

Modélisation 3D des phénomènes de coalescence de fissures dans le Smart Cut

E. Pali^{1,2}, A. Gravouil¹, A. Tanguy¹, D. Landru², O. Kononchuk²

¹ LaMCoS, Insa-Lyon, {*esso-passi.pali, anne.tanguy, anthony.gravouil*}@insa-lyon.fr

² SOITEC, Grenoble, {*martinien.pali, didier.landru, oleg.kononchuk*}@soitec.com

Abstract — La méthode des éléments finis étendus (X-FEM) a été utilisée pour modéliser la coalescence des fissures, phénomène rencontré lors de la fabrication du SOI par le procédé Smart Cut. Le maillage fractal 3D a été mis en place et permet de gagner jusqu'à environ 90% du temps de calcul par rapport au maillage structuré. Les facteurs d'intensité des contraintes (FICs) sont déterminés via l'intégrale d'interaction avec une précision moyenne de 0,71% sur K_I par rapport à la solution analytique. La coalescence des fissures a été modélisée avec succès via une technique de couplage cast3M-python.

Mots clés — X-FEM, coalescence, Smart Cut, SOI, FICs.

1 Contexte industriel et académique

La compréhension des phénomènes de coalescence des fissures lors de la fabrication des wafers de Silicium sur isolant SOI (de l'anglais Silicon-On-Insulator) par le procédé Smart-Cut est un défi faisant l'objet de recherches scientifiques. Le Smart Cut, inventé en 1991 par M. Bruel [1] et breveté par le CEA-LETI [2], est un procédé technologique de transfert de couches minces d'un substrat à un autre [6]. Ce procédé est industriellement mis en œuvre par la société SOITEC qui en fait usage pour la production de wafers de SOI. La fabrication des circuits intégrés, les plaques photovoltaïques, les puces électroniques, les microprocesseurs sont entre autres quelques unes des applications industrielles des plaques de SOI. L'architecture de ce produit se résume à un isolant qui se trouve incorporé entre une mince couche active de silicium et un substrat de silicium cristallin jouant le rôle de support mécanique

Plusieurs étapes successives composent le processus de fabrication du SOI (voir Fig.1) parmi lesquelles l'étape de la "fracture" qui conduit à une rupture en pleine plaque gouvernée par des phénomènes de croissance puis de coalescence de fissures activés thermiquement par un recuit. En effet, le recuit permet de mettre en pression les petites plaquettes créées par implantation d'ions hydrogène et ou d'hélium; celles-ci augmentent de tailles sous l'effet de la pressions d'hydrogène en passant de l'échelle nanométrique à des dimensions micrométriques par les phénomènes de mûrissement d'Oswald puis de coalescence [2]. Ce dernier consiste en la fusion de deux fissures (relativement proches) en une sous l'effet de la pression de gaz dans les cavités.

Plusieurs investigations ont été effectuées afin d'appréhender au mieux la physique de ces phénomènes de coalescence de fissures au cours du procédé Smart Cut [3]. Des techniques expérimentales basées sur des observations microscopiques [2] ont été menées et ont permis d'estimer la répartition globales des fissures, les surfaces couvertes. D'autres travaux ont été également menés avec des modèles numériques 2D; on peut citer les travaux de R. Gers [7] et D. Sutula [6] La théorie énergétique de Griffith a ensuite été appliquée sur les données recueillies pour analyser l'évolution d'une population de fissures dans le Smart Cut. Bien que ces investigations aient permis d'aboutir à d'énormes informations sur la physique de cette rupture dans ce procédé, les informations telles que les critères de coalescence des fissures, les interactions entre un champ de fissures restent mal cernés.

Cette étude se veut apporter un cadre théorique physiquement fondé permettant de comprendre les phénomènes de coalescence des fissures dans le Smart Cut à partir d'un modèle numérique. Pour ce faire, la méthode des éléments finis étendus X-FEM a été choisie afin de profiter de ses nombreux avantages en termes de précision, robustesse et efficacité sur des problèmes mécaniques plus complexes mais aussi

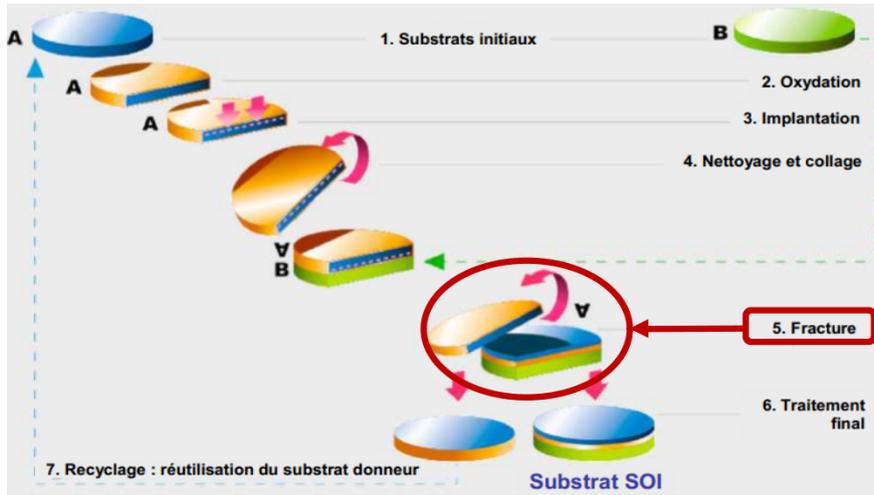


Figure 1: Processus de fabrication du SOI par le Smart Cut [2]

évolutifs dans le temps.

2 Modèle et méthode

Cette section est destinée à la présentation du problème mécanique traité ainsi que la méthode numérique choisie pour mener l'étude. Nous présentons également l'algorithme implémenté dans le logiciel cast3M pour la prédiction de la pression incrémentale dans les fissures au cours de leur croissance suivant la loi d'évolution en pression utilisée.

2.1 Le problème mécanique

La problématique industrielle de rupture dans le Smart Cut est mécaniquement équivalente à un corps élastique fissuré. Notons Ω le domaine élastique et Γ la fissure soumise à une pression normale à ses lèvres notées Γ^+ et Γ^- comme le montre la Fig.2. Ce type de problème peut être subdivisé en deux sous problèmes: un problème global à l'échelle de la structure avec ses variables primale (champ de déplacement \mathbf{u}) et duale (champ de contraintes de Cauchy $\boldsymbol{\sigma}$ et un problème local à l'échelle de la fissure également avec ses variables primale et duale (champs de déplacement \mathbf{w} et de traction \mathbf{t} aux interfaces de la fissure).

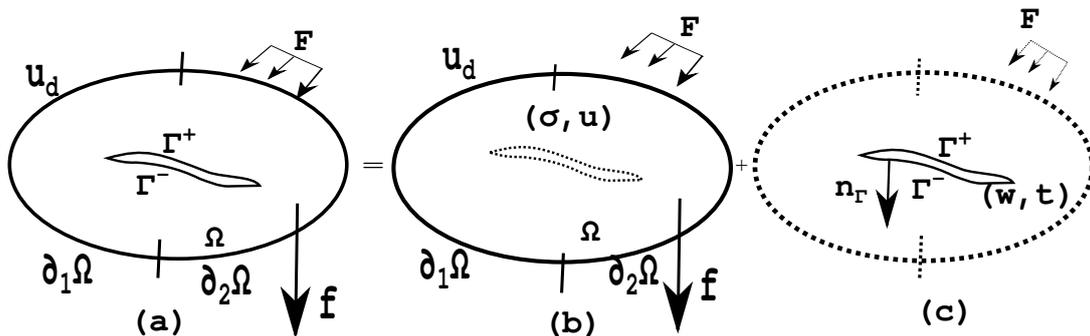


Figure 2: Problème mécanique d'un corps fissuré

La formulation forte du problème s'écrit:

$$\text{Équilibre en volume: } \underline{\text{div}}(\underline{\boldsymbol{\sigma}})(t) + \underline{f}(t) = \underline{0} \quad (1)$$

$$\text{Conditions de Neumann: } \underline{\boldsymbol{\sigma}}(t) \cdot \underline{n} = \underline{F}(t) \text{ sur } \partial_2 \Omega \quad (2)$$

$$\text{Conditions de Dirichlet: } \underline{u}(t) = \underline{u}_d(t) \text{ sur } \partial_1 \Omega \quad (3)$$

$$\text{Loi de comportement en volume: } \underline{\underline{\sigma}}(t) = \underline{\underline{C}} \underline{\underline{\varepsilon}}(t) \text{ dans } \Omega \quad (4)$$

Avec $\underline{\underline{C}}$ le tenseur de Hooke pour un matériau élastique et isotrope.

$$\text{Champ de déplacement aux interfaces de la fissure: } \underline{u}(t) = \underline{w}(t) \text{ sur } \Gamma \quad (5)$$

$$\text{Champ de traction à l'interface de la fissure: } \underline{\underline{\sigma}}(t) \cdot \underline{n} = \underline{t}(t) \text{ sur } \Gamma^+ \text{ et } \Gamma^- \quad (6)$$

Contrairement aux problèmes de contact traités en exemple dans [9], la rupture dans le Smart Cut suppose qu'il n'y ait pas de contact entre les lèvres de la fissure et que les champs de traction aux interfaces de la fissure sont équivalents à la pression de gaz sur les lèvres de la fissure. L'équation (7) peut donc s'écrire:

$$\underline{\underline{\sigma}}(t) \cdot \underline{n} = \underline{t}(t) \text{ sur } \Gamma^+ \text{ et } \Gamma^- \quad (7)$$

La formulation faible du problème s'obtient en appliquant le principe des travaux virtuels. Celle-ci est résumée par la relation (8):

$$\int_{\Omega} \left(\underline{\underline{\sigma}}(t) : \underline{\underline{\varepsilon}}(\underline{u}^*) \right) dV = \int_{\Omega} \underline{f}(t) \cdot \underline{u}^* dV + \int_{\partial_2 \Omega} \underline{F}(t) \cdot \underline{u}^* dS + \int_{\Gamma} \underline{p}(t) \cdot \underline{u}^* dS \quad (8)$$

2.2 L'approche numérique X-FEM

Sur la base des avantages en termes de précision et de robustesse, le modèle numérique a porté sur la méthode X-FEM (eXtended Finite Elements Method) dans le cadre de l'élasticité linéaire de la rupture.

La méthode X-FEM permet de discrétiser la fissure indépendamment du massif. Le couplage entre la fissure et le massif est rendu possible grâce aux fonctions de niveaux (level set) et à l'enrichissement [4][5], ce qui permet de ne pas remailler la structure entière lorsque la fissure évolue dans le temps. Le modèle numérique est mis en place dans Cast3M, logiciel de calcul par la méthode des éléments finis pour la mécanique des systèmes et des structures. L'analyse numérique est basée sur les facteurs d'intensité des contraintes FICs, le taux de restitution d'énergie et le champ de déplacement des lèvres des fissures. Le calcul des FICs est effectué à partir de l'intégrale d'interaction et le taux de restitution d'énergie au moyen de l'intégrale de contour J. Le champ de déplacement des lèvres de la fissure obtenu par le modèle numérique est comparé à sa valeur analytique [2] de même que le K_I (FIC en mode I de rupture). L'étude de la propagation d'une fissure isolée (ou un champ de fissures) sous pression est menée en s'appuyant sur critères de propagation des fissures en mécanique de la rupture tel que le critère énergétique de Griffith..

2.3 La discrétisation X-FEM

Bien que la méthode X-FEM permette globalement de ne plus avoir besoin de remailler tout le massif lorsque la fissure évolue dans le temps, les calcul tridimensionnels sont en général très coûteux en termes de temps de calcul. Ce ci nous amené à mettre en place un type de maillage multi-échelle: le maillage fractal pour remplacer le modèle avec le maillage structuré qui est précis et robuste mais moins efficace. Ce type de maillage développé en 3D permet d'avoir une discrétisation plus fine localement dans la zone d'intérêt (le voisinage de la fissure, voir Fig. 3) au dépend du reste du massif; ceci a permis de gagner environ 90% en temps de calcul comparé aux calculs sur les maillages structurés.

2.4 Calcul des facteurs d'intensité des contraintes

Tout comme la plupart des problèmes de la mécanique de la rupture, l'analyse repose sur le calcul des quantités d'intérêt en l'occurrence les facteurs d'intensité des contraintes (FICs) et le taux de restitution d'énergie. Nous avons choisi de déterminer les FICs à partir de l'intégrale d'interaction: cette techniques permet le découplage de modes et donc d'extraire directement K_I , K_{II} et K_{III} (correspondant aux modes de fissuration I, II et III respectivement en 3D). On considère un contour C d'un domaine S contenant la pointe P de la fissure pour une vue en plan comme sur la Fig. 4.

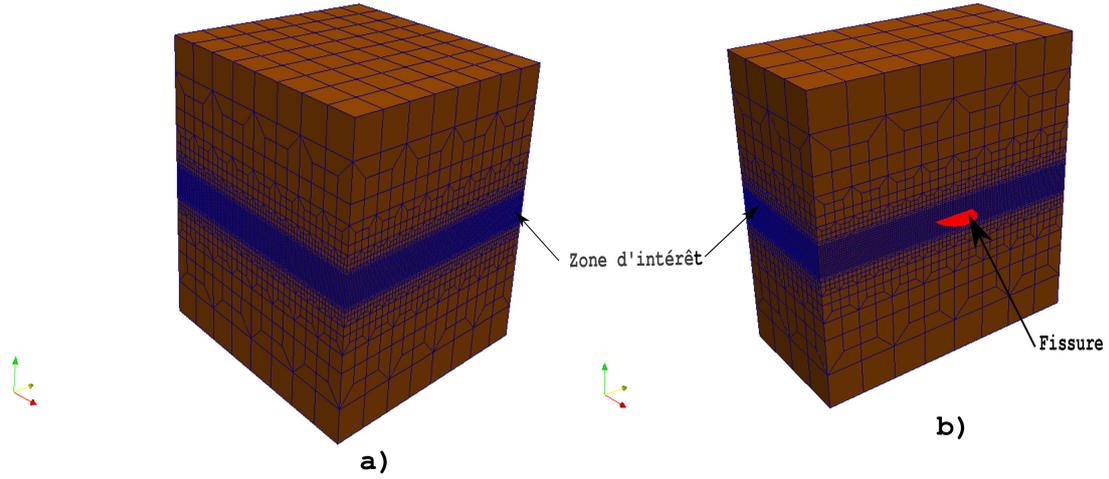


Figure 3: Maillage fractal 3D: a) vue d'un massif entier et b) vue en coupe

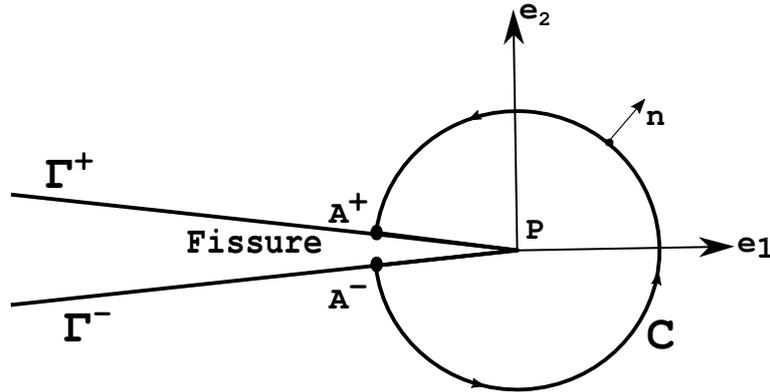


Figure 4: Contour pour le calcul de l'intégrale J

L'expression \tilde{J} de l'intégrale J s'écrit alors:

$$\tilde{J} = J_C + \int_{\Gamma^+ \cup \Gamma^-} \sigma_{22} \left(\frac{\partial u_2^-}{\partial x_1} - \frac{\partial u_2^+}{\partial x_1} \right) \theta d\Gamma = \int_C (W_l \delta_{1j} - \sigma_{ij} \frac{\partial u_i}{\partial x_1}) n_j ds + \int_{\Gamma^+ \cup \Gamma^-} \sigma_{22} \left(\frac{\partial u_2^-}{\partial x_1} - \frac{\partial u_2^+}{\partial x_1} \right) \theta d\Gamma \quad (9)$$

où σ_{22} désigne la densité de forces appliquée sur les lèvres de la fissure et θ les champs de vitesse virtuelles définis sur une zone autour du front de la fissure et $W_l = \frac{\sigma_{ij} \epsilon_{ij}}{2}$.

La superposition d'un état réel (noté R) qui satisfait aux conditions aux limites et un état fictif ou auxiliaire (noté aux) pour lequel les lèvres de la fissure sont libres d'efforts permet d'établir l'expression de l'intégrale d'interaction $I^{R,aux}$:

$$\tilde{I}^{R,aux} = \int_S \left[\sigma_{ij}^R \frac{\partial u_i^{aux}}{\partial x_1} + \sigma_{ij}^{aux} \frac{\partial u_i^R}{\partial x_1} - W_l^{R,aux} \delta_{1j} \right] \frac{\partial \theta}{\partial x_j} dS - \int_{\Gamma^+ \cup \Gamma^-} \left[\sigma_{22}^R \frac{\partial u_2^{aux}}{\partial x_1} + \sigma_{22}^{aux} \frac{\partial u_2^R}{\partial x_1} \right] \theta d\Gamma \quad (10)$$

Le deuxième terme de la relation (10) a donc été ajouté dans la procédure G_THETA de cast3M pour le calcul des FICs avec la méthode X-FEM.

2.5 Propriétés matérielles

Le matériau soumis à l'étude est silicium considéré dans le modèle numérique X-FEM comme un matériau élastique linéaire dont les propriétés mécaniques peuvent être retrouvées dans [8].

2.6 Le modèle analytique et validation de l'approche numérique X-FEM

Le modèle analytique correspondant à la problématique de notre étude est relative à une fissure circulaire dans un massif infini. La fissure est soumise à une pression uniforme P appliquée perpendiculairement sur ses interfaces (voir Fig. 5). L'expression du champ de déplacement normal aux lèvres de la fissure

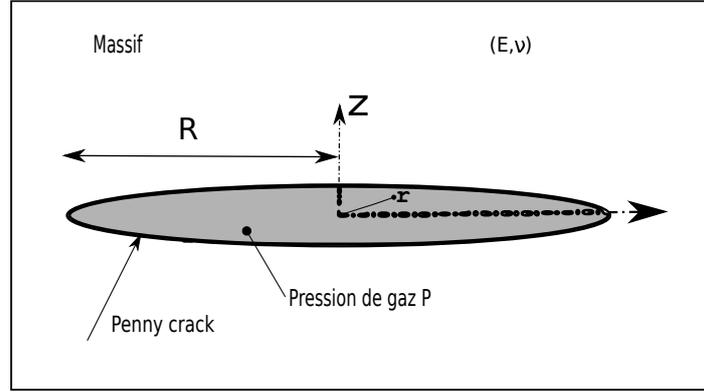


Figure 5: Penny crack sous pression interne

s'écrit:

$$u_z(r, z = 0) = PR \frac{4(1 - \nu^2)}{\pi E} \sqrt{1 - \frac{r^2}{R^2}} \quad (11)$$

Pour un tel type de chargement en mode, le FICs K_I s'écrit:

$$K_{I_analytique} = 2P \sqrt{\frac{R}{\pi}} \quad (12)$$

2.7 Propagation des fissures et coalescence

Notre étude est menée en quasi-statique dans un cadre élastique linéaire. Le critère de propagation d'une fissure est relatif au critère énergétique de Griffith qui porte sur le taux de restitution d'énergie G et sa valeur critique G_c :

$$\begin{cases} G \geq G_c, \text{ la fissure propage} \\ G < G_c, \text{ pas de propagation} \end{cases} \quad (13)$$

L'avancée incrémentale du front de fissure est supposée proportionnelle à $(G - G_c)$. La méthode X-FEM permet de faire avancer la fissure par la mise à jour des level sets et des champs θ , ce qui permet de faire propager deux fissures jusqu'à coalescence contrairement à la méthode standard des éléments finis où modéliser la coalescence de deux fissures est une tâche très complexe voir même impossible compte-tenu du remaillage de tout le système à chaque avancée de fissure. Une fois la coalescence de deux fissures assurée, une technique de couplage cast3M-python permet de redéfinir le front de la fissure issue de la coalescence.

3 Exemple de résultats

3.1 Validation du calcul de K_I

Pour valider notre modèle numérique X-FEM, nous avons effectué un test sur un modèle d'une fissure circulaire de $3\mu\text{m}$ de diamètre centré dans un massif cubique de $60\mu\text{m}$ d'arête. Les FICs K_I , K_{II} et K_{III}

sont représentés sur la Fig.6 en fonction de l'abscisse angulaire définie en chacun des nœuds du front de la fissure. La courbe bleue (K_I avec X-FEM) et rouge (K_I analytique) sont en bon accord avec une

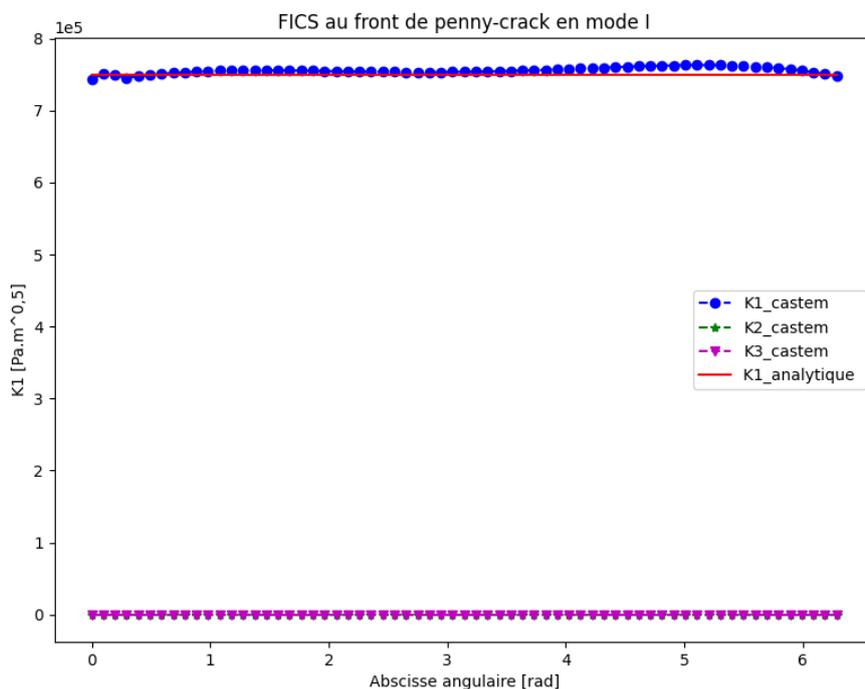


Figure 6: FICs au front d'une fissure circulaire

erreur relative moyenne de 0,71% par rapport à la solution analytique. On peut également remarquer que $K_{II} \ll K_I$ et $K_{III} \ll K_I$: cela montre une bonne estimation de K_{II} et K_{III} avec la méthode numérique (chargement en mode I).

3.2 Modélisation de la coalescence

Nous présentons sur la Fig.7 différents maillages de fissures vue en plan montrant deux fissures qui croissent jusqu'à coalescence. Ces illustrations montrent bien la robustesse de la méthode X-FEM qui a permis de passer de deux fissures à deux fronts à une fissure à un front.

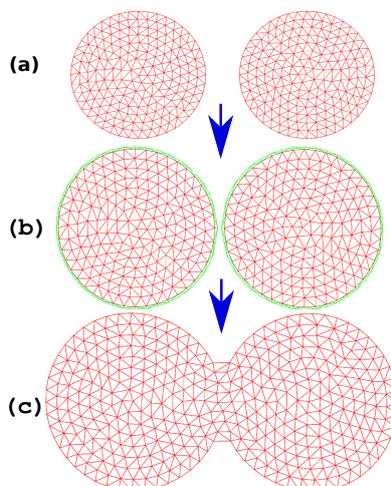


Figure 7: Modélisation de la coalescence de deux fissures: (a) deux fissures initialement circulaires; (b) état pré-coalescence des deux fissures et (c) coalescence des deux fissures

3.3 Conclusion

La méthode X-FEM a été appliquée afin de modéliser la rupture par coalescence de fissures dans le silicium. Le modèle numérique mis en place est applicable au procédé Smart Cut utilisé pour la fabrication des wafers de silicium sur isolant (SOI). Des termes supplémentaires ont été déterminés et ajoutés au calcul de l'intégrale d'interaction afin de prendre en compte la présence de la pression normale aux lèvres des fissures et le tout implémenté dans cast3M. Le maillage fractal a été mis en place afin d'optimiser les temps de calcul et le modèle de coalescence de deux fissures a été mis en place avec succès.

References

- [1] M. Bruel. *Silicon On Insulator material technology*, Electronics letters, 1201-1202, 1995.
- [2] J-D. Penot. *Fragilisation et dynamique de la rupture du silicium implanté*, thèse de doctorat, 2010.
- [3] L. Colonel, F. Mazen, D. Landru, O. Kononchuk, N. Ben Mohamed, F. Rieutord. *In Situ Observation of Pressurized Microcrack Growth in Silicon*, Physics Status Solidi A, (2021).
- [4] N. Moës, A. Gravouil, T. Belytschko. *Non-planar 3D crack growth by the extended finite element and level sets-Part I: Mechanical model*, International Journal for Numerical Methods in Engineering, 2549–2568, (2002).
- [5] N. Moës, A. Gravouil, T. Belytschko. *Non-planar 3D crack growth by the extended finite element and level sets-Part II: Level set update*, International Journal for Numerical Methods in Engineering, 2569–2586, (2002).
- [6] D. Penot. *Energy minimising multi-crack growth in linear-elastic materials using the extended finite elements method with application to Smart-Cut silicon wafer splitting*, Phd. Thesis, 2016.
- [7] R. Gers. *Fragilisation et rupture du silicium implanté dans le procédé SMART CUTTM: Modélisation et simulation par éléments finis*, thèse de doctorat, 2010.
- [8] W-W. Zhang, H. Yu, S-Y. Lei, Q-A. Huang. *Modelling of the elastic properties of crystalline silicon using lattice dynamics*, Journal of physics D: applied physics, 2011.
- [9] B. Trollé. *Simulation multi-échelles de la propagation des fissures de fatigue dans les rails*, thèse de doctorat, 2013.