

Title	Numerical investigation of InGaSb crystal dissolution and growth process onboard the International Space Station			
Author(s)	Jin, Xin			
Citation	大阪大学, 2019, 博士論文			
Version Type				
URL	https://hdl.handle.net/11094/73587			
rights				
Note	やむを得ない事由があると学位審査研究科が承認したため、全文に代えてその内容の要約を公開しています。全文のご利用をご希望の場合は、 <a href="https://www.library.osaka-u.ac.jp/thesis/#closed">大阪大学の博士論文について</a> をご参照ください。			

# Osaka University Knowledge Archive : OUKA

https://ir.library.osaka-u.ac.jp/

Osaka University

#### Abstract of Thesis

\*Please fill out the form in a 9 point font as a general rule, and submit it within A4 papers.

Name (Jin Xin)

Numerical investigation of InGaSb crystal dissolution and growth process onboard the International Space Station.

国際宇宙ステーションにおけるInGaSb結晶の溶解および成長プロセスに関する数値解析

#### Abstract of Thesis

 ${\rm In_x Ga_{1-x} Sb}$  alloy semiconductor is a promising substrate material for various optoelectronic and thermos-photovoltaic devices because of its tunable lattice constant and bandgap. A microgravity environment such as the International Space Station can minimize all adverse effects and serve as an ideal platform to obtain deeper insight into the transport phenomena and growth mechanism during the crystal growth. Because of the rare opportunities of space experiments and the limitations for experimental settings, numerical simulation is necessary to analyze the experimental results, to explain the phenomena, and to shed light for the future space experiments.

First, a volume-averaging continuum model for the GaSb (feed)/InSb/GaSb (seed) growth system was developed successfully in OpenFOAM. Using this model, numerical simulation of the InGaSb crystal growth with experimental size was carried out under microgravity to investigate the interface change of feed and seed crystals.

Second, a series of numerical simulation under different temperature conditions were performed under zero gravity to study the temperature distribution and its effects on the InGaSb crystal growth. Through this simulation, the mechanism of final seed interface dissolution length and the effects of heat flux through the bottom wall was explained. Simulation results also indicated the actual temperature value of the inside growth ampoule should be around 3 K lower than that measured on the outside protective cartridge.

Third, in order to find the optimum heating rate to avoid the feed over-dissolution problem and optimize the future experiments in space, numerical simulations with different heating rates were carried out under zerogravity during the dissolution process of InGaSb crystal growths. The heating rate has a significant effect on the dissolution length of feed and seed crystals; a higher heating rate will cause more dissolution of feed and seed crystals. In addition, a heating rate lower than 3.6 K/h is suggested to be utilized in the future space experiments of InGaSb crystal growth.

Finally, to find the dominant factor, which determines the crystal growth rate in space, and explain the crystal growth mechanism, simulations were performed to investigate the effects of the diffusion coefficient on the InGaSb crystal growth under zerogravity. Numerical results indicated that the actual diffusion coefficient value of Ga solutes in In-Ga-Sb solution can be expressed as the function of GaSb concentration as  $D=6.9372\times10^{-8}\times\exp(-2.6855/C)$  m²/s. Based on this, the differences of crystal growth rates between space-grown InGaSb with different GaSb crystal orientations 111A, 111B and 110 were explained by numerical simulation.

In summary, numerical studies of InGaSb crystal growth have been performed to shed light into the transport phenomena and growth mechanisms on the International Space Station, as well as optimize the condition for future experiments and explained the current experimental results/

### 論文審査の結果の要旨及び担当者

		氏 名 (	Jin Xin )	
		(職)	氏	名
論文審査担当者	主查查重查	教 授 教 授 教 授 名誉教授	岡野 泰則 松林 伸幸 境 慎司 早川 泰弘(静岡大学)	

## 論文審査の結果の要旨

本学位論文は先に行われた国際宇宙ステーション内での結晶成長実験における数値シミュレーション部分を担うものである。まず最初に結晶成長実験をシミュレートしうる数値解析コードの開発を行った。数値解析コードは以前より存在していたが、BFC法による自作コードであるため、実際のサイズ、時間に対応させるには計算時間が膨大となるため、実用的ではなかった。そこで、申請者はオープンソースコードであるOpenFOAMに新たにvolume-averaging continuumモデルを組み込むことにより、実際の宇宙実験と同一の大きさ、時間に対応しうる数値解析コードの開発に成功した。本コードは地上予備実験の結果を良好に説明しうるものであり、コードの健全性も証明しえた。

国際宇宙ステーションに代表される微小重力環境下では地上と異なり重力が極めて微小であるため対流の影響が極小化される。それに伴い温度条件等の実験条件の設定が地上では行ったものとは大きく異なるため、本研究で新たに開発した数値解析コードを用い、種々の境界条件の影響について検討を行った。その結果実際の結晶側面の温度はアンプル側面で実測した温度より3Kほど低く、アンプル上下面より放出される熱流束の影響は極めて小さいことが判った。

次に本数値計算コードを用いて最適な温度上昇速度を求めた。急激な温度上昇は例え到達温度が融点以下であったとしても試料全てを溶融してしまい、逆に遅すぎる温度上昇は割り当てられた実験時間内に実験が終了できないことを意味する。そこで種々の温度上昇速度を仮定した数値実験を行ったところ3.6 K/hが最適な温度上昇速度であることが判り実際の実験も本速度で行った。実験は見事成功し、数値実験で予想した結果が正確であったことが証明された。

一方で実験終了後の資料内の濃度分布、結晶成長速度を測定したところ数値計算で求めた結果と大きく異なることが判った。これは計算に使用している拡散係数の報告値が正確でないためであると予想し、検討を行った。その結果拡散係数をGaSbの濃度の関数として $D=6.9372\times10^{-8}\times\exp(-2.6855/C)$   $m^2/s$ として表せば、実験結果を良好に説明しうることが判った。高温融液内の物性値測定は極めて困難であり、今回得られた拡散係数の値も世界で初めての報告例であり、極めて重要なものと考えられる。

以上の結果は半導体バルク結晶成長技術に大いに寄与するものであり、博士(工学)の学位論文として価値のあるものと認める。