



アドバンス・シミュレーション・ニュース

Vol.4, No.2 (2026 年 7 月 15 日発行)

第 2 回アドバンス・シミュレーション・セミナー2026 開催報告

東京大学 大学院工学系研究科 機械工学専攻

教授 泉 聡志 様

「半導体デバイスのマルチスケールシミュレーション」

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：2026 年 5 月 22 日（金）14:00～15:30
- 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

本講演では、半導体デバイスの信頼性向上に向けたマルチスケールシミュレーション技術を紹介する。

前半では、有限要素法（FEM）による応力解析を取り上げ、熱サイクルや構造起因の応力と素子の信頼性問題との関連を示す。後半では、分子動力学（MD）によるプロセスシミュレーションとして、原子間ポテンシャル開発の重要性と、シリコンおよび SiC の熱酸化解析事例を解説する。

特に、機械学習ポテンシャルにより MD の適用範囲が大幅に拡大した点を述べる。これらのシミュレーション技術は、V&V（検証・妥当性確認）による信頼性向上を通じ、材料・デバイス開発に欠かせない技術となりつつある。



本稿は、2026 年 5 月 22 日に開催した「アドバンス・シミュレーション・セミナー2026」において、泉 聡志 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. 研究の概要と実績

泉先生は民間企業（東芝研究開発センター）を経て 1999 年に大学教員となり、それ以降、長年にわたり半導体デバイスを中心としたマルチスケール・マルチフィジックスシミュレーションの研究に従事してきた。専門は有限要素法によるマクロスケールの解析から、分子動力学法や電子状態計算による原子レベルの解析まで幅広い。大学では、材料力学や有限要素法、計算材料科学の講義を担当している。

研究の半分は有限要素法であり、鉄道車両や鉄道分岐器、ワイヤーロープといった機械構造要素を対象とする。特に「ネジの緩みシミュレーション」は 20 年以上の実績があり、50 件近くの講演依頼を受けるなど産業界への貢献度が高い。日本機械学会では非線形有限要素法の講習会も担当している。研究の残りの半分は分子動力学法であり、半導体素子やトライボロジーを対象とする。日本材料学会で 23 回を数

える「ノートパソコンでできる原子レベルシミュレーション講習会」を担当している。講習会では、分子動力学と密度汎関数法の基礎や LAMMPS・Abinit の実践を指導している。泉先生の出版する二冊の有限要素法と分子動力学法の専門書籍は、これらの講習会の内容に準拠している。また、昨年、有志と動画チャンネル「デジタル創工房」を立ち上げ、CAD や有限要素法によるデジタル設計技術の教材を発信しており、今後は分子動力学の基礎的な内容も拡充予定である。

1.2. SiC の残留応力評価

高温動作、高耐圧、大電流対応が可能な次世代のパワー半導体材料として、SiC(シリコンカーバイド)パワーデバイスの普及が急速に加速している。一方、信頼性の確保が重大な課題となっている。製造プロセスや動作時に発生する応力は電気特性を変化させるだけでなく、通電時に転位が移動して積層欠陥が拡大する「順方向劣化」という深刻な現象を引き起こす。このため、デバイス内部の残留応力を適切に把握する技術の確立が必要となった。

実験的な応力評価手法としては、応力による格子振動数変化を計測するラマン分光法がある。シリコン半導体では微細化により適用が困難になったが、SiC パワーデバイスでは現行のサイズであれば十分に有効であるため、同じスキームでの測定が試みられた。しかし、この手法の適用には課題があった。まず、格子振動数と応力の関係式に現れるフォノン変形ポテンシャル係数が未知であり、かつ、独立な応力成分が 6 成分あるのに対し、測定可能なラマンシフトは 3 成分に限定されるため、測定値から直接個々の応力成分を分離して決定することは不可能であった。この課題に対し、泉先生らは第一原理計算と有限要素法を融合して解決した。本研究は NEDO の SIP プロジェクトの一環として多くの協力のもとで行われた。

1.2.1. 第一原理計算によるフォノン変形ポテンシャルの算出

第一原理計算ソフト「PHASE0」を用いて 4H-SiC 結晶のユニットセルにひずみを与え、格子振動数の変化から未知のフォノン変形ポテンシャル係数を導出した。この計算値は過去の実験データと良好に一致し、信頼性が証明された。

1.2.2. 有限要素法による薄膜製造プロセスの応力解析

残留応力分布の正確な予測には、実際の製造工程を模擬した有限要素解析が必要である。本研究では、産業技術総合研究所で試作された「窓あき電極付きダイオード」を対象とした。このデバイスは、40 ミクロンピッチの電極構造を持ち、基板上に P+層、酸化膜、ニッケルシリサイド層などが積層されている。デバイスにかかる応力は、材料間の線膨張係数の差による熱応力と、成膜やその後の膜の構造変化による真性応力に大別される。これらの応力値や物性値は理論計算では決定できないため、実際のプロセスに準拠して実験的に測定した。ヤング率はナノインデンテーション法で測定し、線膨張係数と真性応力は、温度変化による基板の反り曲率変化から算出した。その結果、ニッケルシリサイド膜を形成する際の真性応力が約 1GPa と極めて大きいことが分かった。

これらの実測値を汎用解析ソフト「ANSYS」に入力し、プロセス工程の順序を時系列で追う多段階熱応力解析を実施した。

1.2.3. ラマン分光法による有限要素解析の妥当性確認

有限要素解析で得られた三次元応力分布をラマンシフト量に変換する際は、実験での基板切断に伴う奥行き方向の応力再分配や、測定光が内部へ約 5 ミクロン潜り込む特性を考慮し、対応する深さ領域の計算応力を平均化する処理を施した。

比較の結果、全体のラマンシフト分布は実験データと定量的・空間的に非常によく一致した。本解析により、エピ・サブ界面における分解せん断応力が最大で約 20MPa に達することが判明し、別途、東芝との共同研究において積層欠陥拡大の閾値電流密度が持つ応力依存性を理論的に証明した。

本研究は、さらに、転位動力学による転位ループ形状の再現や、分子動力学を用いた基底面らせん転位の貫通刃状転位変換プロセスの解析へと発展している。

1.3. 電荷移動型原子間ポテンシャルの開発

シリコンおよび SiC の熱酸化プロセスにおける原子スケールのダイナミクスを解明するため、新たな原子間ポテンシャルの開発を行った。熱酸化は半導体製造において極めて重要な工程であるが、その微視的メカニズムには未だ議論が多い。特に SiC では炭素が存在するため、界面に残留した炭素が炭素クラスター欠陥を形成し、酸化膜の品質を劣化させることが問題であった。さらに、酸化に伴う体積膨張による応力の蓄積や、一酸化炭素ガスの脱離など、複雑な現象を原子レベルで統合的に捉えるツールが求められていた。

酸化反応を分子動力学で扱う際の最大の障壁は、反応の進行に伴って原子間の結合性が劇的に変化する点にある。未酸化のシリコンは共有結合性を持つが、酸素と結合して SiO₂ になるとイオン結合性へと移行する。また、酸素分子も解離して取り込まれる際に電子を獲得し電荷を持つ。従来の固定電荷モデルでは、この変化を扱えないため、泉先生らは電荷移動を考慮した静電的なイオン結合項と、配位数を考慮する Tersoff 型の共有結合項を融合させた Kumagai ポテンシャルを基礎としてポテンシャル開発を行った。このポテンシャルは、電荷の偏りに応じて共有結合の寄与を連続的に弱める環境依存型の結合減衰関数を導入している。電子が移動してイオン結合が強まる際には共有結合が弱まるという物理的現実を再現するためである。

このポテンシャル関数のパラメータを最適化するため、大規模な第一原理計算を活用し、アモルファス構造など 100 万個オーダーの膨大な教師データを作成した。初期の不正確なパラメータを使った構造生成と第一原理計算を繰り返すアクティブラーニングにより、幅広い位相空間に対応するロバストなポテンシャルを完成させた。これにより、酸素の拡散や解離、酸化膜の成長が安定して再現され、界面の結晶秩序を反映した高密度層の存在などを突き止めた。

1.4. 機械学習への発展と展望

開発された電荷移動型ポテンシャルは、現在も富士電機において一酸化窒素アニール処理による界面

欠陥低減のメカニズム解明や、次世代の GaN の酸化技術の設計に適用され、実用的な成果を上げるなど、産業界で広く活用されている。

また、近年の計算材料科学においては、ニューラルネットワークを用いた機械学習ポテンシャルへの劇的なパラダイムシフトが起きている。泉先生らの研究室出身の高本氏が MIT 留学中に開発したグラフ畳み込みニューラルネットワークに基づく「TeaNet」や、プリファードネットワークスに移籍後、開発・製品化された汎用シミュレータ「Matlantis」はその代表例である。これらは、膨大な第一原理計算データを事前学習させることで、96 元素の任意の組み合わせに対して第一原理計算に近い高精度解析を、近年急速に進化した GPU により実現している。機械学習ポテンシャルは、多元系への拡張が容易であり、分子動力学の適用範囲を過去にない規模で広げている。

ただし、機械学習ポテンシャルは物理法則を直接内包していないため教師データ作成のコストがかかり、計算速度も古典ポテンシャルより数百倍遅いという欠点もある。数百万個以上の超大規模解析では古典ポテンシャルが優位であり、使い分けが重要である。

汎用ポテンシャルの登場により、分子動力学の適用範囲は大きく広がると考えられる。しかし、分子動力学に限らず、今後の計算科学の発展には、V&V の工学的思想が不可欠である。コードの正しさを検証するバリフィケーションと、実験データと突き合わせるバリデーションの両輪があって初めて解析の信頼性が担保される。現代の開発では、実験とシミュレーションの専門家が互いに理解し合い、歩み寄る融合タッグが成否を分ける。

1.5. 聴講における感想（アドバンスソフト）

今回のセミナーを聴講し、半導体デバイスのマルチスケールシミュレーションの最前線について深く学ぶことができました。

① SiC パワーデバイスの応力解析：第一原理計算や有限要素法、ラマン分光法を組み合わせることで、SiC デバイスの残留応力を解析する技術が構築できた点に非常に感銘を受けました。

② 熱酸化プロセスのシミュレーション：電荷移動型原子間ポテンシャルを新たに開発し、SiC 特有の C クラスターの生成や酸化における面方位依存性といった複雑なメカニズムを分子動力学で再現するアプローチが大変興味深かったです。

特に心に残ったのは、最後に先生が強調された「シミュレーション結果と実験結果を比較する V&V（検証と妥当性確認）」の重要性です。シミュレーション技術がどれほど進化しても、シミュレーションと実験を行う研究者が互いに理解し合い、歩み寄ることこそが成功の鍵であるという力強いメッセージに深く共感しました。今後の自身の業務や研究においても、この視点を常に大切にしていきたいと感じました。

【ご経歴】

1994 年 東京大学 大学院工学系研究科 機械情報工学専攻 修士課程修了。(株) 東芝研究開発センター（～

1999 年）を経て、2014 年 東京大学 大学院工学系研究科 機械工学専攻 教授。

<デジタル創工房 YouTube チャンネル>

https://www.youtube.com/@Digital_SKB

【ご研究内容】

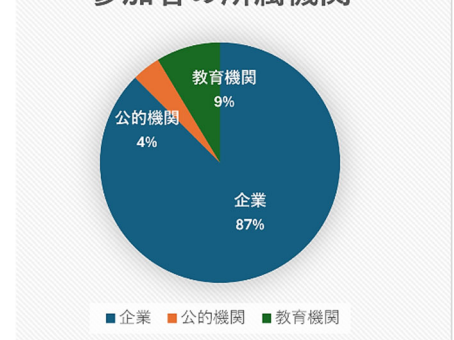
専門は、材料力学・有限要素法・分子動力学、機械工学分野と半導体分野の材料のマルチスケール解析の研究を行っている。有限要素法と分子動力学の書籍・講習会を通じて技術の普及を行っている。

参加者のご意見

申込者は 151 名、当日の参加者（視聴者）（社外）は 104 名でした。

参加者（視聴者）の内訳は、企業が 91 名、公的機関が 4 名、教育機関が 9 名でした。主な業種は、「半導体/電子部品」、「材料/素材」、「自動車/自動車部品」、でした。主な職

参加者の所属機関



種は、「研究/開発」、主な職種は、「研究/開発」でした。セミナー後のアンケートは、70 名からご回答いただきました。満足度の平均値は 10 点満点中 7.71 と高評価をいただいております。全体としてセミナーの満足度は高く、実務への参考になったというポジティブな意見が多くを占めました。

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。



2025 年度に開催したセミナーの各記事の一つにまとめて、24 ページの冊子として発行いたしました。全 10 回分の記事を一度にご覧いただけますので、ぜひお手元にてご一読いただけますと幸いです。



2026 年度の開催日程

アドバンス・シミュレーション・セミナー

2026 の開催要領

<https://www.advancesoft.jp/seminar/41339/>

No.	日程 受付状況	内容	テーマ
第 1 回	4 月 17 日 (金) 終了	「HPC 構造解析と AI で試作レスは可能となるのか？」 東京大学 大学院新領域創成科学研究科 人間環境学専攻 教授 奥田 洋司 様	構造解析、AI
第 2 回	5 月 22 日 (金) 終了	「半導体デバイスのマルチスケールシミュレーション」 東京大学 大学院工学系研究科 機械工学専攻 教授 泉 聡志 様	シミュレーション 技術
第 3 回	7 月 17 日 (金) 受付中	「天の川銀河を星一つ一つまで再現したシミュレーション」 東京大学 大学院理学系研究科 天文学専攻 教授 藤井 通子 様	大規模 N 体 ／流体計算
第 4 回	8 月 28 日 (金) 受付中	「第一原理計算と古典溶液理論の融合で挑む電気化学界面」 筑波大学 計算科学研究センター 量子物性研究部門 教授 大谷 実 様	第一原理計算 ・電気化学
第 5 回	9 月 18 日 (金) 受付準備中	「(未定)」 北見工業大学 工学部 機械電気系 地球環境工学科 エネルギー総合工学コース 准教授 植西 徹 様	排ガス・燃料電池 (仮)
第 6 回	10 月 23 日 (金) 受付準備中	「(未定)」 東京科学大学 総合研究院 難治疾患研究所 計算システム生物学分野 教授 島村 徹平 様	データ同化、創薬 (仮)
第 7 回	11 月 6 日 (金) 受付準備中	「(未定)」 東京大学 生産技術研究所 准教授 山崎 大 様	洪水リスク (仮)
第 8 回	12 月 4 日 (金) 受付準備中	「(未定)」 東北大学 流体科学研究所 流動創成研究部門 准教授 焼野 藍子 様	流体・AI (仮)
第 9 回	12 月 18 日 (金) 受付準備中	「(未定)」 株式会社 理論創薬研究所 代表取締役 吉森 篤史 様 (兼務) 東京理科大学 薬学部 客員教授 (兼務) 静岡県立大学 薬学部 客員教授	AI、創薬 (仮)
第 10 回	2027 年 1 月 15 日 (金) 受付準備中	「領域気象化学モデルによる大気エアロゾルの数値シミュレーション」 気象庁 気象研究所 全球大気海洋研究部 主任研究官 梶野 瑞王 様	気象学・大気化学

【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

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 © 2026 AdvanceSoft Corporation. All right reserved.