

文章编号: 1672-8785(2018)05-0020-05

多层红外光学薄膜的热应力分析

蒋丽媛^{1,2,3} 刘定权^{1,2,3*} 马 冲¹ 高凌山^{1,3}

(1. 中国科学院上海技术物理研究所, 上海 200083;

2. 上海科技大学, 上海 201210;

3. 中国科学院大学, 北京 100049)

摘 要: 通常红外光学薄膜是在较高温度下制备得到的。在低温下应用时, 其产生的热应力会显著影响其光谱性能和可靠性。利用传统桥梁弯曲理论和膜层间位移协调条件分析了多层膜中的水平应变、弯曲应变和热应力分布情况。在详细推导的基础上, 根据膜层厚度远小于基片厚度的实际情况, 得出了多层膜中热应力的简化计算公式。结合长波红外窄带滤光片实例, 分析了其多层膜中热应力的数值大小和分布情况。

关键词: 多层薄膜; 热应力; 红外; 近似算法

中图分类号: 0484 **文献标志码:** A **DOI:** 10.3969/j.issn.1672-8785.2018.05.004

Analysis of Thermal Stress in Multilayer Infrared Optical Thin Film

JIANG Li-yuan^{1,2,3}, LIU Ding-quan^{1,2,3*}, MA Chong¹, GAO Ling-shan^{1,3}

(1. Shanghai Institute of Technical Physics, Chinese Academy of Sciences, Shanghai 200083, China;

2. ShanghaiTech University, Shanghai 201210, China;

3. University of Chinese Academy of Sciences, Beijing 100049, China)

Abstract: Infrared optical films are usually fabricated at higher temperatures. When they are used at low temperatures, the thermos elastic stress generated may significantly affect their spectral performance and reliability. According to the traditional bridge bending theory and the displacement coordination condition, the horizontal strain, bending strain and thermal stress distribution in multilayer films are analyzed. On the basis of detail derivation, the simplified calculation formulas of thermal stress in multilayer films are derived when the thickness of the film is much smaller than that of the substrate. Taking the long-wave infrared narrow-band filter as an example, the numerical value and distribution of thermal stress in multilayer films are analyzed.

Key words: multilayer; thermal stress; infrared; approximate value

0 引言

红外光学薄膜通常在较高温度(200℃以上)下制备得到, 而应用时环境却往往处于低温(-100℃以下)状态, 此情况使得薄膜中会出现一定的应力。应力的存在会影响光学薄膜元

收稿日期: 2018-03-17

作者简介: 蒋丽媛(1990-), 女, 山东济南人, 硕士生, 主要研究光学薄膜应力。

E-mail: jiangly@shanghaitech.edu.cn

件的光谱性能。应力过大时会导致薄膜的开裂或脱落, 从而严重影响各种光学薄膜元器件的稳定性和可靠性。

多层薄膜系统中应力产生的原因较复杂, 大体上可分为三类: (1)内应力。薄膜生长过程中, 由膜层材料的位错、缺陷等结构影响产生; (2)热应力。由于膜层与基片材料的热膨胀系数失配产生; (3)外应力。由环境因素导致。由于第一种情况的应力比较稳定, 通常应用可以不用考虑; 第三种情况主要面临的是温度变化引起的应力。因此, 热应力是红外光学薄膜应用中需要考虑的主要应力形式。

1977 年, 美国学者 C. H. Hsueh 和 A. G. Evans 基于桥梁弯曲理论和膜层界面应变协调理论, 研究了多层膜的热应力分析理论^[1]。后来, 研究人员基于此模型, 建立了多层薄膜中的热应力分布^[2-4]。C. H. Hsueh 将应变分为一致应变部分和弯曲应变部分^[5]。取一个弯曲应力为零的曲面为参考面(也称其为中性面), 以参考面为基础, 分析各个膜层的应力分布情况, 这更适合同质材料的分层情况。V. Teixeira 的热应力分析模型^[6]也扩展到多层膜系统, 但其不足之处在于单层膜的应力大小沿厚度方向没有改变, 与实际情况有一定出入。本文基于力平衡和力矩平衡两个条件和桥梁应力弯曲模型, 推导了多层薄膜的水平应变和弯曲应变的计算公式; 并结合实际情况, 即光学薄膜的膜层厚度远小于基片厚度, 从而推导得到了多层膜中热应力的近似解公式。下面结合具体的长波红外窄带滤光片, 分析其热应力分布情况。

1 多层薄膜系统中的热应力

红外光学薄膜在制作和应用的过程中会面临较大的温度变化, 此时膜层与膜层之间、膜层与基片之间的热膨胀系数失配会产生热应力, 过程主要如图 1 所示。图 1(a)表示没有热应力时薄膜的状态。建立如图 1(a)所示的坐标系, 每层薄膜的厚度为 $t_i (i=1 \cdots n)$, $i=0$ 时 t_0 表示基片厚度。取基片下表面 $y=0$, 沿 y

轴向上, 薄膜每层厚度的坐标值为 $h_i (i=1, 2 \cdots n)$, 第 i 层薄膜上表面的坐标值为 h_{i+1} , 则 h_i 和 t_i 的关系可以表示为^[7]

$$h_i = \sum_{j=0}^{i-1} t_j \quad (i=1, \cdots, n+1) \quad (1)$$

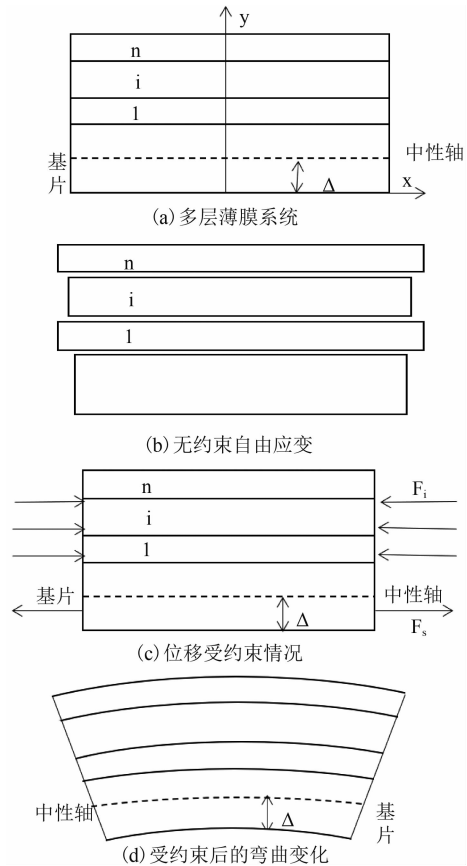


图 1 多层薄膜中热应力产生示意图

弹性多层薄膜冷却至室温时, 温度变化为 ΔT , 基片和薄膜的热膨胀系数分别为 α_0 和 α_i , 多层薄膜会发生应变, 未受约束的应变如图 1(b)所示。薄膜基片层间的约束作用会发生统一的水平热应变 ϵ_h , 如图 1(c)所示。随后, 多层弹性薄膜系统在热应力的作用下发生弯曲应变 ϵ_b , 如图 1(d)所示。薄膜的正常伸缩属于弹性形变。根据胡克定律, 应力 σ_i 与应变成正比, 即

$$\sigma_i = E_i (\epsilon_h + \epsilon_b) \quad (2)$$

式中, E_i 表示第 i 层膜的弹性模量。

1.1 水平应变部分

当温度变化时, 如多层薄膜系统没有约束, 各个膜层的应变为 $\alpha_i \Delta T$ 。由于位移协调

和边界条件的约束, 系统的应变为 ϵ_c , 则第 i 层膜的水平应变为

$$\epsilon_{hi} = \epsilon_c - \alpha_i \Delta T \quad (3)$$

约束后应变部分的合力为零^[8], 即

$$\sum_{i=1}^n F_i + F_s = 0 \quad (4)$$

将各层的应变和弹性模量代入后, 得到的合力为零, 即

$$\sum_{i=0}^n E_i (\epsilon_c - \alpha_i \Delta T) = 0 \quad (5)$$

将式(3)和式(5)代入式(6), 根据实际意义, 对结果小于 10^{-3} 数量级的多项进行化简, 解得水平应变为

$$\epsilon_{hi} = \frac{\sum_{i=0}^n E_i t_i (\alpha_i - \alpha_k) \Delta T}{\sum_{i=0}^n E_i t_i} \quad (0 \leq k \leq n) \quad (6)$$

对于式(6), $k=0$ 时为基底的应变; k 取 $i(1 \leq i \leq n)$ 时为膜层间的应变值, 得到详细的水平应变值:

$$\epsilon_{h0} = \frac{\sum_{i=1}^n E_i t_i (\alpha_i - \alpha_0) \Delta T}{E_0 t_0} \quad (7)$$

$$\epsilon_{hi} = \frac{\sum_{j=1}^n E_j t_j (\alpha_j - \alpha_i) \Delta T}{E_0 t_0} + (\alpha_0 - \alpha_i) \Delta T \quad (8)$$

1.2 弯曲应变部分

多层膜系统呈现出相对一致的水平应变。如果基片热应力和膜层热应力之间存在一定差异, 会出现一定的弯曲变化。利用典型的桥梁弯曲理论, 选取中性层作为参考面, 中性轴作为参考轴。设中性轴距基片下表面的距离为 Δ , 参考面弯曲后的曲率半径为 R , 图2为薄膜弯曲情况, 则弯曲应变 ϵ_b 可以表示为

$$\epsilon_b = \frac{(y - \Delta + R)d\theta - R d\theta}{R\theta} = \frac{y - \Delta}{R} \quad (9)$$

由式(9)可以看出, 对于某一特定的多层膜系统, 具有固定的参考面弯曲半径, 随着距离中性参考面距离的增大, 应变逐渐增大。对于纯弯曲部分如图1(d)所示, 中性参考面以上各层将出现拉伸应力, 中性层以下各层出现压缩应力, 中性参考面上的应力为0。对于整个多层膜系统, 整个系统的弯曲力矩为

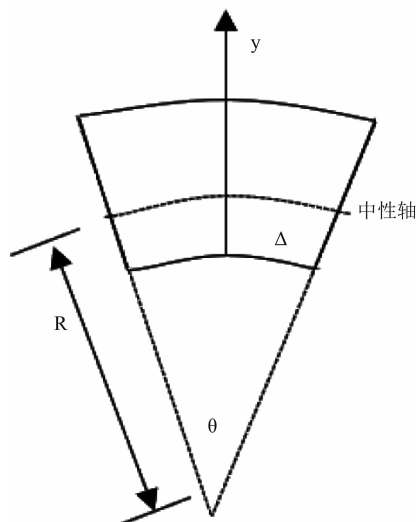


图2 薄膜弯曲应变示意图

零, 由此得到:

$$\sum_{i=0}^n \int_{h_i}^{h_{i+1}} E_i \frac{y - \Delta}{R} dy = 0 \quad (10)$$

$$\int_{h_i}^{h_{i+1}} E_i (\epsilon_{hi} + \epsilon_b) y dy = 0 \quad (11)$$

联立式(2)、式(6)和式(9), 合并解式(10)和式(11), 根据实际意义, 将结果小于 10^{-3} 量级的多项化简, 得到应变中性轴位置 Δ 和弯曲曲率 $1/R$ 为

$$\Delta = \frac{t_0}{2} + \frac{\sum_{i=1}^n E_i t_i (2h_{i+1} + t_i)}{E_0 t_0} \quad (12)$$

$$\frac{1}{R} = \frac{\sum_{i=1}^n 6E_i t_i (\alpha_i - \alpha_0) \Delta T}{E_0 t_0^2} \quad (13)$$

进一步得到基片和光学薄层第 i 层的弯曲应变情况为

$$\epsilon_{b0} = 2(3y - t_0) \frac{\sum_{i=1}^n E_i t_i (\alpha_i - \alpha_0) \Delta T}{E_0 t_0^2} \quad (14)$$

$$\epsilon_{bi} = \frac{3 \sum_{i=1}^n E_i t_i (\alpha_0 - \alpha_i) \Delta T}{E_0 t_0} \quad (15)$$

1.3 总应力分布情况

根据式(7)、式(8)、式(12)和式(13), 得到分别在基片和膜层中的应力为

$$\sigma_0 = E_0 \left[\frac{\sum_{i=1}^n E_i t_i (\alpha_i - \alpha_0) \Delta T}{E_0 t_0} \right]$$

$$+ \frac{\sum_{i=1}^n 6E_i t_i (\alpha_i - \alpha_0) \Delta T}{E_0 t_0^2} \left(y - \frac{t_0}{2} - \frac{\sum_{i=1}^n E_i t_i (2h_{i+1} + t_i)}{E_0 t_0} \right) \quad (16)$$

$$\sigma_i = E_i \left[\frac{\sum_{j=1}^n E_j t_j (\alpha_j - \alpha_i) \Delta T}{E_0 t_0} + (\alpha_0 - \alpha_i) \Delta T + \frac{\sum_{i=1}^n 6E_i t_i (\alpha_i - \alpha_0) \Delta T}{E_0 t_0^2} \left(y - \frac{t_0}{2} - \frac{\sum_{i=1}^n E_i t_i (2h_{i+1} + t_i)}{E_0 t_0} \right) \right] \quad (17)$$

在实际应用中, 光学薄膜的基底厚度多为膜层厚度的 10^3 的倍数关系。为使计算结果更具意义, 利用式(8)、式(9)、式(15)和式(16)将计算薄膜热应力的近似解的解析式化简为

$$\sigma_0 = \frac{6y - 2t_0}{t_0^2} \sum_{i=1}^n E_i t_i (\alpha_i - \alpha_0) \Delta T \quad (0 \leq y \leq t_0) \quad (18)$$

$$\sigma_i = -E_i (\alpha_i - \alpha_0) \Delta T \quad (1 \leq i \leq n) \quad (19)$$

通常情况下, 膜层厚度远小于基片厚度。如果膜层厚度不到膜层厚度的 0.5%, 可以认为上述近似求解足以满足需要。如果认为近似解不够精确, 可以用式(16)和式(17)进行精确计算。

近似解析式(19)表明, 当膜层厚度远小于基片厚度时, 某一层膜的热应力大小主要取决于该膜层和基片的热膨胀系数差异情况, 其他膜层的贡献可以忽略。当式(19)的值为 0, 解得应力为 0 的中性参考面位于基片中距离下表面三分之一的位置。该结果与 P. H. Townsend^[9] 和 C. H. Hsueh^[10] 等人给出的近似解吻合。相比于以前的研究, 文中采用不同方法分别求解水平应变分量和弯曲应变分量, 使得多层薄膜的热应力分布表达得更详细。

2 红外窄带滤光片的热应力分析

通过比较可见光波段的光学薄膜, 热应力在红外光学薄膜中的影响更明显。红外窄带滤光片往往在 100 K 以下的低温环境中使用, 形变会影响其光谱等光学特性^[11], 故研究红外超窄带滤光片的热应力分布具有实际意义。实际应用中, 有一种长波红外窄带通滤光片^[12], 其中心波长为 14.95 μm , 通带带宽为 0.065 μm , 通带的膜系结构为 Ge | LHLHLH2LHLHLH2L | Air, 高折射率膜层采用 PbTe 材料, 低折射率膜层采用 ZnSe 材料。表 1 列举了光学薄膜所用材料的物性参数。

表 1 ZnSe/PbTe 光学薄膜的材料参数^[13-15]

材料	弹性模量 GPa	线性热膨胀系数 $10^{-6}/\text{K}$
Ge	77.2	5.5
ZnSe	76.4	7.0
PbTe	40.0	20.4

将该红外窄带滤光片的材料参数代入式(13), 得到温度改变时其弯曲情况。如图 3 所示, 曲率与温度变化 ΔT 成正比, 与基片厚度 t_0^2 成反比, 单个膜层厚度对曲率的影响较小。图 3 表明滤光片在温度变化时的弯曲曲率随基片厚度的增加而减小。当基底厚度值达到 0.4 mm 时, 曲率呈现一定的稳定状态, 这说明基片较厚时, 多层薄膜较难发生形变。

该滤光片的应力分布如图 4、图 5 所示, 其基片厚度为 1 mm, 温度变化为 200 $^{\circ}\text{C}$ 。图 4 为水平应变、弯曲应变和总应变的情况。基片的水平应变为负值, 弯曲应变则从基片下表面开始呈线性增长, 基片下部的应变为正, 呈现为张应力; 基片上部的应变为负, 呈现为压应力; 中间有一中性面, 此面上的应力为 0。图 5 为滤光片膜层间热应力的近似值与精确值的分布。由于膜层的热膨胀系数大于基片的热膨胀系数, 温度降低时窄带滤光片中的膜层呈现张应力, PbTe 和 ZnSe 膜层中热应力的值约为 60.5 Mpa 和 13.3 MPa。由于

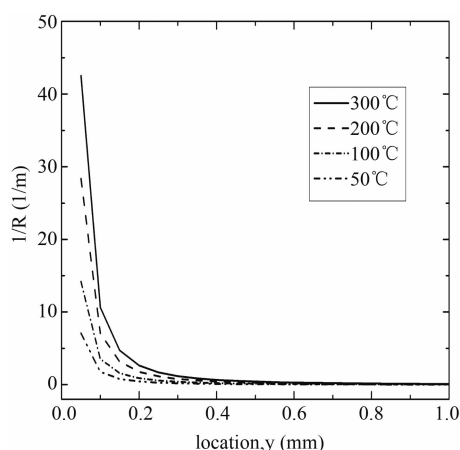


图 3 曲率和基底厚度 t_0 、温度变化 ΔT 的关系

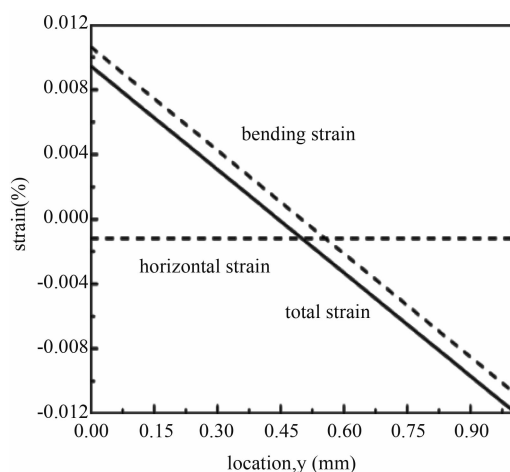


图 4 水平应变、弯曲应变和总应变示意图

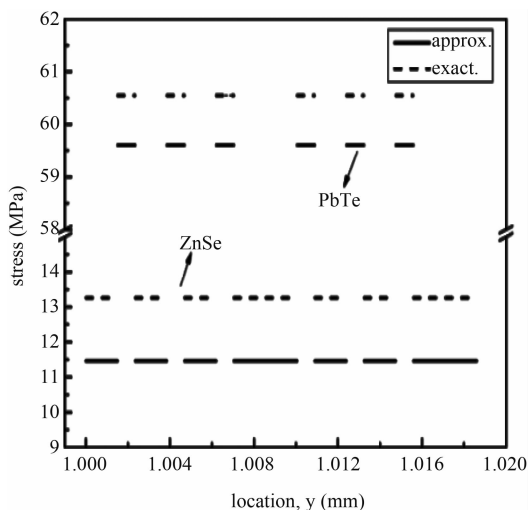


图 5 薄膜精确值和近似值的示意图

ZnSe 和 PbTe 膜层中热应力的近似解与精确解的差距较小，故当基底厚度远大于薄膜厚度

时，用式(18)和式(19)可以更加高效地得出薄膜中热应力的分布情况。计算结果显示，PbTe 膜层中的热应力较大，如果能用线性热膨胀系数较小的光学薄膜材料代替，则这一窄带滤光片的可靠性会更好。

3 结论

由于红外光学薄膜的膜层相对疏松，且通常在低温下使用，热应力对光学薄膜元件的可靠性和稳定性的影响很明显。基于传统桥梁弯曲应力模型，借助力平衡和力矩平衡的基本条件，推导了光学多层膜中热应力精确解和近似解的计算公式。当薄膜厚度远小于基片厚度时，近似解的计算结果能够满足膜层中热应力分析的需要，且计算更快速高效。但由于目前实验测量多层薄膜中某一膜层的热应力大小较困难，该结果还需进一步的实验验证。基片材料和膜层材料的热膨胀系数的差异对于多层膜系统中的热应力起主要作用，某一膜层中的热应力主要因为该膜层与基片之间存在热失配，其他膜层对其热应力值的贡献较小。

结合长波红外 $14.95 \mu\text{m}$ 光谱通道窄带滤光片的实际情况，分析了该多层光学膜中的热应力分布情况。对于由热应力产生的弯曲应变，当基片厚度大于 0.4 mm 时，弯曲形变可以忽略。降温时，膜层中存在张应力，其中 PbTe 膜层中的热应力较大。故制备滤光片时，选择热膨胀系数与基片较接近的薄膜材料有利于控制光学薄膜元件中热应力的影响。

参考文献

- [1] Olsen G H, Ettenberg M. Calculated Stresses in Multilayered Heteroepitaxial Structures[J]. *Journal of Applied Physics*, 1977, **48**(6): 2543-2547.
- [2] Hsueh C H, Evans A G. Residual Stress in Metal/Ceramic Bonded Strips [J]. *Journal of the American Ceramic Society*, 1985, **68**(5):241-248.

(下转第 48 页)