

机刻光栅复合基底对薄膜内应力的影响研究

张宝庆^{1,2}, 张绍泽², 曹 聪², 高劲松¹

(1.中国科学院长春光学精密机械与物理研究所光学系统先进制造技术重点实验室, 吉林 长春 130022;

2.长春理工大学机电工程学院, 吉林 长春 130022)

摘 要:机械刻划制备大尺寸中阶梯衍射光栅是亚微米级的成槽挤压过程,在薄膜成槽变形过程中应力的产生与分布会直接影响槽形质量。受限于实际加工及检测手段,无法对薄膜内应力进行有效研究与计算。通过建立无基底纯铝膜模型、仅存玻璃基底铝薄膜模型与具有玻璃—铬复合基底的真实铝薄膜等三种模型,采用有限元模拟压痕试验分析方法,对比分析受压区域应力分布情况,总结受压薄膜内应力分布规律。实验研究表明,“三明治”式复合基底有助于薄膜内竖直方向内部应力的分布优化。此研究创新了基底效应与薄膜内应力相互影响关系的研究方法,同时为机刻光栅制备工艺提供借鉴指导。

关键词:机刻光栅;复合基底;残余应力;薄膜;压痕;模拟

中图分类号:TH16;TG371 **文献标识码:**A **文章编号:**1001-3997(2020)05-0037-04

DOI:10.19356/j.cnki.1001-3997.2020.05.009

Study on the Influence of the Gratings Composite Substrate on the Internal Stress of the Film

ZHANG Bao-qing^{1,2}, ZHANG Shao-ze², CAO Cong², GAO Jin-song¹

(1.Optical Technology Research Center of Changchun Institute of Optics, Fine Mechanics and Physics, Jilin Changchun 130022 China;2.Changchun University of Science and Technology, School of Mechanical and Electrical Engineering, Jilin Changchun 130022, China)

Abstract:The mechanical ruling process of fabricating large size echelle is a sub-micro groove extrusion process. The generation and distribution of the stress in the ruling film process will directly affect the groove quality. Due to the actual processing and testing methods, the internal stress of thin film cannot be effectively studied and calculated. In this paper, we compared different regional compressive stress distribution and summarized the distribution regularities by adopting the finite element simulation of indentation test and establishing the true aluminum film model with glass-chromium composite substrate, only glass substrate model and only pure aluminum film model. Experimental results have shown that the sandwich type composite substrate film is helpful to optimize internal stress distribution of film along the vertical direction. This research has innovated the research method of the interaction between substrate effect and the internal stress of thin film, and provided guidance for the ruling process of grating.

Key Words:Ruling Grating; Composite Substrate; Residual Stress; Thin Film; Indentation; Simulation

1 引言

衍射光栅是一种非常精密的核心元件,以其独特的光学性能应用于现代各种光谱仪器上,应用越来越广泛^[1-3],近年来,随着航天以及天文学等领域发展的不断进步,医药、生物、材料等重要学科基本研究的不断深入,因此对光栅的面积及分辨率要求愈来愈高。目前光栅根据不同的加工方法可以分为机械刻划光栅、复制光栅和全息光栅三类,其中,刻划光栅是制备光栅的传统方法,

也是加工高精度中阶梯光栅不可替代的方法,其过程是采用真空镀膜设备获得厚铝薄膜,然后将金刚石刻刀装夹在光栅刻划机刀桥上,通过刻刀的往复运动与工作台的进给运动,金刚石刻刀对铝膜劈压与抛光,最终获得大量间隔均匀的平行沟槽,此过程为非去除材料的塑性隆起加工过程,加工示意,如图 1 所示。

由于光栅刻划加工属于亚微米级超精密加工范畴,受刻划设备精度,环境温度,薄膜材料,刀具磨制质量及人工经验等众多

来稿日期:2019-12-24

基金项目:国家自然科学基金(51405031,51575057,51075042);吉林省自然科学基金项目(20150101023JC);

吉林省教育厅“十三五”科学技术研究项目(KYC-JC-XM-2016-030)

作者简介:张宝庆,(1975-),男,吉林延边人,博士研究生,副教授,主要研究方向:精密和超精密加工

因素的交互影响,成槽机理非常复杂。虽然许多专家学者对刻划光栅过程(如图 2 所示)从薄膜制备、光栅刻划机研制、金刚石刀具设计与磨制、刀具与材料相互作用等方面开展了大量研究并取得了大量研究成果,但刻划槽形回弹及精密控制依然是一个难题,而刻划过程中产生的薄膜内应力及其分布是槽形回弹的重要原因^[3-7]。

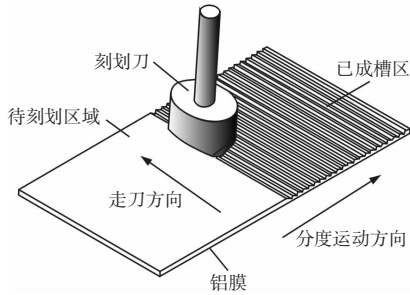


图1 光栅机械刻划示意图
Fig.1 Ruling Process Schematic of Mechanical Scribing Grating



图2 刻划光栅制备过程示意图
Fig.2 The Entire Process Diagram of Ruling Grating Preparation

79g/mm 中阶梯光栅的刻划深度约为 4 μ m,由于薄膜镀制质量要求及现实条件所限,用于刻划的光栅薄膜一般镀制约为 12 μ m,所以光栅薄膜基底必然对薄膜内应力大小及其分布产生重要影响,该影响无疑进一步增加了光栅精密控形的复杂性。结合光栅刻划过程及薄膜的结构特点,采用纳米压痕试验研究薄膜材料的压入与隆起力学属性变化是唯一的实验手段,但由于受压头的灵敏度,传统几何分析法的弊端,仪器本身的系统误差以及基底效应等多方面复杂多因素的影响,在实际压痕实验中无法获得基底对薄膜内应力有价值的影响作用规律,所以采用具有经济、直观、可重复等诸多优点的计算有限元分析研究手段,可有效开展单因素影响与多因素交互影的研究分析,准确分析与预知结果与规律,所以,有限元模拟压痕试验成为该项研究的不二选择。据此,通过建立无基底纯铝膜、单一基底与复合基底等三类模型,采用非线性有限元模拟纳米压入—隆起过程,对比研究三种薄膜内应力大小与分布,进而获知复合基底对薄膜内部应力的影响规律。

2 建模理论基础

纳米压痕实验采用的压头类型及其算法多种多样,常用的有 Berkovich, Vickers, Cube-Corner, Cone 和 Sphere 等压头,这里采用的 Berkovich 压头广泛应用于纳米级材料力学属性的测试中^[8-10]。描述载荷-位移曲线的 Kick 模型加载部分,表达式为:

$$P=Ch^2 \tag{1}$$

国际纳米硬度测量中采用通用的 Oliver-Pharr 模型拟合幂函数来提取最大压痕深度 h_{max} ,以及刚度 S 。表达式如下:

$$P_u=a(h-h_r)^b \tag{2}$$

式中: a —拟合参数; b —压头形状参数; h_r —残余深度,且三者均由最小二乘法确定。刚度 S 为压头卸载瞬间的斜率,即:

$$S=\frac{dP_u}{dh}|_{h=h_{max}}=ab(h_{max}-h_r)^{b-1} \tag{3}$$

通过模型简化处理,采用半锥角 70.3° 的 Berkovich 压头并建立模型,在 ABAQUS 中通过截取二维平面分析作压痕实验,如图 3 所示。

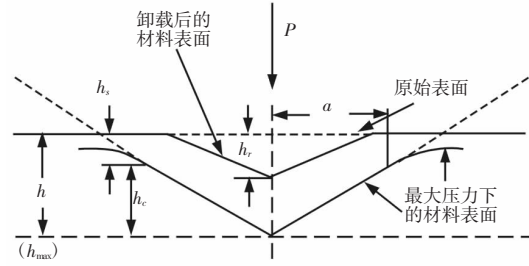


图3 压头压入材料前后各参数示意图
Fig.3 The Various Parameters Before and After Pressing in to the Material by Nano-Pressure

3 试验设计

3.1 材料参数与建模

根据先期对光栅薄膜压痕试验获得的材料力学属性参数,且基于以下假设:(1)模拟过程忽略压头的形变,假定其为理想刚体;(2)假定压头与薄膜之间为库伦摩擦,系数为 0.1;(3)基底各向同性且遵循 Mises 屈服及等向强化准则。

材料参数,如表 1 所示。

表 1 材料参数表
Tab.1 Material Parameter Table

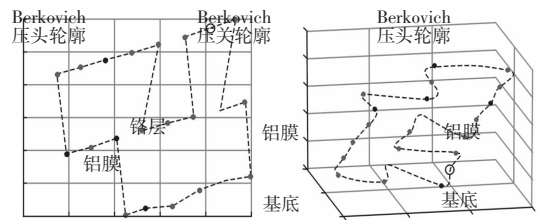
材料	弹性模量 E (GPa)	泊松比 ν	屈服强度 σ_s (MPa)	摩擦系数	应变硬化指数
Al	85	0.33	133	0.1	0.095
Cr	250	0.12	356	0.1	/
玻璃	81	0.205	2000	/	/

为了研究不同基底对薄膜残余应力大小与分布的影响,本实验共建立三组模型,即分别建立超厚纯铝膜、单一玻璃基底铝膜、玻璃基底+镀铬层+铝膜的复合基底铝膜,纯铝膜建模厚度为 62 μ m;复合基底铝膜厚度为 12 μ m,镀铬层厚度为 0.1 μ m,玻璃基底厚度为 50 μ m。

3.2 压入模拟

仅玻璃基底铝膜厚度为 12 μ m,玻璃基底厚度为 50 μ m。实际刻划中槽深约为 3-4 μ m,故在本次实验中采用每次 0.5 μ m 的压深,总压深约为 4 μ m,匀速压入模拟。三个组别铝膜宽度截面均为 100 μ m,消除边缘效应对模拟结果的影响。

对三种铝膜进行纳米压入模拟分析研究,如图 4 所示。



(a) 纯铝膜 (b) 复合基底铝膜 (c) 仅玻璃基底铝膜
图4 对照、实验组别薄膜参数示意图

Fig.4 Parameters Diagram of Reference,the Experimental Group Film

4 试验结果及分析

4.1 不同位置残余应力标准差分析

残余应力是槽形回弹变形的关键,而标准差能反映一个数据集的离散程度,所以对沿水平方向和竖直方向进行残余应力标准差计算分析。其中选择纯铝膜上表面形变量大的 20 μm 连续区域(截面 1/5)进行分析,同样,选取同一位置对复合基底铝膜选取薄膜上表面、膜下表面、镀铬层及玻璃基底上表面,仅玻璃基底铝膜选取上下表面、玻璃基底上表面等相同区域进行分析,得到标准差,如表 2 所示。

表 2 各位置各方向标准差
Tab.2 The Standard Deviation of Each Location

方向		水平	竖直
标准差	位置		
无基底纯铝膜	薄膜上表面	39.346	6.312
	薄膜下表面	/	/
	镀铬层	/	/
	基底上表面	/	/
复合基底铝膜	薄膜上表面	35.499	6.269
	薄膜下表面	90.205	32.676
	镀铬层	101.427	33.497
	基底上表面	17.79	33.34
仅玻璃基底铝膜	薄膜上表面	39.132	6.377
	薄膜下表面	89.46	31.702
	镀铬层	/	/
	基底上表面	31.035	32.351

根据上述表格可知,水平方向薄膜上表面复合基底铝膜的标准差(35.499)明显小于无基底纯铝膜(39.346)和仅玻璃基底铝膜(39.132),复合基底铝膜实验组的镀铬层标准差为 101.427,且其玻璃基底下表面标准差(17.790),明显小于与之对应的仅玻璃基底铝膜实验组(31.035)。

4.2 不同模型残余应力分布情况对比分析

水平方向,如图 5~图 7 所示。

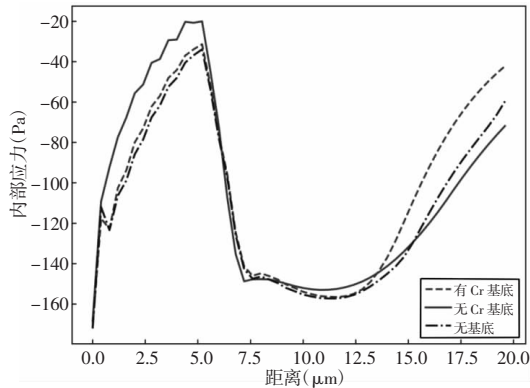


图 5 水平方向薄膜上表面应力分布
Fig.5 Stress Distribution on the Upper Surface of the Film in Horizontal Direction

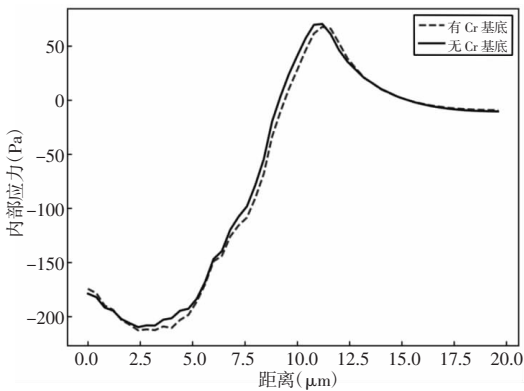


图 6 水平方向薄膜下表面应力分布
Fig.6 Stress Distribution on the Lower Surface of the Film in Horizontal Direction

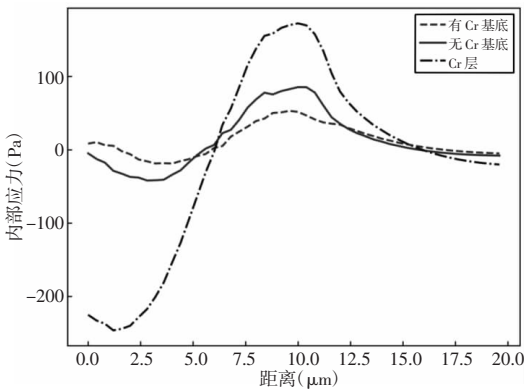


图 7 水平方向基底上表面残余应力分布
Fig.7 Residual Stress Distribution on the Upper Surface of the Substrate in Horizontal Direction

由图 5 可知,水平方向薄膜上表面残余应力均为负值,即拉应力,从 0.8 μm 到 5 μm 的区间内,无基底纯铝膜对照组的残余应力明显小于其它两组铝膜,在大约 14 μm 后,复合基底铝膜实验组的残余应力明显小于其余两组,其余区域水平方向残余应力基本相等。这是由于上表面压入较浅受基底效应影响较轻而复合基底薄膜中镀铬层吸收了部分应力使得其内部应力明显小于其他两组。由图 6 可知,水平方向薄膜下表面残余应力值则无明显差别。且三组薄膜在 9.4 μm 位置前,15.6 μm 后,内部应力为拉应力。图 7 可知,水平方向基底上表面残余应力分布在 6 μm 前,Cr 层残余应力为拉应力,在选取区域 6 μm 至 15.6 μm 之间,各组别残余应力为压应力。且复合基底铝膜实验组的残余应力分布波动明显大于单一玻璃基底铝膜分布波动。

从整体上看,薄膜上表面水平方向应力变化趋势与薄膜下表面镀铬层和基底上表面的水平应力变化趋势刚好相反。在等效压头两边缘处三个组别的应力相较于中间区域存在显著差异。在模拟过程中,等效压头左端压入较深,受到基底对薄膜的反作用力即基底效应较为明显,故无基底纯铝膜的左侧薄膜上表面的水平应力明显小于复合基底铝膜和仅玻璃基底铝膜;而复合基底铝膜中由于镀铬层的存在,其内部水平应力大量集中在铬层,如图 7 所示。使得无基底铝膜上表面左侧水平应力略小于仅玻璃基底铝膜,但二者差别不大,说明基底效应能够减小水平方向薄膜内部应力,但使水平方向的内部应力波动增大,而镀铬层的存在能

够抵消部分基底效应的影响。竖直方向,如图8~图10所示。由图8可知,在薄膜上表面竖直方向上,无基底纯铝膜与复合基底铝膜的残余应力大小相似,且分布规律相同。仅玻璃基底铝膜的应力分布规律与其余两组皆相近,差异主要集中在薄膜上表面左侧压入较深的区域,且仅玻璃基底铝膜的波动幅度异常明显,这与镀铬层对竖直方向内部应力的优化分布作用有关。图9和图10中,在薄膜下表面竖直方向上,镀铬层和基底上表面的残余应力大小相似,且分布规律相同,基底及镀铬层对其影响甚微。

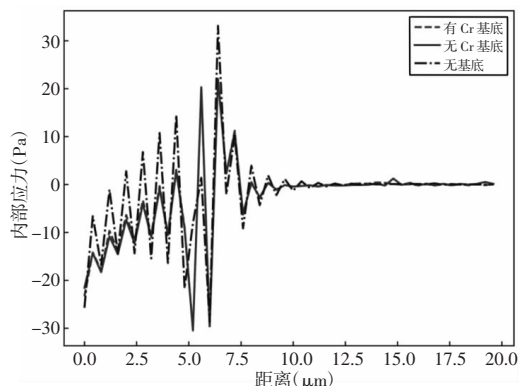


图8 竖直方向薄膜上表面残余应力分布
Fig.8 Residual Stress Distribution on the Upper Surface of the Film in Vertical Direction

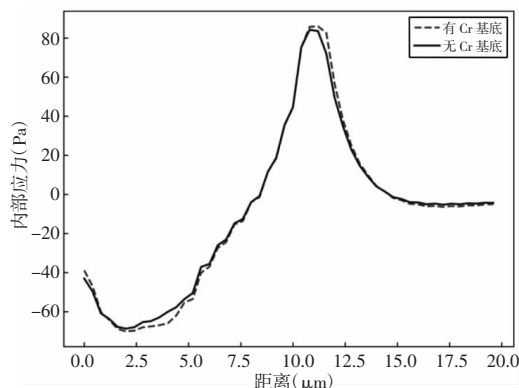


图9 竖直方向薄膜下表面残余应力分布
Fig.9 Residual Stress Distribution on the Lower Surface of Film in Vertical Direction

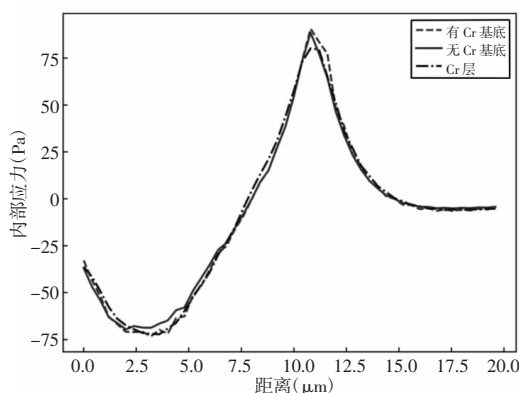


图10 竖直方向基底上表面残余应力分布
Fig.10 Residual Stress Distribution on the Upper Surface of the Substrate in Vertical Direction

5 结论

通过建立单纯铝薄膜、铝—玻璃基底及铝—铬—玻璃复合

基底三种薄膜模型,采用有限元模拟纳米压入过程对比分析,可获得如下规律:

在大压深情况下,薄膜内残余应力基底效应明显。

基底效应的存在会减小薄膜水平方向的内部应力,增大竖直方向内部应力的波动,使得薄膜上表面内部应力分布不均。

镀铬层在减小、优化改善竖直方向薄膜内部残余应力分布方面具有显著效果。

参考文献

- [1] Nevejans D, Neefs E, Van R E. Compact high-resolution spaceborne echelle grating spectrometer with acousto-optical tunable filter based order sorting for the infrared domain from 2.2 to 4.3 microm[J]. Appl Opt, 2006, 45(21): 5191-5206.
- [2] 巴音贺希格. 衍射光栅色散理论与光栅设计、制作和检验方法研究[D]. 长春: 中国科学院研究生院(长春光学精密机械与物理研究所), 2004. (Ba Inhochg. Study on the design theory and fabrication of grating, grating dispersion and diffraction test method[D]. Changchun: Graduate University of Chinese Academy of Sciences (Changchun Institute of optical precision machinery and Physics), 2004.)
- [3] Yang Hai-gui, Li Zi-zheng, Wang Xiao-yi. Radial-quality uniformity investigations of large-area thick Al films[J]. Optical Engineering April 2015, 54(4): 045106(1-6).
- [4] Z.Z. Li, J.S. Gao, H.G. Yang. Structural property investigation on obliquely deposited thick Al films[J]. Surface Engineering, 2016, 32(3): 185-189.
- [5] 刘栋才, 申远, 钟俊. 大型衍射光栅刻划机控制系统研究[J]. 中国科学技术大学学报, 2011, 41(4): 560-564. (Liu D, Yuan S, Zhong J. Research on the controlling system of a grating ruling engine[J]. Journal of University of Science & Technology of China, 2011, 41(6): 560-564.)
- [6] 李英海, 巴音贺希格, 齐向东. 用于衍射光栅刻划的超精密金刚石刻刀的研制[J]. 微细加工技术, 2006(6): 15-17. (Li Ying-hai, Bayanheshig, Qi Xiang-dong. Manufacture of ultra-precise diamond graver for diffraction grating[J]. Microfabrication Technology, 2006(6): 15-17.)
- [7] 石广丰, 史国权, 徐志伟. 中阶梯光栅铝膜的大压深纳米压痕试验[J]. 机械工程学报, 2012, 48(20): 39-44. (Shi Guang-feng, Shi Guo-quan, Xu Zhi-wei. High pressure nanometer indentation test of middle step grating aluminum film [J]. Journal of mechanical engineering, 2012, 48(20): 39-44.)
- [8] Oliver, C., and Pharr, M. "An improved technique for determining hardness and elastic modulus using load and displacement sensing indentation experiments," Journal of Materials Research, 1992, 7(11): 1564-1583.
- [9] 杨承铭, 杨晓京, 刘艳荣. 纳米尺度接触过程力学特性实验研究[J]. 机械设计与制造, 2013(7): 227-229. (Yang Cheng-ming, Yang Xiao-jing, Liu Yan-rong. Experimental study on mechanical properties of nanoscale contact process [J]. Mechanical Design and Manufacture, 2013(7).)
- [10] Bucaille J L, Stauss S, Felder E. Determination of plastic properties of metals by instrumented indentation using different sharp indenters[J]. Acta Materialia, 2003, 51(6): 1663-1678.