



MISSION INNOVATION

accelerating the clean energy revolution

POA MATERIALI AVANZATI PER L'ENERGIA

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

D4.11 - Programma di Calcolo Automatico per la selezione di strutture buffer per celle/Si

G. Abagnale



D4.11 - Programma di Calcolo Automatico per la selezione di strutture buffer per celle/Si

G. Abagnale, RSE

Dicembre 2024

Report MISSION INNOVATION

Ministero della Transizione Ecologica - ENEA
Mission Innovation 2021-2024 - II annualità

Progetto: Piattaforma Italiana Accelerata per i Materiali per l'Energia
Work package: WP4

Linea di attività: LA4.8: Sviluppo del modello teorico stress/deformazioni e del programma di calcolo per la selezione di strutture buffer per celle InGaP/Si.

Responsabile del Progetto: M. Celino, ENEA

Responsabile della LA: G. Abagnale, RSE

Indice

SOMMARIO	5
1 INTRODUZIONE	6
2 DESCRIZIONE DELLE ATTIVITÀ SVOLTE E RISULTATI	6
2.1 MODELLO MATEMATICO E RELATIVO APPLICATIVO CODIFICATO	5
2.2 DESCRIZIONE DELL'APPLICATIVO: FUNZIONI E CARATTERISTICHE	7
3 CONCLUSIONI	8
4 APPENDICE	9
5 BIBLIOGRAFIA.....	25

Lista figure

Fig.1: Set di equazioni codificate nel programma di calcolo

Fig.2: interfaccia utente programma di calcolo: panel di comando (a) e finestra di output del software (b)

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 anno di attività, si prevede lo sviluppo di un programma di calcolo per la selezione di strutture buffer per celle di composti III/V su Silicio basato sul database sviluppato nell'anno precedente.

1. Introduzione

Nel secondo anno dell'attività di ricerca prevista nella LA4.8 del WP4 (*Sviluppo del modello teorico stress/deformazioni e del programma di calcolo per la selezione di strutture buffer per celle InGaP/Si*), si prevede la sviluppo di un programma di calcolo per la selezione di strutture buffer adatta all'integrazione di materiali III/V su Silicio. La definizione dei modelli matematici e la struttura del programma di calcolo nonché la codifica di questo sono descritti nel seguente rapporto.

2. Descrizione delle attività svolte e risultati

2.1 Modello Matematico e relativo applicativo codificato

Nello sviluppo di strutture eteroepitassiali di materiali III/V su Si, bisogna tener conto del fatto che questi elementi ed i loro composti hanno differenti parametri chimico fisici legati alla loro natura e composizione. Queste differenze intrinseche generano le condizioni perché si accumuli energia elastica che una volta rilasciata genera difetti e deformazioni plastiche negli strati cresciuti. Le strutture epitassiali devono essere quindi realizzate in modo tale da ridurre al minimo tale energia residua. Ciò è realizzabile ingegnerizzando le strutture attraverso opportuni modelli matematici che permettono la combinazione dei materiali, a partire dalla conoscenza dei **parametri critici** (come composizione chimica, stress/strain, raggio di curvatura, spessore critico) al fine di ridurre o annullare le formazioni dei difetti plastici dei layer.

Per sviluppare il modello matematico è stato svolto uno studio bibliografico preliminare al fine d'individuare le equazioni da utilizzare. Dallo studio della bibliografia è stato individuato un set di equazioni sviluppate da C.Freeman [1] che attraverso i parametri meccanici dei materiali permette di calcolare il raggio di curvatura e quindi lo strain e lo stress dei film cresciuti. Per quanto riguarda il calcolo dello spessore critico dei diversi layers cresciuti (oltre il quale si verifica la formazione dei difetti da disadattamento reticolare), si è utilizzato l'algoritmo sviluppato da Matthews-Blakeslee [2]. Il set completo di equazioni utilizzate nel modello teorico è descritto nella fig.1:

$$R = \frac{1}{\Delta\alpha\Delta T} \left[\frac{h_s^2}{6(h_s - 2t)} + \frac{h_f^2}{6(h_f + 2t)} + \frac{1}{2}(h_s + h_f) \right] \quad \text{Raggio di Curvatura}$$

$$r = \frac{\left[\frac{E_f}{1 - \nu_f} \right] h_f}{\left[\frac{E_s}{1 - \nu_s} \right] h_s} = \frac{M_f h_f}{M_s h_s} \quad \text{Parametro di Stress}$$

$$t = \frac{h_s - (h_f \cdot r)}{2 \cdot (1 + r)} \quad \text{Distanza dall'interfaccia}$$

$$\sigma_f = \frac{M_s h_s^2}{6 h_f R} \quad \text{stress del Film}$$

$$\varepsilon_m = \frac{(\alpha_f - \alpha_s) \Delta T}{1 + r} + \frac{Z + t}{R} \quad \text{Strain del Film}$$

$$\frac{h_c}{a} = \frac{(4 - \nu)}{(1 + \nu) 16 \sqrt{2} \pi \varepsilon_m} \ln \left(4 \sqrt{2} \frac{h_c}{a} \right) \quad \text{Spessore Critico}$$

$$E = 2\lambda k + Wc(\varepsilon - bk)^2 \quad \text{Energia formazione dislocazione}$$

$$k = 2 \left(\frac{\lambda}{Wc} - b\varepsilon \right)$$

$M_f = E_f / (1 - \nu_f)$ Film Module
 $M_s = E_s / (1 - \nu_s)$ Substrate Module
 α_s Substrate thermal coefficient
 α_f Film thermal coefficient
 $\Delta\alpha = (\alpha_s - \alpha_f)$ Delta thermal coefficient
 E_f Film Young's Module
 E_s Substrate Young's Module
 ν_f Film Poisson rate
 ν_s Substrate Poisson rate
 h_s Substrate Thickness
 h_f Film Thickness
 Z Interface Distance
 k densità difetti per unità d'area
 W spessore del film
 b vettore di Burger
 c costante elastica
 λ energia dislocazione
 ε mismatch reticolare

Fig.1: Set di equazioni codificate nel programma di calcolo

Tali equazioni sono state codificate usando il linguaggio *visual basic for applications* (VBA) attraverso una programmazione ad oggetti su sistema operativo Windows. Il data base dei parametri chimico-fisici dei composti III/V utilizzati per la simulazione delle strutture buffer, è stato sviluppato nel corso delle attività svolte nel primo anno del programma MI-IEMAP LA 4.7 WP4 ed integrato nel programma di calcolo.

Il programma di calcolo sviluppato consente di selezionare da una lista i materiali da utilizzare nella simulazione e successivamente, in automatico, il software esegue il calcolo dei parametri chimico fisici dei composti in base alla loro composizione chimica e come output mostra i valori dei parametri meccanici ottenuti dalle interazioni tra i diversi materiali selezionati. La fig.2 mostra come si presenta l'interfaccia utente del programma di calcolo:

materials	α ("K ⁻¹)	cos.ret (A)	γ_m (dyn/cm ²)	Pr	% comp.(1/100)	th (um)	Temp.cres.(°C)	(km ⁻¹)	α (GPa)surf.	α (GPa)film	strain film	bgap(eV)	g/cm3	dens.def.cm-2	relaxing	new cos.ret.
Si	0.0000026	5.431	1.3E+12	0.28		380	600					1.12	2.329			
GaP	0.00000465	5.4505	1.03E+12	0.31		0.03573	600	0.69145	-1.654E-05	0.1732227	2.74833E-07	2.261	4.14	0	0.83963	5.4473728
AIP	0.0000024	5.45635	6.1100000000	0.27		0.15535	600	0.2485	-4.603E-05	0.0081142	7.6536E-07	2.48	2.566	0	0.64371	5.4542657
InGaP	5.5861E-06	5.456313	1.02418E+12	0.311	0.9861	10000	600	-0.00245	0.1275555	-1089.6791	0.001811648	2.24952	0.59383	0	0.0001	5.456313
GaAs	0.00000573	5.65325	8.59E+11	0.31		0.00009	600	2878110	-1.085E-10	7.768E-06	1.80333E-12	1.43	5.32	1.34022E+15	1111.11	5.65325

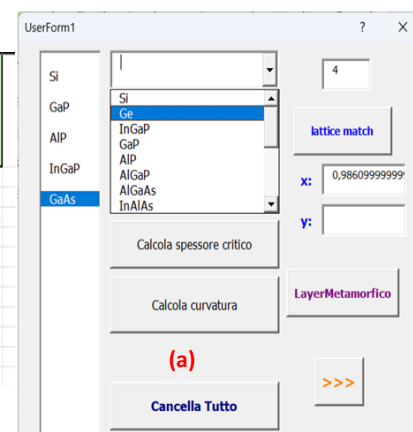


Fig.2: interfaccia utente programma di calcolo: panel di comando (a) e finestra di output del software (b)

Il panel di controllo attraverso un menù a tendina permette di selezionare i materiali da utilizzare nella simulazione e attraverso dei pulsanti di comando codificati consente di svolgere diverse operazioni in base al risultato ricercato. In particolare, nella finestra di output sono riportati i parametri dei diversi materiali utilizzati nella simulazione in base alla loro composizione chimica, quelli ottenuti dalla loro interazione ed i parametri di stress/strain per i diversi layer risultanti dalla loro combinazione.

In appendice è riportato il codice del programma di calcolo relativo all'applicativo sopra descritto.

2.2 Descrizione dell'Applicativo: funzioni e caratteristiche

L'applicativo sviluppato permette attraverso l'uso di moduli di controllo di avere facilmente accesso alle diverse funzioni del software che permettono di svolgere diverse operazioni. Il tutto è effettuato utilizzando il panel di comando dove sono raccolti tutti i moduli di comando. Così, come già detto, attraverso il menù a tendina è possibile accedere alla lista dei materiali ed al relativo data base, selezionare il materiale o composto che si vuole utilizzare nella simulazione ed inserirlo nella sequenza dei layer.

Attraverso i diversi pulsanti di controllo si possono svolgere diverse operazioni come il calcolo dello spessore critico, della curvatura oppure calcolare la composizione dei diversi composti o materiali per trovare la giusta composizione per avere il match reticolare tra i diversi materiali. Oppure, inserire layer metamorfici con composizione variabile continua sino al layer target da utilizzare nelle strutture da simulare (fig.2).

Nella finestra degli output vengono riportati le proprietà chimico fisiche dei layer usati nella simulazione (parametri base usati nel calcolo come la costante di dilatazione termica, modulo di Young, rapporto di Poisson, composizione chimica), nonché i risultati ottenuti dal programma di calcolo come lo spessore critico, i parametri di stress a strain, il raggio di curvatura, densità difetti etc. dei layer combinati nelle diverse strutture epitassiali.

Il software è stato strutturato per mostrare le variazioni dei diversi parametri layer by layer in modo da avere sia una visione globale che parziale dei risultati. Inoltre, la struttura dell'interfaccia realizzata attraverso moduli di controllo permette di avere una certa flessibilità del software permettendo anche di lavorare su risultati parziali ottenuti dal programma di calcolo e non solo su quelli globali.

3. Conclusioni

Nel corso dell'anno d'attività di ricerca prevista per LA 4.8 WP4, si è realizzato un programma di calcolo che permette in automatico di simulare diverse strutture epitassiali con diversi materiali e composti basato sul data base dei parametri chimico-fisici dei materiali per il fotovoltaico realizzato l'anno precedente. Il software sviluppato è stato codificato utilizzando il linguaggio di programmazione *VBA* (visual basic for applications) che permette una programmazione ad oggetti ed è stata realizzata un'interfaccia utente che consente di accedere alle diverse funzioni del software in maniera semplice. Come descritto tale configurazione del software permette una flessibilità nell'utilizzo dell'applicativo semplificando le operazioni di simulazione delle molteplici strutture epitassiali realizzabili.

4. Appendice: Codice Sorgente del Programma di Calcolo

```

Dim Mf(1 To 5000) As Double
Dim th(1 To 5000) As Double
Dim w(1 To 5000) As Double
Dim t, A, B, C, D, E, cost, var, delta, beta, dd, Ea, Ns, Wa As Double
Dim m, s As Integer
Dim z1, z2, j, ja, jb As String
Dim K, r, sigma1, sigma2, sigma3, sigma4, Sigma, Sigmaf, strain As Double
Dim L, res, k1, k2, tx, tz, h, y, x, mx, my, mz, n1 As Double

Private Sub UserForm_Show()

End Sub

Private Sub ComboBox1_DropButtonClick() 'lista materiali

    Cells(2, 7) = z1

    ListBox2.AddItem ComboBox1
    ComboBox1 = ""

    With ComboBox1
    .Clear
    .AddItem "Si"
    .AddItem "Ge"
    .AddItem "InGaP"
    .AddItem "GaP"
    .AddItem "AlP"
    .AddItem "AlGaP"
    .AddItem "AlGaAs"
    .AddItem "InAlAs"
    .AddItem "AlInP"
    .AddItem "SiGe"
    .AddItem "SiGeSn"
    .AddItem "GaAs"
    .AddItem "InGaAs"
    .AddItem "InGaAsP"
    .AddItem "GaAsP"
    .AddItem "AlInGaP"
    .AddItem "InP"
    End With

End Sub

Private Sub CommandButton2_Click() 'comando di rimozione elemento selezione
Dim i As Integer

On Error GoTo Errore:

    i = ListBox2.ListIndex

    If ListBox2.Selected(i) = True Then

        ListBox2.RemoveItem (i)
        ListBox2.RemoveItem (i - 1)
        ListBox2.Selected(i) = False

    End If

Errore:
End Sub

Private Sub CommandButton3_Click() 'comando cancellazione lista materiali

On Error GoTo Errore:

```

For m = 2 To 2000 Step 1

Cells(m, 1).Clear
 Cells(m, 2).Clear
 Cells(m, 3).Clear
 Cells(m, 4).Clear
 Cells(m, 5).Clear
 Cells(m, 6).Clear
 Cells(m, 7).Clear
 Cells(m, 8).Clear
 Cells(m, 9).Clear
 Cells(m, 22).Clear
 Cells(m, 23).Clear
 Cells(m, 24).Clear
 Cells(m, 25).Clear
 Cells(m, 26).Clear
 Cells(m, 27).Clear
 Cells(m, 28).Clear
 Cells(m, 30).Clear
 Next

ListBox2.Clear

Errore:

End Sub

Private Sub CommandButton4_Click() *'comando uscita dal programma*

 Unload Me
 End Sub

Private Sub CommandButton5_Click() *'comando inserimento materiale*
 Dim i As Integer

Dim ai, bi, ci, di As Single

CommandButton11.Enabled = True

On Error GoTo Errore:

 If ListBox2.Text = "InGaP" Then *'Calcolo Parametri Materiali*

 i = ListBox2.ListIndex
 x = InputBox("immetti %Ga tra 0-1", "InGaP")
 ai = (0.0000046 + (0.000001 * x))
 bi = (5.8687 - (0.4182 * x))
 ci = (611000000000# + (419000000000# * x))
 di = (0.36 - (0.05 * x))
 Mf(i) = (ci / (1 - di))
 bd = 2.261 * x + (1 - x) * 1.435
 dd = Abs(4.81 * (1 - x) - 0.67 * x)

 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
 Cells(i + 1, 25) = bd
 z2 = InputBox("temperatura di processo", "°C")
 h = InputBox("immetti spessore (um)", "InGaP")
 Cells(i + 1, 8) = z2
 Cells(i + 1, 26) = dd
 Cells(i + 2, 7) = h

 ElseIf ListBox2.Text = "AlInP" Then

```

i = ListBox2.ListIndex
x = InputBox("immetti %Al tra 0-1", "AlInP")

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))
dd = Abs(4.81 * (1 - x) - 2.566 * x)
If x <= 0.4 Then
bd = 1.35 + (2.15 * x) + (0.4 * x * x)
Else
bd = 2.21 + 0.27 * x
End If

```

```

Cells(i + 1, 1) = "AlInP"
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
Cells(i + 1, 25) = bd
z2 = InputBox("temperatura di processo", "°C")
h = InputBox("immetti spessore (um)", "AlInP")
Cells(i + 1, 8) = z2
Cells(i + 1, 26) = dd
Cells(i + 2, 7) = h

```

```

Elseif ListBox2.Text = "AlP" Then
i = ListBox2.ListIndex
h = InputBox("immetti spessore (um)", "AlP")
ai = 0.000024
bi = 5.45635
ci = 61100000000#
di = 0.27
Mf(i) = (ci / (1 - di))
bd = 2.48
dd = 2.566

```

```

Cells(i + 1, 1) = "AlP"
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, 25) = bd
z2 = InputBox("temperatura di processo", "°C")
Cells(i + 1, 8) = z2
Cells(i + 1, 26) = dd
Cells(i + 2, 7) = h

```

```

Elseif ListBox2.Text = "GaAs" Then
i = ListBox2.ListIndex
h = InputBox("immetti spessore (um)", "GaAs")
ai = 0.00000573
bi = 5.65325
ci = 859000000000#
di = 0.31
Mf(i) = (ci / (1 - di))
bd = 1.43
dd = 5.32

```

```

Cells(i + 1, 1) = "GaAs"
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, 25) = bd
z2 = InputBox("temperatura di processo", "°C")
Cells(i + 1, 8) = z2
Cells(i + 1, 26) = dd
Cells(i + 2, 7) = h
```

```
Elseif ListBox2.Text = "GaP" Then
  i = ListBox2.ListIndex
  h = InputBox("immetti spessore (um)", "GaP")
  ai = 0.00000465
  bi = 5.4505
  ci = 1030000000000#
  di = 0.31
  Mf(i) = (ci / (1 - di))
  bd = 2.261
  dd = 4.14
```

```
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)
Cells(i + 1, 25) = bd
z2 = InputBox("temperatura di processo", "°C")
Cells(i + 1, 8) = z2
Cells(i + 1, 26) = dd
Cells(i + 2, 7) = h
```

```
Elseif ListBox2.Text = "InP" Then
  i = ListBox2.ListIndex
  h = InputBox("immetti spessore (um)", "InP")
  ai = 0.0000046
  bi = 5.8687
  ci = 611000000000#
  di = 0.36
  Mf(i) = (ci / (1 - di))
  bd = 1.344
  dd = 4.81
```

```
Cells(i + 1, 1) = "InP"
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, 25) = bd
z2 = InputBox("temperatura di processo", "°C")
Cells(i + 1, 8) = z2
Cells(i + 1, 26) = dd
Cells(i + 2, 7) = h
```

```
Elseif ListBox2.Text = "Si" Then
  i = ListBox2.ListIndex
  h = InputBox("immetti spessore (um)", "Si")
  ai = 0.0000026
  bi = 5.431
  ci = 1300000000000#
  di = 0.28
  Mf(i) = (ci / (1 - di))
  bd = 1.12
  dd = 2.329
```

```
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)
Cells(i + 1, 25) = bd
z2 = InputBox("temperatura di processo", "°C")
Cells(i + 1, 8) = z2
Cells(i + 1, 26) = dd
Cells(i + 2, 7) = h

```

```

Elseif ListBox2.Text = "Ge" Then
i = ListBox2.ListIndex
h = InputBox("immetti spessore (um)", "Ge")
ai = 0.0000059
bi = 5.658
ci = 1030000000000#
di = 0.26
Mf(i) = (ci / (1 - di))
bd = 0.6657
dd = 5.3234

```

```

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)
Cells(i + 1, 25) = bd
z2 = InputBox("temperatura di processo", "°C")
Cells(i + 1, 8) = z2
Cells(i + 1, 26) = dd
Cells(i + 2, 7) = h

```

```

Elseif ListBox2.Text = "AlGaP" Then
i = ListBox2.ListIndex
x = InputBox("immetti %Al tra 0-1", "AlGaP")
h = InputBox("immetti spessore (um)", "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))
bd = 2.261 + 0.219 * x
dd = Abs(4.14 * (1 - x) - 2.566 * x)

```

```

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
Cells(i + 1, 25) = bd
z2 = InputBox("temperatura di processo", "°C")
Cells(i + 1, 8) = z2
Cells(i + 1, 26) = dd
Cells(i + 2, 7) = h

```

```

Elseif ListBox2.Text = "AlGaAs" Then
i = ListBox2.ListIndex
x = InputBox("immetti %Al tra 0-1", "AlGaAs")
h = InputBox("immetti spessore (um)", "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))
dd = Abs(5.32 * (1 - x) - 1.56 * x)

```

```

If x <= 0.5 Then
  bd = 1.43 + (1.707 * x) - (1.437 * (x ^ 2)) + (1.31 * (x ^ 3))
Else
  bd = 1.91 + 0.185 * x + 0.055 * (x ^ 2)
End If

```

```

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
Cells(i + 1, 25) = bd
z2 = InputBox("temperatura di processo", "°C")
Cells(i + 1, 8) = z2
Cells(i + 1, 26) = dd
Cells(i + 2, 7) = h

```

```

Elseif ListBox2.Text = "SiGe" Then
  i = ListBox2.ListIndex
  x = InputBox("immetti %Ge tra 0-1", "SiGe")
  h = InputBox("immetti spessore (um)", "SiGe")
  dd = Abs(2.329 + 3.493 * x - (0.499 * x ^ 2))
  If x < 0.85 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) * 100000000000#
    di = 0.278 - 0.005 * x
    Mf(i) = (ci / (1 - di))
    bd = 1.12 - 0.41 * x + 0.008 * (x ^ 2)

```

```

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
Cells(i + 1, 25) = bd
z2 = InputBox("temperatura di processo", "°C")
Cells(i + 1, 8) = z2
Cells(i + 1, 26) = dd
Cells(i + 2, 7) = h

```

```

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) * 100000000000#
  di = 0.278 - 0.005 * x
  Mf(i) = (ci / (1 - di))

  If x < 0.2 Then
    bd = 0.66 + 1.34 * x
  Else
    bd = 1.12 - 0.41 * x + 0.008 * (x ^ 2)
  End If

```

```

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
Cells(i + 1, 25) = bd
z2 = InputBox("temperatura di processo", "°C")
Cells(i + 1, 8) = z2
Cells(i + 1, 26) = dd
Cells(i + 2, 7) = h

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")
h = InputBox("immetti spessore (um)", "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 = (10.3 * (1 - x - y) + 13 * x + 4.3 * y) * 100000000000#
di = 0.26 * (1 - x - y) + 0.28 * x + 0.33 * y
Mf(i) = (ci / (1 - di))
bd = 0.66 - ((1 - x - y) * x) + (1.12 * x)
dd = Abs(2.3229 * x - 5.3234 * (1 - x - y) - 6.54 * y)

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
Cells(i + 1, 25) = bd
z2 = InputBox("temperatura di processo", "°C")
Cells(i + 1, 8) = z2
Cells(i + 1, 26) = dd
Cells(i + 2, 7) = tz(i)

ElseIf ListBox2.Text = "InAlAs" Then
i = ListBox2.ListIndex
x = InputBox("immetti %In tra 0-1", "InAlAs")
tz(i) = InputBox("immetti spessore (um)", "InAlAs")
ai = 5.2 * (1 - x) * 0.000001 + 4.52 * 0.000001
bi = (6.0583 * x) + (5.66139 * (1 - x))
ci = 510000000000# * x + 835000000000# * (1 - x)
di = 0.35 * x + 0.21 * (1 - x)
Mf(i) = (ci / (1 - di))
dd = Abs(5.68 * x - 1.56 * (x - 1))

If x <= 0.5 Then
  bd = 1.43 + 1.707 * x - 1.437 * x * x + 1.31 * x * x * x
Else
  bd = 1.91 + 0.185 * x + 0.055 * x * x
End If

Cells(i + 1, 1) = "InAlAs"
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
Cells(i + 1, 25) = bd
z2 = InputBox("temperatura di processo", "°C")
Cells(i + 1, 8) = z2
Cells(i + 1, 26) = dd
Cells(i + 2, 7) = h

```

```

Elseif ListBox2.Text = "InGaAs" Then
i = ListBox2.ListIndex
x = InputBox("immetti %Ga tra 0-1", "InGaAs")
h = InputBox("immetti spessore (um)", "InGaAs")
ai = ((5.73 * x) + (4.52 * (1 - x))) * 0.000001
bi = 6.0583 - (0.405 * x)
ci = ((5.14 * (1 - x)) + 8.59 * x) * 100000000000#
di = 0.35 - (0.04 * x)
Mf(i) = (ci / (1 - di))
bd = 0.36 + 0.491 * x + (0.58 * x * x)
dd = Abs(5.68 * (1 - x) - 5.32 * x)

Cells(i + 1, 1) = "InGaAs"
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
Cells(i + 1, 25) = bd
z2 = InputBox("temperatura di processo", "°C")
Cells(i + 1, 8) = z2
Cells(i + 1, 26) = dd
Cells(i + 2, 7) = h

Elseif ListBox2.Text = "InGaAsP" Then
i = ListBox2.ListIndex
x = InputBox("immetti %In tra 0-1", "InGaAsP")
y = InputBox("immetti %As tra 0-1", "InGaAsP")
h = InputBox("immetti spessore (um)", "InGaAsP")
ai = ((4.52 * x * y) + (4.6 * x * (1 - y)) + (5.73 * (1 - x)) + (4.65 * (1 - x) * (1 - y))) * 0.000001
bi = ((1 - x) * y * 6.0583) + ((1 - x) * (1 - y) * 5.8687) + (x * y * 5.6533) + (x * (1 - y) * 5.4505)
ci = ((5.14 * x * y) + (6.11 * x * (1 - y)) + (8.59 * (1 - x)) + (10.3 * (1 - x) * (1 - y))) * 100000000000#
di = (0.35 * x * y + 0.36 * x * (1 - y) + 0.31 * (1 - x) + 0.31 * (1 - x) * (1 - y))
Mf(i) = (ci / (1 - di))
bd = 1.35 + (0.668 * x) - (1.17 * y) + (0.758 * (x ^ 2)) + (0.18 * (y ^ 2)) - (0.069 * x * y) - (0.322 * y * (x ^ 2)) + (0.03 * x * (y ^ 2))
dd = Abs((1 - x) * y * 5.68 + (1 + x) * (1 - y) * 4.81 + x * y * 5.38 + x * (1 - y) * 4.14)

Cells(i + 1, 1) = "InGaAsP"
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
Cells(i + 1, 25) = bd
z2 = InputBox("temperatura di processo", "°C")
Cells(i + 1, 8) = z2
Cells(i + 1, 26) = dd
Cells(i + 2, 7) = tz(i)

Elseif ListBox2.Text = "GaAsP" Then
i = ListBox2.ListIndex
x = InputBox("immetti %As tra 0-1", "GaAsP")
h = InputBox("immetti spessore (um)", "GaAsP")
ai = ((5.73 * x) + (4.65 * (1 - x))) * 0.000001
bi = (5.65325 * x) + (5.4505 * (1 - x))
ci = ((85.9 * x) + (1.03 * (1 - x))) * 100000000000#
di = (0.31 * x) + (0.31 * (1 - x))
Mf(i) = (ci / (1 - di))
bd = (1.43 * x) + (2.261 * (1 - x))
dd = Abs(4.14 * (1 - x) - 5.32 * x)

Cells(i + 1, 1) = "GaAsP"
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
Cells(i + 1, 25) = bd
z2 = InputBox("temperatura di processo", "°C")
Cells(i + 1, 8) = z2
Cells(i + 1, 26) = dd
Cells(i + 2, 7) = h

Elseif ListBox2.Text = "AllnGaP" Then
i = ListBox2.ListIndex
x = InputBox("immetti %Al tra 0-1", "AllnGaP")
y = InputBox("immetti %In tra 0-1", "AllnGaP")
h = InputBox("immetti spessore (um)", "AllnGaP")
ai = (0.0000245 * x) + (0.0000046 * y) + ((1 - x - y) * 0.00000465)
bi = (5.45635 * x) + (5.8687 * y) + ((1 - x - y) * 5.4505)
ci = (61100000000# * x) + (611000000000# * y) + ((1 - x - y) * 10300000000000#)
di = (0.27 * x) + (0.36 * y) + ((1 - x - y) * 0.31)
Mf(i) = (ci / (1 - di))
bd = (2.48 * x) + (1.344 * y) + ((1 - x - y) * 2.261)
dd = Abs(2.566 * x - 4.81 * y - 4.14 * (1 - x - y))

```

```

Cells(i + 1, 1) = "AllnGaP"
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
Cells(i + 1, 25) = bd
z2 = InputBox("temperatura di processo", "°C")
Cells(i + 1, 8) = z2
Cells(i + 1, 26) = dd
Cells(i + 2, 7) = h

```

End If

y = ListBox2.ListIndex

```

If y <> 1 Then
End If

```

On Error GoTo Errore:

```

w(y) = (4 - Cells(y + 1, 5))

w(y + 1) = (1 + Cells(y + 1, 5)) * 16 * Sqr(2) * 3.14

w(y + 2) = (Cells(y - 1, 3) - Cells(y + 1, 3)) / Cells(y + 1, 3)

beta = w(y) / (w(y + 1) * w(y + 2))

cost = Log(4 * Sqr(2)) - Log(Cells(y + 1, 3))

```

Cells(y + 1, 17) = beta

Cells(y + 1, 19) = cost

TextBox3 = Int(i / 2)

Errore:

End Sub

Private Sub CommandButton6_Click() '*calcolo spessore critico*
 Dim n1 As Double

n1 = 1

For m = 0 To ListBox2.ListCount Step 2

If m > 3 Then

On Error GoTo Errore:

For N = 0 To 50000 Step 100

Cells(m, 21) = Abs(N)

If Cells(m, 21) = 0 Then

Cells(m, 21) = 0.0001

End If

Cells(m, 20) = Abs(Cells(m, 3) * Cells(m, 17) * Log(4 * Sqr(2) * Cells(m, 21) / Cells(m, 3))) - Cells(m, 21)

If Cells(m, 20) < 100 Then Exit For

Next N

For n1 = N To 50000 Step 0.1

Cells(m, 21) = Abs(n1)

If Cells(m, 21) = 0 Then

Cells(m, 21) = 0.0001

End If

Cells(m, 20) = Abs(Cells(m, 3) * Cells(m, 17) * Log(4 * Sqr(2) * Cells(m, 21) / Cells(m, 3))) - Cells(m, 21)

If Cells(m, 20) = 0 Then Exit For

If Cells(m, 20) < 0.01 Then Exit For

Next n1

Mf(m) = Cells(m, 11)

th(m) = (Cells(m, 21)) / 10000

If th(m) >= 5 Then

th(m) = 10000

End If

Cells(m, 7) = th(m)

Cells(m, 7).Interior.ColorIndex = 4

End If

Next m

Errore:

End Sub

Private Sub CommandButton7_Click() '*Calcolo Curvatura*

z1 = InputBox("spessore substrato", "um")

Cells(2, 7) = z1

t = z1

Mf(2) = Cells(2, 11)

For m = 0 To ListBox2.ListCount Step 2

If m > 2 Then

On Error GoTo Errore:

tz = Cells(m + 1, 7)

t = t + th(m)

$r = (Mf(m) * th(m)) / (Mf(m - 2) * (t))$

$A = ((t) - (th(m) * r)) / (2 * (1 + r))$ 'variabile t

$B = 1 / ((Cells(m, 2) - Cells(m - 2, 2)) * (Cells(m, 8) - 25))$

$C = ((t) ^ 2) / (6 * (t - 2 * A))$

$D = (th(m) ^ 2) / (6 * (th(m) + 2 * A))$

$E = (0.5 * (t + th(m)))$

$K = (B * (C + D + E)) / 1000000000\#$ 'curvatura

$\sigma_1 = (Mf(2) * (t ^ 3))$

$\sigma_2 = Mf(m) * (tz ^ 3)$

$\sigma_3 = 3 * Mf(m) * (tz ^ 2) * (t + tz)$

$\sigma_4 = (6 * (t + tz) * t * (K * 1000000000\#))$

$\Sigma = -(\sigma_1 + \sigma_2 - \sigma_3) / \sigma_4$

$\Sigma_f = (t ^ 2 * Mf(m)) / (6 * tz * K * 1000000000\#)$

$\text{strain} = ((Cells(m, 2) - Cells(m - 2, 2)) * (Cells(m, 8) - Cells(m - 2, 8)) / (1 + r)) + (tz + A) / (K * 1000000000\#)$

$E_a = (((Cells(m, 3) - (Cells(m - 2, 3) - 1) ^ 2)) * (Cells(m, 4) * 0.1) * (Cells(m, 7) * 0.000001))$ 'energia formazione difetti in Joule

$N_s = 5E+22 * (\text{Exp}(-E_a / ((1.38 * 10^ - 23) * (Cells(m, 8) + 273.15))))$ 'densità difetti

Cells(m, 13) = r

Cells(m, 15) = A

Cells(m, 9) = K

$W_a = Cells(m, 3) - Cells(m - 2, 3)$

Cells(m, 22) = $\Sigma / 10000000000\#$ 'stress superficiale

Cells(m, 23) = $\Sigma_f / 10000000000\#$ 'stress film

Cells(m, 24) = strain 'strain del layer

Cells(m, 28) = Cells(m + 1, 7) / Cells(m, 7) 'rilassamento

Cells(m, 30) = Abs((Cells(m, 28) * W_a) + Cells(m - 2, 3)) 'nuova costante reticolare

If Cells(m, 30) > Cells(m, 3) Then

Cells(m, 30) = Cells(m, 3)

End If

If Cells(m, 28) < 1 Then

Cells(m, 27) = 0

Else

Cells(m, 27) = (((Ns) ^ (0.3333)) ^ 2) 'densità difetti x cm2

End If

End If

Next m

Errore:

End Sub

Private Sub commandbutton8_click() *'selezione materiali per calcolo mismatch reticolare*

On Error GoTo Errore:

j = InputBox("immetti primo layer")

If j = "InGaP" Then

x = InputBox("immetti %Ga tra 0-1", "InGaP")

k1 = (5.8687 - (0.4182 * x))

Elseif j = "AlInP" Then

x = InputBox("immetti %Al tra 0-1", "AlInP")

k1 = 5.86 - (0.3965 * x)

Elseif j = "AlP" Then

k1 = 5.45635

Elseif j = "GaAs" Then

k1 = 5.65325

Elseif j = "GaP" Then

k1 = 5.8687

Elseif j = "InP" Then

k1 = 5.8687

Elseif j = "Si" Then

k1 = 5.431

Elseif j = "Ge" Then

k1 = 5.658

Elseif j = "AlGaP" Then

x = InputBox("immetti %Al tra 0-1", "AlGaP")

k1 = 5.4635 * x + (1 - x) * 5.4505

Elseif j = "AlGaAs" Then

x = InputBox("immetti %Al tra 0-1", "AlGaAs")

k1 = 5.6533 + (0.0078 * x)

Elseif j = "SiGe" Then

x = InputBox("immetti %Ge tra 0-1", "SiGe")

k1 = 5.431 + 0.2 * x + 0.027 * (x ^ 2)

Elseif j = "SiGeSn" Then

x = InputBox("immetti %Si tra 0-1", "SiGeSn")

```

y = InputBox("immetti %Sn tra 0-1", "SiGeSn")
k1 = 5.658 - (0.227 * x) - 0.026 * (1 - x) - (1.958 * y) + 0.166 * (1 - y)

Elseif j = "InAlAs" Then
x = InputBox("immetti %In tra 0-1", "InAlAs")
k1 = (6.0583 * x) + (5.66139 * (1 - x))

Elseif j = "InGaAs" Then
x = InputBox("immetti %Ga tra 0-1", "InGaAs")
k1 = 6.0583 - (0.405 * x)

Elseif j = "InGaAsP" Then
x = InputBox("immetti %In tra 0-1", "InGaAsP")
y = InputBox("immetti %As tra 0-1", "InGaAsP")
k1 = ((1 - x) * y * 6.0583) + ((1 - x) * (1 - y) * 5.8687) + (x * y * 5.6533) + (x * (1 - y) * 5.4505)

Elseif j = "GaAsP" Then
x = InputBox("immetti %As tra 0-1", "GaAsP")
k1 = (5.65325 * x) + (5.4505 * (1 - x))

Elseif j = "AlInGaP" Then
x = InputBox("immetti %Al tra 0-1", "AlInGaP")
y = InputBox("immetti %In tra 0-1", "AlInGaP")
k1 = (5.45635 * x) + (5.8687 * y) + ((1 - x - y) * 5.4505)

End If

ja = InputBox("immetti secondo layer") 'calcolo composizione II layer per match reticolare con I layer

tx = 0

If ja = "InGaP" Then
For L = 0 To 1 Step 0.0001
k2 = (5.8687 - (0.4182 * L))
res = 1 / (1 + Math.Exp(-(k2 - k1)))
If res <= 0.5 Then Exit For
Next

Elseif ja = "AlInP" Then
For L = 0 To 1 Step 0.0001
k2 = (5.86 - (0.3965 * L))
res = 1 / (1 + Math.Exp(-(k2 - k1)))
If res <= 0.5 Then Exit For
Next

Elseif ja = "AlP" Then
k2 = 5.45635

Elseif ja = "GaAs" Then
k2 = 5.65325

Elseif ja = "GaP" Then
k2 = 5.4505

Elseif j = "InP" Then
k2 = 5.8687

Elseif ja = "Si" Then
k2 = 5.431

```

```
Elseif ja = "Ge" Then
  k2 = 5.658
```

```
Elseif ja = "AlGaP" Then
  For L = 0 To 1 Step 0.0001
    k2 = 5.4635 * L + (1 - L) * 5.4505
    res = 1 / (1 + Math.Exp(-(k2 - k1)))
    If res <= 0.5 Then Exit For
  Next
```

```
Elseif ja = "AlGaAs" Then
  For L = 0 To 1 Step 0.0001
    k2 = 5.6533 + (0.0078 * L)
    res = 1 / (1 + Math.Exp(-(k2 - k1)))
    If res <= 0.5 Then Exit For
  Next
```

```
Elseif ja = "SiGe" Then
  For L = 0 To 1 Step 0.0001
    k2 = 5.431 + 0.2 * L + 0.027 * (L ^ 2)
    res = 1 / (1 + Math.Exp(-(k2 - k1)))
    If res <= 0.5 Then Exit For
  Next
```

```
Elseif ja = "SiGeSn" Then
  tx = 0
  For L = 0 To 1 Step 0.001
    Do
      k2 = 5.658 - (0.227 * L) - 0.026 * (1 - L) - (1.958 * tx) + 0.166 * (1 - tx)
      res = Abs(k2 - k1)
      If res <= 0.0001 Then GoTo messaggio1
      tx = tx + 0.001
    Loop Until tx >= 1
  messaggio1:
    If Abs(L + tx) >= 1 Then GoTo passa1

    TextBox1.Text = Format(L, "0.00000")
    TextBox2.Text = Format(tx, "0.00000")
    MsgBox "", vbOKOnly, ""
```

```
passa1:
  tx = 0

  Next L
```

```
Elseif ja = "InAlAs" Then
  For L = 0 To 1 Step 0.0001
    k2 = (6.0583 * L) + (5.66139 * (1 - L))
    res = 1 / (1 + Math.Exp(-(k2 - k1)))
    If res <= 0.5 Then Exit For
  Next
```

```
Elseif ja = "InGaAs" Then
  For L = 0 To 1 Step 0.0001
    k2 = 6.0583 - (0.405 * L)
    res = 1 / (1 + Math.Exp(-(k2 - k1)))
    If res <= 0.5 Then Exit For
  Next
```

```
Elseif ja = "InGaAsP" Then
  tx = 0
```

```

For L = 0 To 1 Step 0.01
  Do
    k2 = ((1 - L) * tx * 6.0583) + ((1 - L) * (1 - tx) * 5.8687) + (L * tx * 5.6533) + (L * (1 - tx) * 5.4505)
    res = Abs(k2 - k1)
    If res <= 0.001 Then Exit For
    tx = tx + 0.01

  Loop Until tx >= 1
  tx = 0

Next L

Elseif ja = "GaAsP" Then
  For L = 0 To 1 Step 0.0001
    k2 = (5.65325 * L) + (5.4505 * (1 - L))
    res = 1 / (1 + Math.Exp(-(k2 - k1)))
    If res <= 0.5 Then Exit For
  Next

Elseif ja = "AlInGaP" Then
  tx = 0
  For L = 0 To 1 Step 0.001
    Do
      k2 = ((L) * 5.45635) + (tx * 5.8687) + ((1 - L - tx) * 5.4505)
      res = Abs(k2 - k1)
      If res <= 0.00001 Then GoTo messaggio
      tx = tx + 0.0001

    Loop Until tx >= 1
messaggio:
    If Abs(L + tx) >= 1 Then GoTo passa

    TextBox1.Text = Format(L, "0.00000")
    TextBox2.Text = Format(tx, "0.00000")
    MsgBox "", vbOKOnly, ""

passa:
    tx = 0

  Next L
End If

' MsgBox L, vbOKCancel, "x%elemento"
' MsgBox tx, vbOKCancel, "y%elemento"
' MsgBox res, vbOKCancel, "delta"
TextBox1.Text = L
TextBox2.Text = tx

If TextBox2.Text = 0 Then
  TextBox2.Text = ""

End If

Errore:

End Sub

Private Sub CommandButton10_Click()

UserForm2.Show

End Sub

Private Sub CommandButton11_Click() 'inserimento nuove costanti reticolari

For m = 0 To ListBox2.ListCount Step 2

If m > 2 Then

```

On Error GoTo Errore:

Cells(m, 3) = Cells(m, 30)

Cells(m, 30).Clear

End If

Next m

CommandButton11.Enabled = False

Errore:

End Sub

Private Sub UserForm_Click()

End Sub

5. Bibliografia

- [1] Jon C. Freeman, *Basic Equations for the Modeling of Gallium Nitride (GaN) High Electron Mobility Transistors (HEMTs)*, Glenn Research Center, Cleveland, Ohio - NASA/TM—2003-211983.
- [2] J. W. Matthews and A. E. Blakeslee, *Defects in epitaxial multilayers. I. Misfit dislocations*, J. Cryst. Growth 27 (1974)118-125.