



HAL
open science

A numerical study of brittle fracture in monocrystalline silicon

Zineb Boulaajaj, Daniel Nelias, Marion Fourmeau

► **To cite this version:**

Zineb Boulaajaj, Daniel Nelias, Marion Fourmeau. A numerical study of brittle fracture in monocrystalline silicon. 25e Congrès Français de Mécanique, Nantes, 29 août-2 septembre 2022, Aug 2022, Nantes, France. hal-04280073

HAL Id: hal-04280073

<https://hal.science/hal-04280073>

Submitted on 13 Nov 2023

HAL is a multi-disciplinary open access archive for the deposit and dissemination of scientific research documents, whether they are published or not. The documents may come from teaching and research institutions in France or abroad, or from public or private research centers.

L'archive ouverte pluridisciplinaire **HAL**, est destinée au dépôt et à la diffusion de documents scientifiques de niveau recherche, publiés ou non, émanant des établissements d'enseignement et de recherche français ou étrangers, des laboratoires publics ou privés.

Étude numérique de la rupture fragile du silicium monocristallin

Z. BOULAAJAJ^a, D. NELIAS^b, M. FOURMEAU^c

Univ Lyon, INSA Lyon, CNRS, LaMCoS, UMR5259, 69621 Villeurbanne, France

a. zineb.boulaajaj@insa-lyon.fr

b. daniel.nelias@insa-lyon.fr

c. marion.fourmeau@insa-lyon.f

Résumé :

Le silicium est le deuxième élément le plus abondant sur terre. Il est très utilisé dans les cellules photovoltaïques tout comme dans l'industrie des semi-conducteurs. En mécanique de la rupture, de nombreuses études ont été menées pour appréhender les tendances d'une rupture 'fragile' par clivage. Dans les travaux de Wang [1], il a été montré que la vitesse de propagation des fissures dans le silicium monocristallin peut atteindre jusqu'à 80% de la vitesse des ondes de Rayleigh. Cette vitesse limite a soulevé de nombreuses questions quant à sa dépendance aux phénomènes microscopiques se produisant en amont du front de fissure ou encore à son interaction avec les ondes élastiques [2].

Notre étude a pour but de rendre compte du caractère dynamique de la propagation de fissure et des ondes dans la structure afin de quantifier cette vitesse et de suivre son évolution dans le temps. En simulation numérique et par la méthode des Eléments Finis Etendus XFEM, une étude préliminaire a d'abord été menée pour établir tous les paramètres numériques qui pourraient intervenir et influencer sur l'apparition et l'évolution d'une discontinuité mobile. En raison d'une vitesse de propagation très élevée et de la taille de nos échantillons, la fissuration totale est atteinte en quelques microsecondes. D'un point de vue numérique, la modélisation avec précision de ces changements brusques et l'interaction des ondes avec la fissure supposent l'intégration temporelle des équations de la dynamique par un schéma explicite. Nos travaux s'attachent aussi à proposer une nouvelle stratégie numérique capable de simuler l'initiation et la propagation de fissure en se basant uniquement sur le critère de Griffith et sans avoir recours à un critère conditionnant la vitesse de propagation de la fissure. Quand l'intégrale J calculée le long du front de fissure atteint la valeur du taux de restitution de l'énergie de déformation critique G_c , la propagation de la fissure est initiée. L'incrément de fissure est régi par la différence entre la quantité d'énergie calculée et l'énergie de surface du matériau. Toutefois, la mise au point de notre méthode numérique n'est vérifiée que si la modélisation utilisée s'appuie sur des résultats expérimentaux.

À des fins de comparaison, un modèle 3D a été utilisé pour représenter la géométrie des fissures traversant l'épaisseur de notre échantillon et l'enrichissement discontinu XFEM est pris en compte dans la construction de la matrice de masse [3]. Toutefois, notre modèle omet l'enrichissement singulier et le silicium est traité comme un matériau isotrope malgré son comportement anisotrope.

Abstract :

Silicon is the second most abundant element on earth, and a widely used material in solar cells and in the semi-conductor industry. In fracture mechanics, numerous studies were conducted to apprehend its

cleavage failure and patterns. Interestingly, it was found that the crack propagation in monocrystalline silicon can reach up to 80% of Rayleigh wave speed [1]. This limiting velocity has raised many questions such as its dependence on micro-processes occurring ahead of the crack tip or the existence of special waves interacting with the crack front [2]. Our study is carried out to comprehend the kinetic aspects of cracks, and predict the propagation velocity and its evolution along the crack path.

In our numerical study, an extensive study was first conducted to set all the numerical features that might intervene and impact the onset and evolution of rapid crack propagation. Due to its high velocity and the wafer size, final rupture is achieved in a matter of microseconds, which confirms the necessity of using an explicit time integration scheme. This latter was combined with the fracture approach XFEM to accurately model the abrupt changes and waves interaction with the crack. Among the existing crack propagation criterion, our work relies only on Griffith's for the initiation and propagation. The crack is set to propagate once the computed J-integral along its front reaches the critical strain energy release rate G_c . If the computed amount of energy exceeds the material surface energy, newly crack surfaces are created based upon this energy difference. From the specimen geometry, we deduce the crack increment. The crack propagation algorithm was implemented using the open source code Castem.

For comparative purposes, a 3D model was used to capture the geometry of through-thickness cracks and the discontinuous enrichment within XFEM is considered while lumping the mass matrix [3]. However, our model omits the singular enrichment and the silicon is treated as an isotropic material despite its inherent anisotropy.

Mots clefs : rupture dynamique fragile, Éléments Finis Étendus (X-FEM), schéma d'intégration explicite

1 Introduction

Dans le domaine de la mécanique de la rupture, l'aspect dynamique est principalement associé au caractère dynamique des sollicitations mécaniques ou à une propagation rapide de la fissure. Dans notre étude, nous nous intéressons particulièrement à la rupture rapide par clivage du silicium monocristallin sous une sollicitation quasi-statique. Dans les travaux de Freund [4], les équations théoriques développées supposent que la fissure atteint une vitesse maximale égale à la vitesse des ondes de Rayleigh. Toutefois, cette limite théorique est rarement atteinte expérimentalement. Dans le cas du silicium, Wang [1] a révélé que la fissure se propage à des vitesses ne dépassant jamais 80% de la vitesse des ondes de Rayleigh. Cette délimitation de vitesse a aussi été soulignée dans les travaux de Fineberg [5] sur le PMMA.

Notre étude a pour but de révéler les mécanismes dissipatifs empêchant la fissure d'atteindre sa vitesse maximale. Pour ce faire une approche de simulation 3D basée sur le couplage de la méthode des Éléments Finis Étendus XFEM et du schéma explicite de la différence centrée est proposée. Il convient aussi de noter qu'aucun critère de propagation n'est intégré au modèle. La propagation est spontanément régie par l'intégrale J calculée en son front. En effet, ce type de modélisation permettra de retranscrire les phénomènes de rupture sans influencer le comportement de la fissure ni sa vitesse tout au long de sa propagation.

2 Définition du modèle

Malgré les récents développements en XFEM, la simulation du comportement de la fissure et son évolution en temps reste une tâche longue et fastidieuse à mettre en place en particulier pour une intégration temporelle explicite. Le rajout de l'aspect 3D au problème révèle le caractère unique et innovant de notre étude. Bien que la formulation explicite permette de modéliser plus finement les phénomènes, elle nécessite beaucoup de ressources en termes de durée de calcul et de mémoire. Parmi les logiciels d'EF existants, notre choix a été porté sur le logiciel Cast3m [6] qui est un code implicite mais offrant une plus grande liberté en matière de développement et un accès à diverses fonctionnalités de modélisation. Notre modèle de référence représente un wafer de taille 7mm x 6mm et d'épaisseur 1mm. Une pré-entaille débouchante de longueur 1,198mm est intégrée au modèle par la méthode des level-sets propre à XFEM. Pour cette analyse, la fissure par clivage se propage de façon rectiligne dans le prolongement de la pré-entaille. Afin d'alléger le modèle et réduire le temps de calcul, nous avons segmenté le maillage en plusieurs zones afin de conférer la zone enrichie uniquement à la partie centrale de la plaque. Bien qu'en expérience, les wafers sont sollicités en flexion, pour ce premier modèle numérique, nous allons nous limiter à l'étude d'une sollicitation quasi-statique en traction.

3 Simulation numérique en rupture dynamique

3.1 Discrétisation spatiale

En plus de décrire précisément la géométrie des discontinuités par les level-sets, la méthode XFEM permet d'enrichir la base des fonctions de forme en introduisant deux types d'enrichissement : enrichissement saut uniquement ou enrichissement saut et enrichissement singulier. Dans un premier temps, nous allons considérer que l'enrichissement saut. Pour ce faire, plusieurs hypothèses de modélisation sont à prendre en compte afin d'appréhender les problèmes issus de l'absence du deuxième enrichissement. Tout d'abord, il est important que la pré-entaille soit située au milieu d'un élément et que son front puisse arriver au bord de l'élément où elle se trouve. Dans Cast3M, l'intégrale de contour J est évaluée sur un domaine d'intégration défini par le nombre de couches d'éléments autour d'un nœud du front de fissure. Afin de réduire l'influence de ce domaine d'intégration sur la précision des résultats de J, on veillera à ce que la pré-entaille traverse au moins 3 éléments, soit au minimum 3 couches d'éléments autour du front de fissure.

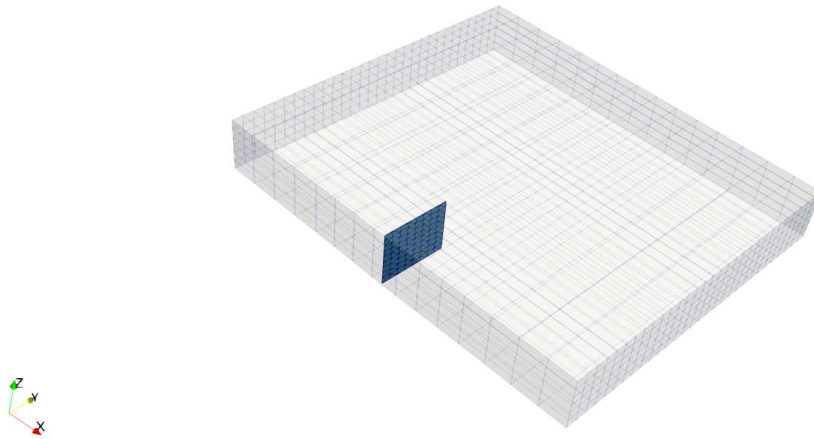


FIGURE 1 – Géométrie et maillage du wafer avec pré-entaille.

3.2 Discrétisation temporelle

Si la fissure se propage à des vitesses rapides relativement proches de la vitesse du son dans le matériau, la prise en compte des effets d'inertie s'avère indispensable. Dans ce contexte, suivre la propagation de la fissure à chaque instant par l'implémentation d'un schéma explicite tout en prenant en compte les mécanismes tridimensionnelles influant la propagation, représente un enjeu de taille. Toutefois, la formulation explicite nécessite beaucoup de ressources en termes de durée de calcul. De ce fait, un calcul préliminaire par intégration implicite est effectué afin de suffisamment contraindre notre structure et par ce biais atteindre le critère d'initiation de la fissure. Cette étape est suivie par un calcul explicite par différences centrées permettant de faire propager la fissure. Durant ces calculs, la sollicitation mécanique est maintenue constante et relève du dernier chargement appliqué en implicite.

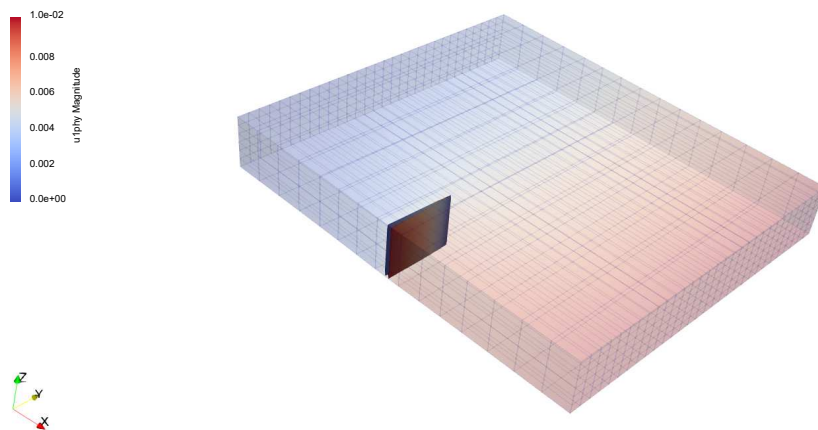


FIGURE 2 – Représentation du modèle EF/XFEM à la fin du calcul implicite.

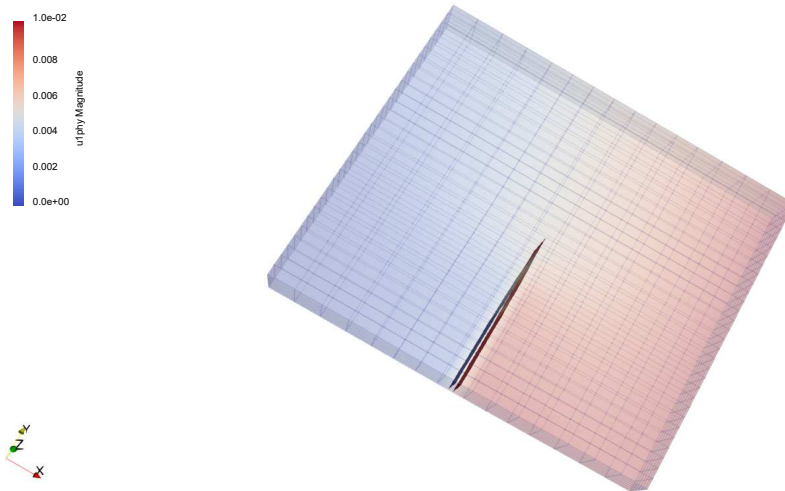


FIGURE 3 – Propagation de la fissure en calcul explicite.

3.3 Critères de propagation

La propagation de la fissure repose essentiellement sur l'énergie de surface γ . Cette énergie permet de créer deux surfaces d'aire 1mm^2 . Par conséquent, l'excès d'énergie issu de la différence entre l'énergie de contour J et l'énergie de surface va générer deux nouvelles surfaces dont l'aire est calculée par une relation de proportionnalité. Selon les dimensions de la plaque (d'épaisseur e), nous pouvons en déduire l'incrément de longueur $l_{fissure}$ de la fissure (cf. Eq. (1) (2)).

Comme montré par les graphes Figs. 4 et 5, l'intégrale J est évaluée en pointe de fissure à chaque pas de temps du calcul explicite. Si la valeur de cette dernière est suffisante pour propager d'un élément ou plus, la longueur de fissure est calculée et les level-sets sont actualisés pour représenter l'évolution de la discontinuité dans la structure (cf. Fig. 3).

$$A_{créée} = \frac{J - \gamma}{\gamma} \quad (1)$$

$$A_{créée} = 2 \times e \times l_{fissure} \quad (2)$$

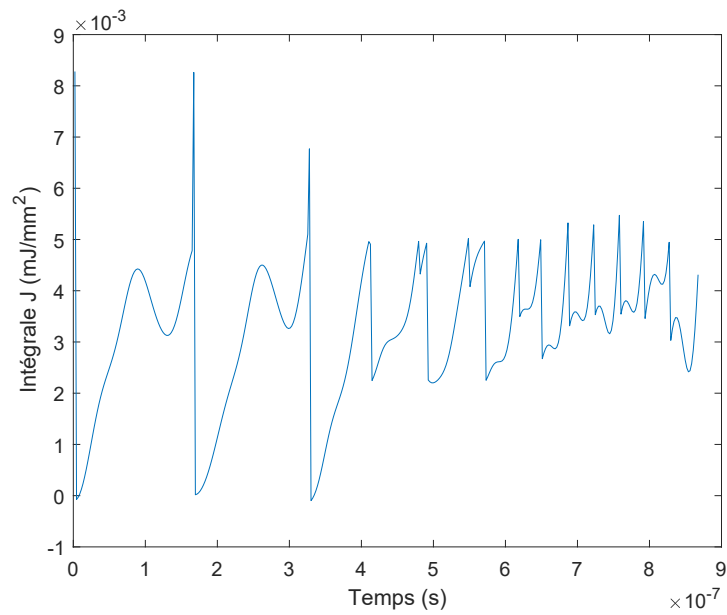


FIGURE 4 – Variation de l'intégrale J en fonction du temps (Explicite).

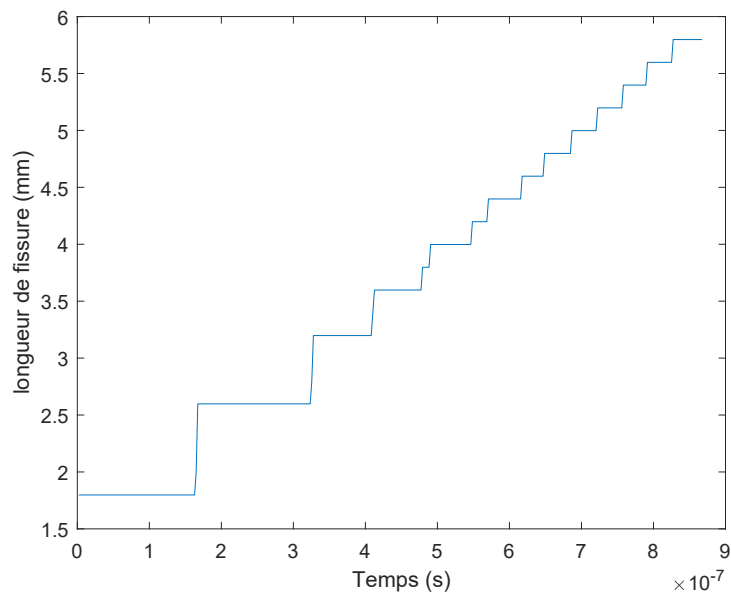


FIGURE 5 – Evolution de la longueur de fissure en fonction du temps.

4 Conclusions et perspectives

Les résultats obtenus par ce modèle simplifié sont prometteurs dans la mesure où la vitesse de propagation moyenne est de l'ordre de 5000 m/s, inférieure à la célérité du son dans le matériau. Il convient par la suite de modéliser des wafers de dimensions semblables à ceux utilisés expérimentalement et de corréler ces calculs de vitesse avec les mesures de vitesse retrouvées par caméra rapide ou par le procédé de mesure de la chute du potentiel.

Références

- [1] M. Wang, L. Zhao, M. Fourmeau, D. Nélías, Crack plane deflection and shear wave effects in the dynamic fracture of silicon single crystal, *Journal of the Mechanics and Physics of Solids* 2019, *122*, 472–488.
- [2] M. Wang, M. Fourmeau, L. Zhao, F. Legrand, D. Nélías, Self-emitted surface corrugations in dynamic fracture of silicon single crystal, *Proceedings of the National Academy of Sciences* 2020, *117*, 16872–16879.
- [3] T. Menouillard, J. Réthoré, A. Combescure, H. Bung, Efficient explicit time stepping for the eXtended Finite Element Method X-FEM, *International Journal for Numerical Methods in Engineering* 2006, *68*, 911–939.
- [4] L. B. Freund, *Dynamic Fracture Mechanics*, Cambridge University Press 1990.
- [5] J. Fineberg, S. P. Gross, M. Marder, H. L. Swinney, Instability in dynamic fracture, *Physical Review Letters* 1991, *67*, 457–460.
- [6] Cast3M, Finite element software developed by the French Atomic Energy Center (CEA), www-cast3M.cea.fr, 2021.