条件、多次元スケール等の高度な知識・経験が必要であること、実験との比較を通して現象の本質を見抜くことの重要性を学んだ。先生の研究動機である「子供や孫が笑って安全に暮らせるように」という言葉には、研究を通じた未来への強い決意が込められており、倫理観と社会貢献への意志に感銘を受けた。

卓越した研究者の地道な研究が社会を支えていることを改めて認識し、自身の研究へのモチベーションと視野を広げる貴重な機会となった。

#### 【ご経歴】

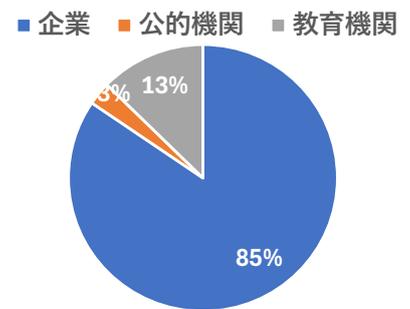
1979年 埼玉大学 電子工学科 卒業。1985年 東京大学 工学系研究科 電子工学専攻 博士課程修了、NEC 基礎研究所 入社。1989年 ベルギーカトリックルーバン大学 応用数学科 研究員。1996年 九州大学 機能物質科学研究所 助教授。2001年 九州大学 応用力学研究所 教授。2016年 皇太子殿下へご進講。2021年 九州大学 特任教授。2022年 東北大学 特任教授。

総合伝熱解析による結晶成長の数値解析に従事。

## 参加者のご意見

申込者は94名、当日の参加者（視聴者）(社外)は71名でした。参加者（視聴者）の内訳は、企業が60名、公的機関が2名、教育機関が9名でした。主な業種は、「材料/素材」、「半導体/電子部品」、「電機/精密機器/IT機器」、「大学/教育機関」でした。主な職種は、「研究/開発」、「技術/設計」でした。感想では、結晶成長分野のこれまでの歴史と現状について、実験と計算の両方からのアプローチについて、柿本先生のエンジニアとしてのご経験や知見、姿勢についてのお話が有意義でした。

参加者の所属機関



## 公開資料

ご講演のYouTube動画は、右のQRコードからご覧いただくことができます。



ご講演の資料は、右のQRコードの「資料をダウンロードする」からログイン後、ダウンロードすることができます。ログインアカウントをお持ちでない方は、「資料をダウンロードする」から新規メンバー登録後、ログインしてダウンロードすることができます。



右のQRコードから過去のアドバンス・シミュレーション・セミナーのYouTube動画をご覧いただくことができます。



## 2024 年度の開催日程

アドバンス・シミュレーション・セミナー

2024 の開催要領

<https://www.advancesoft.jp/seminar/20299/>

No.	日程 受付状況	内容	テーマ
第 1 回	4 月 19 日 (金) 終了	「 <b>ロケットと宇宙機に関するいろいろな自由表面流</b> 」 東京大学大学院 工学系研究科 航空宇宙工学専攻 教授 姫野 武洋 様	自由表面流の予測 と管理
第 2 回	5 月 17 日 (金) 終了	「 <b>ペプチド創薬を加速する分子動力学シミュレーションと深層学習</b> 」 東京工業大学 情報理工学院 情報工学系 教授 秋山 泰 様	バイオ・計算科学
第 3 回	6 月 28 日 (金) 終了	「 <b>デトネーションエンジン開発状況とシミュレーション事例の紹介</b> 」 慶應義塾大学 理工学部 機械工学科 教授 松尾 亜紀子 様	航空宇宙エンジン
第 4 回	7 月 12 日 (金) 終了	「 <b>シミュレーションのための情報可視化</b> 」 お茶の水女子大学大学院 人間文化創成科学研究科 (兼) 文理融合 AI・データサイエンスセンター長 教授 伊藤 貴之 様	可視化・AI
第 5 回	8 月 23 日 (金) 終了	「 <b>シミュレーション技術のリスク評価への適用</b> 」 東京大学大学院 工学系研究科 原子力国際専攻 教授 高田 孝 様	原子力・リスク評価
第 6 回	9 月 20 日 (金) 終了	「 <b>ポスト・エクサ、ポストムーア時代の HPC と AI</b> 」 神戸大学大学院 理学研究科 惑星学専攻 特命教授 牧野 淳一郎 様	HPC・AI
第 7 回	10 月 11 日 (金) 終了	「 <b>建築・都市の新たな風環境デザイン</b> 」 千葉工業大学 創造工学部 建築学科 元教授 森川 泰成 様	建築・都市の新たな 風環境デザイン
第 8 回	11 月 22 日 (金) 終了	「 <b>極低温超伝導コンピュータキテクチャ技術とその新展開</b> 」 九州大学大学院 システム情報科学研究院 情報知能工学部門 主幹教授 井上 弘士 様	計算機アーキテク チャ
第 9 回	12 月 17 日 (火) 終了	「 <b>スマートエネルギーマネジメントシステムのデザイン</b> 」 東京科学大学 総合研究院 ゼロカーボンエネルギー研究所 特任教授 浅野 浩志 様	エネルギーシステ ム、GX
第 10 回	2025 年 1 月 17 日 (金) 終了	「 <b>AI や電気自動車用半導体単結晶育成のための数値解析と実験</b> 」 東北大学 未来科学技術共同研究センター 特任教授 柿本 浩一 様	材料科学・AI

## 【お問い合わせ先】

アドバンスソフト株式会社 出版事業部  
〒101-0062 東京都千代田区神田駿河台四丁目 3 番地 新お茶の水ビルディング 17 階西  
TEL : 03-6826-3971 FAX : 03-5283-6580 E-mail : office@advancesoft.jp  
<https://www.advancesoft.jp/>



当社では随時人材の募集も行っております。  
<https://www.advancesoft.jp/recruit/>



Copyright © 2025 AdvanceSoft Corporation. All right reserved.