

文章编号: 0258-7025(2006)07-0963-05

真空镀膜中基底预应力的有限元分析

孙荣阁, 易 奕, 范正修

(中国科学院上海光学精密机械研究所光学薄膜技术研究与发展中心, 上海 201800)

摘要 真空镀膜过程中, 基底因支撑、温度梯度造成的应变会对最终的薄膜-基底系统的面形产生影响。用有限元方法对不同支撑方式下不同尺寸基底的预应力以及烘烤过程中基底内部温度梯度造成的热应力进行了分析和计算, 得到基底表面变形的峰谷值, 并给出了不同工况下基底形变的等值线图。对于尺寸超过200 mm的基底, 自重变形量和热应力变形量比较大, 是影响最终薄膜面形的重要因素; 装夹时随着基底倾角的增大, 基底的形变与应力呈减小趋势; 同样结构尺寸情况下, 熔融石英基底的自重变形量略大于BK7基底, 热变形量远小于BK7基底; 热应力对基底预应力的贡献较大。

关键词 薄膜; 应力; 有限元; 自重变形; 温度梯度; 热应力

中图分类号 O 484 文献标识码 A

Finite Element Analysis for Substrate's Initial Stress in Vacuum Deposition

SUN Rong-ge, YI Kui, FAN Zheng-xiu

(R&D Center for Optical Thin Film Coatings, Shanghai Institute of Optics and
Fine Mechanics, The Chinese Academy of Sciences, Shanghai 201800, China)

Abstract In vacuum deposition, the substrate deformation caused by sustentation and temperature grads can affect the final surface form of film-substrate system. By finite element analysis and calculation on initial stress of different substrates under different sustentation manner, and the thermal stress caused by the interior temperature grads of substrate, $P-V$ values of the substrate surface deformation are gained, and the contours of substrate deformation in different situations are plotted. This analysis shows that the deformation induced by gravity and the thermal deformation are great when its size is over 200 mm, which become the important factor affecting the final film surface form; with the augmentation of substrate obliquity when fixed, the substrate deformation and the stress show decreasing trend; in the same situation, the deformation induced by gravity of the fused silica substrate is a little greater than that of the BK7 glass substrate, while the thermal deformation quantity of the former is further less than the latter; the thermal stress has made greater contribution on substrate's initial stress.

Key words thin film; stress; finite element; deformation induced by gravity; temperature grads; thermal stress

1 引言

薄膜应力是薄膜生产、制备中的普遍现象, 是影响薄膜成品率的关键因素。薄膜应力过大, 会使基底产生一定程度的弯曲变形, 从而使通过薄膜组件传输的光电信息发生畸变, 影响传输特性。在激光辐照下, 预应力的存在会加速薄膜的热力耦合作用, 是薄膜破坏的敏感因素^[1,2]。

不同沉积条件下, 不同材料薄膜表现出不同的

应力性质, 国内外学者已做了大量的研究^[3~6]。然而对于较大尺寸的薄膜, 在沉积条件匹配相当好的情况下, 其应力仍然呈现一定的无规律性。因此研究除沉积条件以外的因素对薄膜应力的影响是非常必要的。

真空镀膜过程中, 基底在夹具的支撑作用下, 会有一定的自重变形, 同时, 电子束蒸发镀膜时, 烘烤时不可避免的温度不均匀性会使基底内部产生一定的温度梯度分布, 造成基底的热应力变形。镀膜过

收稿日期: 2005-12-09; 收到修改稿日期: 2006-01-17

基金项目: 国家863计划(2005AA842040)资助项目。

作者简介: 孙荣阁(1980—), 河南邓州人, 中国科学院上海光学精密机械研究所硕士研究生, 主要从事基底预应力情况下薄膜应力的发展研究。E-mail: sunrongge@siom.ac.cn

程中,基底的预应力将和薄膜的应力发生应力耦合作用,从而对薄膜-基底系统的面形产生影响。因此对因支撑和温度梯度造成的基底应力分布做出分析,有助于对薄膜应力的产生机制作进一步探究。

利用有限元方法对光学主镜受各种影响因素的变形研究,国内外有大量的报道^[7~10]。B. Mack^[7]采用有限元方法分析了4.2 m主镜的支撑状态下的变形和应力情况,得到了镜子的应力分布情况。Myung K. Cho 和 Gary Poczulp^[8]用有限元方法分析了3.5 m反射镜表面热应力变形,与实验研究结果符合得比较好。张德江等^[9]用有限元方法分析了平行光管光组中400 mm平凸透镜的自重变形,并计算了由此引起的波相差,验证了设计的合理性。孙峰等^[10]利用有限元方法分析了激光器腔镜夹持方式对热变形的影响。此外,也有人利用有限元对薄膜沉积过程中应力的变化做出分析^[11]。本文利用

有限元方法对真空室中不同材料、不同尺寸、不同支撑方式下镀膜基底的自重变形及烘烤过程中基底内部温度梯度分布造成的热应力做出了分析,旨在寻找影响薄膜-基底系统应力和面形的关键因素。

2 分析方法和有限元模型

镀膜基底主要有圆形和方形两种,材料常用BK7玻璃和熔融石英,参数如表1所示。以圆形基底为例研究其自重变形与热变形。在镀膜真空室中,基底摆放于夹具上面,采用的支撑方式为轴向环形支撑,夹具材料为硬铝,支撑方式如图1(a)。

首先建立基底的实体模型,然后对实体模型离散化,划分有限元网格。采用高阶三维20节点固体结构单元Solid186进行分网,划分单元6400个,节点31831个。有限元模型如图1(b)所示。

表1 基底的材料参数

Table 1 Material parameters of the substrate

Material	Young's modulus /GPa	Poisson's ratio	Density /(kg/m ³)	Thermal expansion coefficient /×10 ⁻⁶ K ⁻¹
BK7	82.5	0.206	2510	7.5
Fused silica	73	0.105	2200	0.5

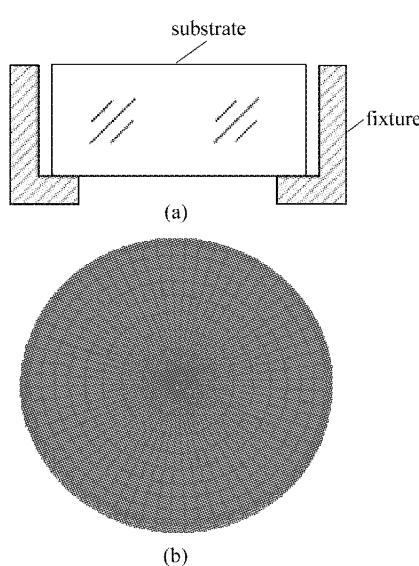


图1 支撑方式和基底的有限元模型示意图

Fig. 1 Schematics of the method of sustentation and finite element model of the substrate

3 不同工况下有限元分析结果及讨论

3.1 不同装夹倾角下基底的自重变形

根据镀膜机真空室内架构的安排和镀膜均匀性

的需要,镀膜机的夹具有平面夹具和球形夹具之分。在平面夹具上装夹的基底,其平面与水平面平行,重力作用方向垂直于基底上下表面;球形夹具上面装夹的基底,底面与水平面呈一定的倾角 α 。随着基底装夹位置离开夹具中心距离的增大, α 逐渐增大。以直径为200 mm,厚度20 mm的圆形基底为例,研究了自重变形随 α 的变化规律。

图2给出了 $\alpha=0$ 和 $\alpha\neq0$ 基底表面变形的等值线分布。当 $\alpha=0$ 时,基底表面变形的等值线为一组同心圆,圆心处为变形量最大处,由圆心向外变形量逐渐减小,在接近约束边界处,变形量又略微增大;当 $\alpha\neq0$ 时,等值线成为一组椭圆,沿着基底的倾斜方向,等值线先疏后密,变形量最大处偏离中心向下偏移。

表2给出了不同 α 值时基底的自重变形量。随着基底装夹倾角的变大,基底自重变形呈减小的趋势。

表2 不同装夹倾角下基底的自重变形量

Table 2 Deformation induced by gravity of the substrate with different obliquities when fixed

Obliquity α / rad	0	$\pi/12$	$\pi/6$	$\pi/4$
Deformation / nm	104	95.4	87.2	74

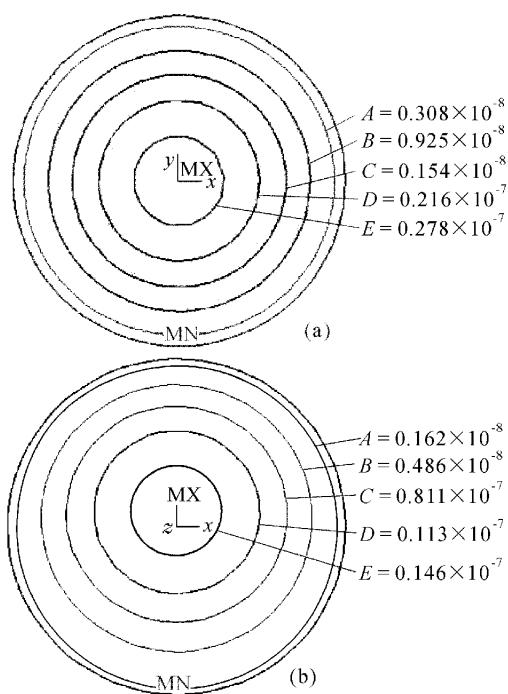
图 2 $\alpha = 0$ (a) 和 $\alpha \neq 0$ (b) 时基底表面变形的等值线图

Fig. 2 Contours of the substrate surface deformation when $\alpha = 0$ (a) and $\alpha \neq 0$ (b)

3.2 相同直径不同厚度的圆形基底的自重变形

讨论重力作用方向垂直于基底上下表面的情况,也即采用平面夹具,装夹时基底倾角 $\alpha = 0$ 。以直径为 400 mm 的基底为研究对象,研究了当其厚度为 10 mm, 20 mm, 30 mm, 40 mm, 50 mm, 60 mm 时的自重变形,如表 3 所示。

表 3 不同厚度基底的自重变形量

Table 3 Deformation induced by gravity of the substrate with different thickness

Thickness / mm	10	20	30	40	50	60
Deformation / nm	1680	774	328	173	122	97.7

由表 3 可见,基底厚度为 10 mm 时,自重变形量非常显著;随着厚度的增加,变形量迅速减小,基底厚度超过 40 mm 时,变形量变化趋于缓慢。对于大尺寸的镀膜基底,在符合应用的条件下,厚度大一些有利于减小自重变形对薄膜面形的影响。

3.3 不同直径的圆形基底的自重变形

仍然考虑 $\alpha = 0$ 的情况。选用较为常用的直径与厚度比为 10:1 的圆形基底作为研究对象,分析了当基底结构尺寸增大时自重变形量的变化规律。如表 4 所示,给出了直径为 100 mm, 200 mm, 300 mm

和 400 mm 的基底的自重变形量的峰谷值。

表 4 不同直径基底的自重变形量

Table 4 Deformation induced by gravity of the substrate with different diameters

Diameter / mm	100	200	300	400
Deformation / nm	5.77	26.3	78.5	173

由表 4 可见,对于直径与厚度比为 10:1 的圆形镀膜基底,直径不超过 200 mm 的情况下,自重变形量并不显著;直径超过 200 mm 的基底,随着尺寸的增大,自重变形量迅速增大,已经成为影响面形的重要因素。

3.4 不同温度梯度下圆形基底的热变形

电子束蒸发镀膜时,烘烤时不可避免的温度不均匀性会使基底内部产生一定的温度梯度分布,造成基底的热应力变形。对于烘烤热源在镀膜机顶部的状况,烘烤时热流辐射在基底上表面上,再由上表面面向下表面传导,下表面的热流也会有一部分向外辐射。因此,烘烤过程中恒温时间不能达到足够长时,基底内部会有自上而下的温度梯度分布,造成基底的热应力变形。

一般情况下,由于变形与温度变化相互耦合,使得问题的求解面临数学上的极大困难。但当物体变形过程中体积保持不变,或当变形速度极为缓慢以致变形对温度的影响可略去不计时,问题将成为非耦合的。在这种情况下,温度场可独立被首先确定,然后再来确定变形场,从而使问题的求解大为简化。在有限元分析中,通常是将温度场分析中得到的节点温度作为“体力”载荷施加在后序的变形分析中就可实现热变形的耦合。

在实际情况中,真空室内烘烤过程中的基底,其内部温度分布是不断变化着的,这种情况下的有限元分析是一个非常复杂的过程。为了简化计算,本着只研究温度梯度对基底变形的贡献的目的,假设一个静态的温度分布,即基底上下表面有恒定的温度差,基底内部有均匀的轴向温度梯度。图 3 所示

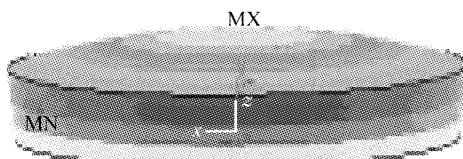


图 3 基底典型热变形示意图

Fig. 3 Schematics of typical thermal distortion of the substrate

为基底典型热变形分布,当上表面温度高于下表面温度时,上表面中心向上突出,下表面中心凹陷。

以直径 200 mm, 厚 20 mm 的圆形基底为例, 假设其上表面温度恒定为 473 K, 当上表面比下表面温度高 0.5 K, 0.3 K, 0.1 K, 0.05 K, 0.03 K 和

0.01 K 时, 基底内部轴向温度梯度分别为 0.25 K/cm, 0.15 K/cm, 0.05 K/cm, 0.025 K/cm, 0.015 K/cm 和 0.005 K/cm。由表 5 看出, 极小的轴向温度梯度造成的热变形已经非常可观, 对基底预变形有着明显贡献。

表 5 不同温度梯度下基底的热变形

Table 5 Thermal deformation of the substrate with different temperature grads

Temperature grads /(K/cm)	0.25	0.15	0.05	0.025	0.015	0.005
Deformation / nm	885	540	197	98	58.2	19.7

另外, 不同尺寸的基底在相同的温度梯度作用下, 其热应力的表现也存在一定的规律。因为温度梯度的作用类似于体力载荷的作用, 因此热应力的尺寸效应类似于自重变形规律。在温度梯度恒定的情况下, 随着基底直径或厚度的增加, 热应力变形呈增大趋势。

3.5 材料参数对基底的自重变形和热变形的影响

材料参数对基底的自重变形和热变形有重要的影响。对于常用的 BK7 玻璃基底和熔融石英基底, 在密度、弹性模量上的差异, 决定了它们的自重变形的不同, 而且它们线性热膨胀系数的差异也导致它们热变形的不同。以直径 200 mm, 厚 20 mm 的圆形 BK7 玻璃基底和熔融石英基底为例, 研究它们的自重变形的差异和轴向温度梯度为 0.05 K/cm 时热变形的差异。

表 6 给出了同样条件下 BK7 基底和熔融石英基底的自重变形和热变形的差异。可以看出, 同样尺寸的熔融石英基底自重变形略大于 BK7 基底, 这是因为熔融石英基底的弹性模量略小于 BK7 基底; 但由于熔融石英基底的线性热膨胀系数远小于 BK7 基底, 而热变形量与线性热膨胀系数是成正比的关系, 因此熔融石英基底的热变形远小于 BK7 基底。

表 6 不同材料基底间两种变形的比较

Table 6 Comparison between two sorts of deformations of the substrate with different materials

Material	Deformation induced by gravity / nm	Thermal deformation / nm
BK7	26.3	197
Fused silica	31.5	16.7

4 结 论

通过对不同支撑方式下基底的自重变形及烘烤

过程中基底内部温度梯度分布造成的热应力作出的有限元分析, 得到了一些有意义的结论。在实际镀膜过程中, 可根据基底自重变形和热变形的规律, 适当选择支撑方式、基底材料和结构尺寸, 在一定程度上控制基底的变形。也可以利用基底的变形和薄膜变形情况达到二者的匹配, 达到在一定范围内控制最终薄膜-基底面形的目的。以上研究仅仅是初步的, 更进一步的基底预应力与薄膜应力的耦合作用正在研究之中, 相关的实验验证也在进行中。

参 考 文 献

- 1 Fan Ruiying, Fan Zhengxiu. Stress analysis of thin films and some testing results [J]. *Optical Instruments*, 2001, 23(5-6): 84~91
范瑞瑛, 范正修. 薄膜应力分析及一些测量结果[J]. 光学仪器, 2001, 23(5-6): 84~91
- 2 Shao Shuying, Fan Zhengxiu, Fan Ruiying et al.. A review of study of stress in thin films [J]. *Laser & Optoelectronics Progress*, 2005, 42(1): 22~27
邵淑英, 范正修, 范瑞瑛 等. 薄膜应力研究[J]. 激光与光电子学进展, 2005, 42(1): 22~27
- 3 A. K. Sinha, T. T. Sheng. The temperature dependence of stresses in aluminum films on oxidized silicon substrates [J]. *Thin Solid Films*, 1978, 48(1): 117~126
- 4 Shao Shuying, Tian Guanglei, Fan Zhengxiu et al.. Influences of the deposition parameters and aging time on the residual stress of SiO₂ films [J]. *Acta Optica Sinica*, 2005, 25(1): 126~130
邵淑英, 田光磊, 范正修 等. 沉积参数及时效时间对 SiO₂ 薄膜残余应力的影响[J]. 光学学报, 2005, 25(1): 126~130
- 5 Shao Shuying, Fan Zhengxiu, Fan Ruiying et al.. Study of residual stress in ZrO₂ thin films [J]. *Acta Optica Sinica*, 2004, 24(4): 437~441
邵淑英, 范正修, 范瑞瑛 等. ZrO₂ 薄膜残余应力实验研究[J]. 光学学报, 2004, 24(4): 437~441
- 6 Shao Shuying, Fan Zhengxiu, Fan Ruiying et al.. Influence of deposition temperature on the properties of ZrO₂ films prepared by electron beam evaporation [J]. *Chinese J. Lasers*, 2004, 31(6): 701~704
邵淑英, 范正修, 范瑞瑛 等. 沉积温度对电子束蒸发沉积 ZrO₂ 薄膜性质的影响[J]. 中国激光, 2004, 31(6): 701~704
- 7 B. Mack. Deflection and stress analysis of a 4.2-m diam primary mirror of an altazimuth-mounted telescope [J]. *Appl. Opt.*, 1980, 19(6): 1000~1010

-
- 8 Myung K. Cho, Gary Poculp . Surface distortions of a 3.5-meter mirror subjected to thermal variations [C]. SPIE, 1991, **1532**, 137~146
- 9 Zhang Dejiang, Liu Liren, Xu Rongwei et al.. Finite element analysis for wavefront error of lenses induced by gravity [J]. *Acta Optica Sinica*, 2005, **25**(4):538~541
张德江, 刘立人, 徐荣伟 等. 透镜自重变形引起波相差的有限元分析[J]. 光学学报, 2005, 25(4):538~541
- 10 Sun Feng, Cheng Zuhai, Zhang Yaoning et al.. Effects of clamping methods for laser mirrors on thermal deformation [J]. *High Power Laser and Particle Beams*, 2003, **15**(8):751~754
孙 峰, 程祖海, 张耀宁 等. 激光器腔镜夹持方式对热变形的影响[J]. 强激光与粒子束, 2003, 15(8):751~754
- 11 D. J. Ward, A. F. Williams. Finite element simulation of the development of residual stress in IAPVD films [J]. *Thin Solid Films*, 1999, **355-356**:311~315

第八届全国激光加工学术会议第二轮通知

“第八届全国激光加工学术会议”将于 2006 年 11 月 25~27 日在广州举办,由中国光学学会激光加工专业委员会主办,华南师范大学信息光电子科技学院和广州市光机电工程研究开发中心承办,得到广州瑞通千里激光设备有限公司、浙江博业激光应用技术有限公司、广州优力激光工程中心和广州安特激光技术有限公司支持。

本次会议邀请到 7 位国际知名专家参加会议并作大会邀请报告,包括:1) 英国利物浦大学 William Steen 教授: The Growth of Laser Material Processing as a Science and an Industrial Process; 2) 德国斯图加特大学 Friedrich Dausinger 教授: Welding with Strongly Focusable Lasers up to 6 kW; 3) 德国汉诺威激光中心主任 Andreas Ostendorf 博士: Laser Micro- and Nanoprocessing Using Short Laser Pulses; 4) 法国 CEA/GERAILP Pascal Aubry 博士: Progress in Laser Direct Manufacturing by Laser Metal Deposition and Selective Laser Melting; 5) 美国 Nebraska-Lincoln 大学 Lu Yongfeng 教授: Laser Material Processing and Characterization at Micro/Nano-scales; 6) 德国 EdgeWave GmbH Du Keming 博士: Micro Material Processing with Diode Pumped Lasers; 7) 德国 BIAS Harald Kohn 博士: Laser Cladding-Applications in Germany。

国外代表以英语报告论文,有现场中文翻译。

本次会议已收到国内论文摘要 131 篇,会议交流论文全文在大会报告之后将由《中国激光》杂志以增刊形式发表(2007 年第 34 卷,《中国激光》增刊论文由 EI 收录),论文作者需支付相应版面费,由《中国激光》编辑部在会后将论文集寄送给论文作者。所有参会论文将由组委会组织专家评审并送交《中国激光》主编终审。如果稿件不能通过评审与终审,该稿件可以参加大会报告交流但将无法在《中国激光》刊出。本次会议不再出光盘论文集。在论文集出版后,正式登记注册的代表(非论文作者)将由组委会寄送一本论文集。

请于 2006 年 9 月 30 日前将论文全文(论文格式要求详见“中国光学期刊网”《中国激光》投稿模板 www.opticsjournal.net)和详细英文摘要电子版(Word 文件格式)发 e-mail 或软盘寄到会议秘书处,过期论文将无法在《中国激光》上统一出版论文集并不予安排会议报告。

组委会将于 2006 年 10 月中旬通告会议节目单和会议报告 Power Point 要求。

会议秘书组通讯处(摘要邮寄地址)

地 址: 北京清华大学机械工程系激光加工研究中心

邮 编: 100084

电 话: (010)62772993, 62796466

传 真: (010)62773862, (010)62796466

联 系 人: 钟敏霖 教授, e-mail: zhml@tsinghua.edu.cn

会议秘书: 张红军 工程师, e-mail: zhhjdme@tsinghua.edu.cn, (010)62773858

有关会议详细信息请上中国光学期刊网查询: www.opticsjournal.net