



**MISSION
INNOVATION**

accelerating the clean energy revolution

POA MATERIALI AVANZATI PER L'ENERGIA

**PROGETTO IEMAP - Piattaforma Italiana Accelerata per i Materiali per
l'Energia**

Struttura DATA BASE per materiali
fotovoltaici del gruppo III-IV-V

G.Abagnale



D4.8, Struttura DATA BASE per materiali fotovoltaici del gruppo III-IV-V

G. Abagnale (RSE)

Luglio 2022

Report MISSION INNOVATION

Ministero dell'Ambiente e della Sicurezza Energetica - ENEA

Mission Innovation 2021-2024 - II annualità

Progetto: Piattaforma Italiana Accelerata per i Materiali per l'Energia

Work package: WP4

Linea di attività: LA4.7: Realizzazione data base III-IV-V e sperimentazioni preliminari per la realizzazione di celle InGaP/Si per concentratori luminescenti (BIPV)

Responsabile del Progetto: M. Celino (ENEA)

Responsabile della LA: G. Abagnale (RSE)



Indice

SOMMARIO	4
1 INTRODUZIONE	5
2 DESCRIZIONE DELLE ATTIVITÀ SVOLTE E RISULTATI	5
2.1 DEFINIZIONE, STRUTTURA E ALLOCAZIONE DEL DATA BASE	5
2.2 SVILUPPO INTERFACCIA UTENTE.....	6
3 CONCLUSIONI	7
4 APPENDICE	8

Sommario

Nell'ambito del progetto Mission Innovation, si propone di sviluppare, attraverso la piattaforma IEMAP, nuove strutture di materiali che permettano di realizzare celle InGaP su substrati di silicio (Si), in sostituzione dei substrati di arseniuro di gallio (GaAs) attualmente impiegati, permettendo, così, di ottenere elevate prestazioni, una riduzione dei costi e dell'impatto ambientale. A tal fine, in questo primo anno dell'attività, si prevede uno studio preliminare dei parametri chimico-fisici e delle proprietà delle leghe basate su elementi dei gruppi III-IV-V della tavola periodica che andranno a popolare un data base e repository in RSE, ad accesso condiviso con il data base centrale di ENEA, per consentire la collaborazione sugli aspetti modellistici all'interno della piattaforma IEMAP. Il data base sarà alimentato anche da dati sperimentali provenienti dalle caratterizzazioni con le tecniche HR-XRD, EBIC, SEM, TEM, AFM e SIMS di strutture preliminari, sintetizzate con la tecnica MOCVD.

1 Introduzione

Nel primo anno dell'attività di ricerca prevista nella LA 4.7 del WP4 (*Realizzazione data base III-IV-V e sperimentazioni preliminari per la realizzazione di celle InGaP/Si per concentratori luminescenti (BIPV)*), si prevede la creazione di un data base in cui vengano raccolti i parametri chimico-fisici, sia teorici che sperimentali, dei diversi materiali che verranno utilizzati per la crescita dei buffer layers necessari per la realizzazione di celle fotovoltaiche in InGaP su Silicio. La definizione e struttura del data base risulta di cruciale importanza al fine di poter permettere un corretto accesso alle informazioni in esso contenuto da utilizzare nelle simulazioni dei diversi modelli epitassiali realizzabili.

2 Descrizione delle attività svolte e risultati

2.1 Definizione, struttura e allocazione del Data Base

Una delle prime difficoltà affrontate nella definizione del data base per i materiali per il fotovoltaico è stato quello di definire un ambiente informatico di lavoro congeniale ai diversi partner che collaborano al progetto. E' emerso da subito la necessità di trovare un formato digitale dei file comune ai diversi software che operano sia in ambiente Windows che in ambiente Linux. Infatti, molte delle attrezzature sperimentali utilizzate nei diversi laboratori, hanno software operativi basati su linguaggi Windows e che producono dati in output in formati leggibili dai software Windows Microsoft. La definizione del formato dei dati prodotti, sia teorici che sperimentali, da inserire nel Data Base è risultato essere cruciale, perché il giusto formato permette di accedere al data base in maniera bidirezionale, sia in input che in lettura, utilizzando diversi software operanti nei diversi ambienti. A tal fine, si è deciso di utilizzare il formato JSON, che permettono un diretto utilizzo dei dati all'interno di CRESCO (Computational RESearch Centre on Complex systems) dai diversi algoritmi di calcolo.

E' stata, poi, definita una lista dei parametri e loro grandezze fisiche di cui si riporta sotto in tabella un esempio:

materials	coeff.dil.termica a(°C-1)	cos.ret (A)	Modulo di Young(dyn/cm2)	Poisson rate	band gap (eV)
InGaxP	$(4.6E-06 + (1.0E-06 * x))$	$(5.8687 - (0.4182 * x))$	$(6.11E11 + (4.19E11 * x))$	$(0.36 - (0.05 * x))$	$2.28 * x + (1 - x) * 1.435$
AlxInP	$(4.6E-06 * (1 - x)) + (2.4E-06 * x)$	$5.86 - (0.3965 * x)$	$(6.11 * x + (1.464 * (1 - x))) * 1E10$	$(1 - x) * 0.36 + (0.27 * x)$	$1.35 + (2.15 * x) + (0.4 * x * x)$ per $x <= 0.40$ $2.21 + 0.27 * x$
InGaxAs	5,66E-06	$6.0583 - (0.405 * x)$	$((5.14 * (1 - x)) + 8.59 * x) * 1E11$	$0.35 - (0.04 * x)$	$0.36 * x + 0.491 * x + (0.58 * x ^2)$
AlP	2,40E-05	5,45635	6,11E+10	0.27	2.48
GaAs	5,73E-06	5,65325	8,59E+11	0.31	1.43
GaP	4,65E-06	5,45050	1,03E+12	0.31	2.261
Si <111>	2,60E-06	5,43100	1,30E+12	0.28	1.12
Ge	5,90E-06	5,65800	1,03E+12	0.26	0.6657
AlGaxP	$((4.65 * (1 - x) + 4.2 * x) * 1E-06$	$5.4635 * x + (1 - x) * 5.4505$	$((6.11 * x) + (1.464 * x)) * 1E10$	$0.27 * x + (0.31 * (1 - x))$	$2.261 + 0.219 * x$
AlGaxAs	$(5.73 - 0.53 * x) * 1E-06$	$5.6533 + (0.0078 * x)$	$(8.53 - 0.18 * x) * 1E10$	$0.31 - (0.1 * x)$	$1.43 + 1.707 * x - 1.437 * x ^2 + 1.31 * x ^3$ per $x <= 0.50$ $1.91 + 0.185 * x + 0.055 * x ^2$
InAlxAs	$5.2 * (1 - x) * 1E-06 + 4.52 * 1E-06$	$(6.0583 * x) + (5.66139 * (1 - x))$	$5.1E11 * x + 8.35E11 * (1 - x)$	$0.35 * x + 0.21 * (1 - x)$	$1.43 + 1.707 * x - 1.437 * x ^2 + 1.31 * x ^3$ per $x <= 0.50$ $1.91 + 0.185 * x + 0.055 * x ^2$
SiGe	$(2.6 + 2.55 * x) * 1E-06$ per $x < 0.85$	$5.431 + 0.2 * x + 0.027 * (x ^2)$	$(130.2 - 28.1 * x) * 1E11$	$0.278 - 0.005 * x$	$1.12 - 0.41 * x + 0.008 * x ^2$
	$(-1.63 + 7.53 * x) * 1E-06$				$0.852 - 0.032 * x + 0.3 * x ^2$ per $x < 0.20$
SixGeSny	$(2.6 * x + 5.9 * (1 - x - y) + 22 * y) * 1E-06$	$5.658 - (0.227 * x) - 0.026 * (1 - x) - (1.958 * y) + 0.166 * (1 - y)$	$(130.2 - 28.1 * x) * 1E11$	$0.26 * (1 - x - y) + 0.28 * x + 0.33 * y$	$0.66 - (1 - x - y) * x + 1.12 * x$

Tab.1: esempio di parametri chimico fisici di materiali per il fotovoltaico

Come si può vedere dalla tabella 1 tutti i parametri sono legati alla composizione chimica dei materiali e determinati da equazioni lineari. Questo complicata ulteriormente l'inserimento di questi parametri in un data base perché il valore da utilizzare passa necessariamente dall'inserimento della composizione del materiale preso in esame e dalla risoluzione dell'equazione che lega il parametro chimico fisico a questa.

Infine, è stato definito l'ambiente dove allocare il Data Base e la modalità d'accesso. Si è convenuto di utilizzare uno spazio Storage su sistemi ENEA allocati alla directory:

/gporq3/store_3/project/misinn

L'accesso per gli utenti Windows è stato consentito attraverso il comando sshfs al path:

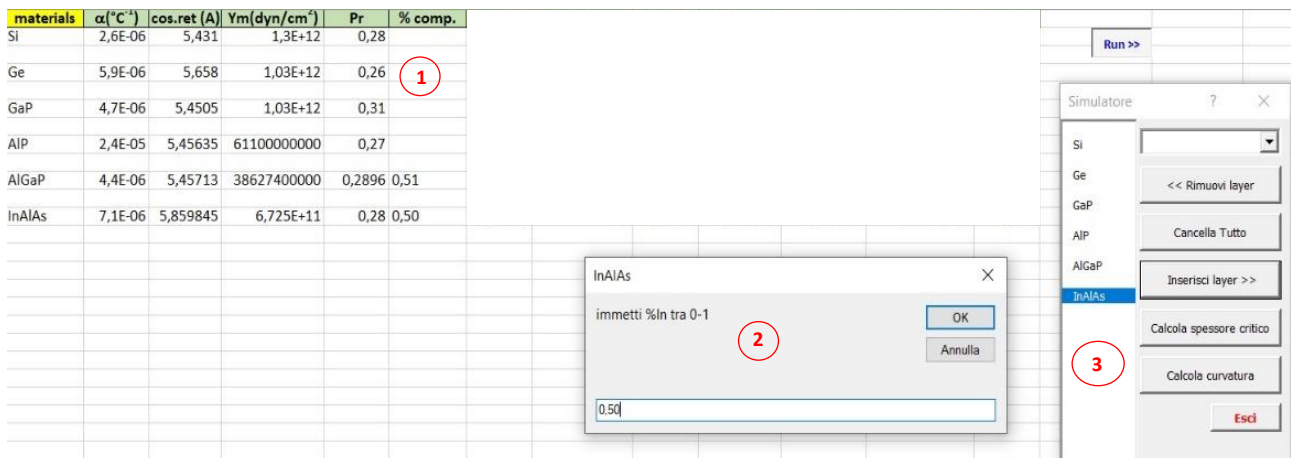
net use Z: \\sshfs.r\username@cresco-scp.portici.enea.it\gporq3\store_3\project\misinn

2.2 Sviluppo interfaccia utente

Date le premesse del paragrafo precedente si è tentato di sviluppare un'interfaccia utente, attraverso un applicativo, che potesse permettere un facile accesso all'elenco dei materiali per il fotovoltaico ed all'archivio dei parametri chimico fisici nonché alle determinazioni di questi al variare della composizione dei materiali.

Si è scelto, a tale scopo, di sviluppare un codice in linguaggio VBA attraverso una programmazione ad oggetti su sistema operativo Windows. Un esempio dei risultati prodotti e riportato di seguito:

materials	$\alpha(^{\circ}\text{C}^{-1})$	cos.ret (A)	Ym(dyn/cm ²)	Pr	% comp.
Si	2,6E-06	5,431	1,3E+12	0,28	
Ge	5,9E-06	5,658	1,03E+12	0,26	1
GaP	4,7E-06	5,4505	1,03E+12	0,31	
AIP	2,4E-05	5,45635	61100000000	0,27	
AlGaP	4,4E-06	5,45713	38627400000	0,2896	0,51
InAlAs	7,1E-06	5,859845	6,725E+11	0,28	0,50



Tab.2: *interfaccia ad oggetti-1)output parametri chimico fisici materiali.2) inserimento composizione materiale.3) lista materiali selezionati*

Il programma sviluppato permette di calcolare i parametri dei diversi materiali in accordo alle equazioni che li legano alla loro composizione chimica attraverso un data base interno. Un ulteriore sviluppo prevede di accedere ad un data base materiali esterno. L'uso di un'interfaccia ad oggetti permette un facile accesso alla lista dei materiali, permettendo la loro selezione/deselezione ed il calcolo automatico dei parametri materiali.

In appendice è riportato il codice del data base interno dei materiali fotovoltaici relativo all'applicativo sopra descritto.

3 Conclusioni

Nel corso di questo primo anno d'attività di ricerca prevista per LA 4.7 WP4, si iniziato a creare un data base dei parametri chimico-fisici, sia teorici che sperimentali, dei diversi materiali per il fotovoltaico da utilizzare per la crescita dei buffer layers necessari per la realizzazione di celle fotovoltaiche in InGaP su Silicio. E' stata definita la struttura, l'allocazione del data base, tipologia di parametri e grandezze fisiche da inserire in esso nonché il formato digitale dei file da utilizzare all'interno del data base. Un ulteriore sviluppo è stato quello di creare un applicativo in grado di accedere a tali dati per poter calcolare i parametri chimico fisici dei materiali in base alla loro composizione stechiometrica. A tal fine si è deciso di utilizzare come linguaggio di programmazione il VBA (visual basic for applications) che permette una programmazione ad oggetti e creare un'interfaccia utente che consente di accedere all'elenco dei materiali ed al loro utilizzo in modo "friendly user".

4 Appendice

4.1 Codice sorgente VBA data base materiali per fotovoltaico

Private Sub CommandButton5_Click() *'comando inserimento materiale*

Dim i, y As Integer

Dim ai, bi, ci, di As Single *' definizione variabili*

On Error GoTo Errore:

'Data Base Materiali'

```
If ListBox2.Text = "InGaP" Then
  i = ListBox2.ListIndex
  x = InputBox("immetti %Ga tra 0-1", "InGaP") 'inserimento composizione del layer
  ai = (0.0000046 + (0.000001 * x))
  bi = (5.8687 - (0.4182 * x))
  ci = (61100000000# + (419000000000# * x))
  di = (0.36 - (0.05 * x))
  Mf(i) = (ci / (1 - di))
```

' Parametri chimico fisici del layer

```
Cells(i + 1, 1) = "InGaP"
Cells(i + 1, 2) = ai
Cells(i + 1, 3) = bi
Cells(i + 1, 4) = ci
Cells(i + 1, 5) = di
Cells(i + 1, 11) = Mf(i)
Cells(i + 1, 6) = x
z2 = InputBox("temperatura di processo", "°K") ' Inserimento Temperatura di Processo
Cells(i + 1, 8) = z2
```

' Output valori parametri calcolati

```
Elseif ListBox2.Text = "AllnP" Then
  i = ListBox2.ListIndex
  x = InputBox("immetti %Al tra 0-1", "AllnP")
  ai = (0.0000046 * (1 - x)) + (0.000024 * x)
  bi = 5.86 - (0.3965 * x)
  ci = (6.11 * x + (1.464 * (1 - x))) * 10000000000#
  di = (1 - x) * 0.36 + (0.27 * x)
  Mf(i) = (ci / (1 - di))
```

```
Cells(i + 1, 1) = "AllnP"
Cells(i + 1, 2) = ai
Cells(i + 1, 3) = bi
Cells(i + 1, 4) = ci
Cells(i + 1, 5) = di
Cells(i + 1, 11) = Mf(i)
Cells(i + 1, 6) = x
z2 = InputBox("temperatura di processo", "°K")
Cells(i + 1, 8) = z2
```

```
Elseif ListBox2.Text = "AlP" Then
  i = ListBox2.ListIndex
  ai = 0.000024
  bi = 5.45635
  ci = 61100000000#
  di = 0.27
  Mf(i) = (ci / (1 - di))
```

```
Cells(i + 1, 1) = "AIP"  
Cells(i + 1, 2) = ai  
Cells(i + 1, 3) = bi  
Cells(i + 1, 4) = ci  
Cells(i + 1, 5) = di  
Cells(i + 1, 11) = Mf(i)  
z2 = InputBox("temperatura di processo", "°K")  
Cells(i + 1, 8) = z2
```

```
Elseif ListBox2.Text = "GaP" Then  
i = ListBox2.ListIndex  
ai = 0.00000465  
bi = 5.4505  
ci = 10300000000000#  
di = 0.31  
Mf(i) = (ci / (1 - di))
```

```
Cells(i + 1, 1) = "GaP"  
Cells(i + 1, 2) = ai  
Cells(i + 1, 3) = bi  
Cells(i + 1, 4) = ci  
Cells(i + 1, 5) = di  
Cells(i + 1, 11) = Mf(i)  
z2 = InputBox("temperatura di processo", "°K")  
Cells(i + 1, 8) = z2
```

```
Elseif ListBox2.Text = "Si" Then  
i = ListBox2.ListIndex  
ai = 0.0000026  
bi = 5.431  
ci = 13000000000000#  
di = 0.28  
Mf(i) = (ci / (1 - di))
```

```
Cells(i + 1, 1) = "Si"  
Cells(i + 1, 2) = ai  
Cells(i + 1, 3) = bi  
Cells(i + 1, 4) = ci  
Cells(i + 1, 5) = di  
Cells(i + 1, 11) = Mf(i)  
z2 = InputBox("temperatura di processo", "°K")  
Cells(i + 1, 8) = z2
```

```
Elseif ListBox2.Text = "Ge" Then  
i = ListBox2.ListIndex  
ai = 0.0000059  
bi = 5.658  
ci = 10300000000000#  
di = 0.26  
Mf(i) = (ci / (1 - di))
```

```
Cells(i + 1, 1) = "Ge"  
Cells(i + 1, 2) = ai  
Cells(i + 1, 3) = bi  
Cells(i + 1, 4) = ci  
Cells(i + 1, 5) = di  
Cells(i + 1, 11) = Mf(i)  
z2 = InputBox("temperatura di processo", "°K")  
Cells(i + 1, 8) = z2
```

Elseif ListBox2.Text = "AlGaP" Then

```
i = ListBox2.ListIndex
x = InputBox("immetti %Al tra 0-1", "AlGaP")
ai = ((4.65 * (1 - x) + 4.2 * x)) * 0.000001
bi = 5.4635 * x + (1 - x) * 5.4505
ci = ((6.11 * x) + (1.464 * x)) * 10000000000#
di = 0.27 * x + 0.31 * (1 - x)
Mf(i) = (ci / (1 - di))
```

```
Cells(i + 1, 1) = "AlGaP"
Cells(i + 1, 2) = ai
Cells(i + 1, 3) = bi
Cells(i + 1, 4) = ci
Cells(i + 1, 5) = di
Cells(i + 1, 11) = Mf(i)
Cells(i + 1, 6) = x
z2 = InputBox("temperatura di processo", "°K")
Cells(i + 1, 8) = z2
```

Elseif ListBox2.Text = "AlGaAs" Then

```
i = ListBox2.ListIndex
x = InputBox("immetti %Al tra 0-1", "AlGaAs")
ai = (5.73 - 0.53 * x) * 0.000001
bi = 5.6533 + (0.0078 * x)
ci = (8.53 - 0.18 * x) * 10000000000#
di = 0.31 - (0.1 * x)
Mf(i) = (ci / (1 - di))
```

```
Cells(i + 1, 1) = "AlGaAs"
Cells(i + 1, 2) = ai
Cells(i + 1, 3) = bi
Cells(i + 1, 4) = ci
Cells(i + 1, 5) = di
Cells(i + 1, 11) = Mf(i)
Cells(i + 1, 6) = x
z2 = InputBox("temperatura di processo", "°K")
Cells(i + 1, 8) = z2
```

Elseif ListBox2.Text = "SiGe" Then

```
i = ListBox2.ListIndex
x = InputBox("immetti %Ge tra 0-1", "SiGe")
```

If x < 85 Then

```
ai = (2.6 + 2.55 * x) * 0.000001
bi = 5.431 + 0.2 * x + 0.027 * (x ^ 2)
ci = (130.2 - 28.1 * x) * 10000000000#
di = 0.278 - 0.005 * x
Mf(i) = (ci / (1 - di))
```

```
Cells(i + 1, 1) = "SiGe"
Cells(i + 1, 2) = ai
Cells(i + 1, 3) = bi
Cells(i + 1, 4) = ci
Cells(i + 1, 5) = di
Cells(i + 1, 11) = Mf(i)
Cells(i + 1, 6) = x
z2 = InputBox("temperatura di processo", "°K")
Cells(i + 1, 8) = z2
```

Else

```
ai = (-1.63 + 7.53 * x) * 0.000001
bi = 5.431 + 0.2 * x + 0.027 * (x ^ 2)
ci = (130.2 - 28.1 * x) * 10000000000#
di = 0.278 - 0.005 * x
Mf(i) = (ci / (1 - di))
```

```
Cells(i + 1, 1) = "SiGe"
Cells(i + 1, 2) = ai
Cells(i + 1, 3) = bi
```

```
Cells(i + 1, 4) = ci  
Cells(i + 1, 5) = di  
Cells(i + 1, 11) = Mf(i)  
Cells(i + 1, 6) = x  
z2 = InputBox("temperatura di processo", "°K")  
Cells(i + 1, 8) = z2
```

End If

```
ElseIf ListBox2.Text = "SiGeSn" Then  
i = ListBox2.ListIndex  
x = InputBox("immetti %Si tra 0-1", "SiGeSn")  
y = InputBox("immetti %Sn tra 0-1", "SiGeSn")  
ai = (2.6 * x + 5.9 * (1 - x - y) + 22 * y) * 0.000001  
bi = 5.658 - (0.227 * x) - 0.026 * (1 - x) - (1.958 * y) + 0.166 * (1 - y)  
ci = (130.2 - 28.1 * x) * 100000000000#  
di = 0.26 * (1 - x - y) + 0.28 * x + 0.33 * y  
Mf(i) = (ci / (1 - di))
```

```
Cells(i + 1, 1) = "SiGeSn"  
Cells(i + 1, 2) = ai  
Cells(i + 1, 3) = bi  
Cells(i + 1, 4) = ci  
Cells(i + 1, 5) = di  
Cells(i + 1, 11) = Mf(i)  
Cells(i + 1, 6) = x  
z2 = InputBox("temperatura di processo", "°K")  
Cells(i + 1, 8) = z2
```

End If

'Fine Data Base Materiali '