

文章编号 1004-924X(2007)10-1520-07

离子束加工光学镜面的材料去除特性

焦长君, 李圣怡, 王登峰, 解旭辉, 周 林

(国防科技大学 机电工程与自动化学院, 湖南 长沙 410073)

摘要:分析了离子束加工光学镜面的材料去除效率、加工损伤厚度以及表面热效应等材料去除评价指标。基于 Sigmund 溅射理论,分析了此三个评价指标与离子入射角度和离子能量等加工参数的关系,建立了相关模型。以石英玻璃为例,利用 TRIM 软件仿真离子溅射过程,分析理论模型各参数,具体研究了三个评价指标与离子能量和入射角度的关系。结果表明:材料去除效率随离子能量的增大而缓慢增大,随入射角度增大而显著增大,60°时的去除效率约为 0°时的 4.5 倍;加工损伤厚度随离子能量增大而近似呈线性增大,随入射角度增大而减小;热效应随离子能量近似呈线性增大,而随入射角度增大而减小。因此,离子束加工工艺过程中,应尽量增大离子束入射倾角来同时提高这三方面的指标。

关键词:光学镜面;离子溅射;去除效率;加工损伤;热效应

中图分类号:TQ171.68 文献标识码:A

Material removal property in ion figuring process for optical components

JIAO Chang-jun, LI Sheng-yi, WANG Deng-feng, XIE Xu-hui, ZHOU Lin

(School of Mechanic Engineering and Automation, National University of Defense Technology, Changsha 410073, China)

Abstract: The material removal property with three important performance factors, the material removal efficiency, depth of the sub-surface damage and thermal effect, in the ion figuring process was analyzed. Based on the Sigmund sputtering theory, the relation models of these three factors with respect to ion energy and incident angle were established. The sputtering process of SiO₂ bombarded by Ar⁺ was simulated with the software TRIM, and the parameters of the above theory models were synthesized with the simulated data. Then the relationships among the three factors and the two process parameters were researched by the theory models. The models and simulation results indicate that the removal efficiency increases slowly with the ion energy and fast with the incident angle in some range, the removal efficiency at 60° is about 4.5 times as high as that at 0°; the depth of sub-surface damage increases with the ion energy linearly but decreases with the incident angle; the thermal effect increases with the ion energy linearly approximately but reduces with the incident angle. Therefore, in order to improve the three performance factors at the same time, a larger incident angle should be the best choice.

Key words: optical component; ion sputtering; removal efficiency; sub-surface damage; thermal effect

收稿日期:2007-03-28;修订日期:2007-07-03.

基金项目:国家自然科学基金资助项目(No. 50375155)

1 引 言

现代光学系统要求镜面的面形精度达到 $\lambda/20 \sim \lambda/40$ ^[1],并要求镜面没有亚表面损伤。现有的接触式加工方法如小磨头加工法、磁流变加工法^[2-3]等很难达到这一要求。

离子束加工方法利用离子溅射效应对材料进行去除。高能离子入射到工件表面,与工件表层原子碰撞并进行能量和动量转移,若被碰撞的工件材料原子获得足够的能量摆脱晶格的约束,形成初始运动原子,就会与入射离子一起运动,再与工件材料的其余原子继续发生碰撞。在这一系列的碰撞过程中,处于工件表层的原子若获得足够的指向工件外部的动量,即可摆脱工件材料的束缚,形成材料去除,这一效应为离子溅射效应。光学镜面离子束加工利用束流密度呈单峰类高斯分布的离子束,根据离子溅射效应形成呈类高斯分布的去除函数,再基于 CCOS 成型原理对工件进行面形修除^[5]。

光学镜面离子束加工方法具有原子尺度的材料去除能力,非接触方式消除工具磨损和边缘效应等问题,离子束的稳定性使得离子束修形过程具有相当高的确定性,加工收敛率可达到 10,远高于通常方法所能达到的 1.1~1.3^[4]。离子束加工逐步受到国内外光学镜面研究机构的重视^[5-7],已应用于大型光学镜面和下一代光刻系统光刻物镜的加工。在国家相关重点研究基金的支持下,国防科技大学在国内率先进行相关的研究^[8],目前实验样机已经构建^[9]完毕并成功完成了小口径镜面的加工实验。

材料去除效率、加工损伤和热效应是光学镜面离子束加工中的三个重要指标,与离子能量和入射角度等工艺参数密切相关。本文基于 Sigmund 溅射理论,建立它们之间的关系模型,再结合 TRIM 软件的仿真数据具体分析,给出工艺参数的优化选取方向,指导离子束加工工艺参数选择。

2 理论分析

离子束加工材料去除是由大量的入射离子与工件材料原子相互碰撞产生的,是一大量事件

并发的过程。用材料溅射产额来描述材料的去除效率,材料溅射产额定义为单个人射离子溅射出的工件材料原子数的统计平均值^[10]。

$$Y = \frac{n_o}{n_i}, \quad (1)$$

式中: n_o —被溅射出的工件原子数, n_i —入射离子数。

入射离子轰击工件,与工件材料原子碰撞并继而发生动量和能量的转移,这必然会对工件的表层造成一定的损伤,形成亚表面损伤层。这里定义入射离子在工件中能量散射的厚度为加工引入的亚表面损伤层厚度。

2.1 材料去除效率

Sigmund 假设入射离子与靶原子之间的碰撞为一线性级联过程,利用 Boltzmann 迁移方程研究了离子溅射过程^[11]。Sigmund 理论的一个重要结论认为入射离子在工件中的能量散射呈现高斯分布。如图 1 所示,在 B 点处入射的离子,通

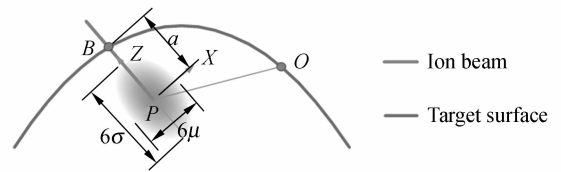


图 1 入射离子能量散射示意图

Fig. 1 Schematic illustration of energy distribution of an incident ion

过与工件原子碰撞而产生能量散射,能量散射中心 P 距表面为 a ,沿着离子入射方向的能量散射宽度为 σ ,垂直于入射方向的能量散射宽度为 μ 。在 P 点处建立如图所示的能量散射中心坐标系 P-XYZ,则在此坐标系中入射离子散射的能量分布满足^[12-13]:

$$E = \frac{\epsilon}{(2\pi)^{3/2} \sigma \mu^2} \exp\left(-\frac{Z^2}{2\sigma^2} - \frac{X^2 + Y^2}{2\mu^2}\right). \quad (2)$$

工件 O 点处的材料法向去除速率与离子束在此点沉积的能量成正比。由离子溅射引起的 O 点处的材料法向去除速率为^[12-13]:

$$v_o = p \int_R \Phi E dq, \quad (3)$$

式中: R —工件表面上入射离子面区域, dq —工件表面面积微元, Φ —离子通量局部修正量, p —与表面绑定能和散射截面相关的常数。

如图 2 所示,用束流密度为 J 的均匀离子束

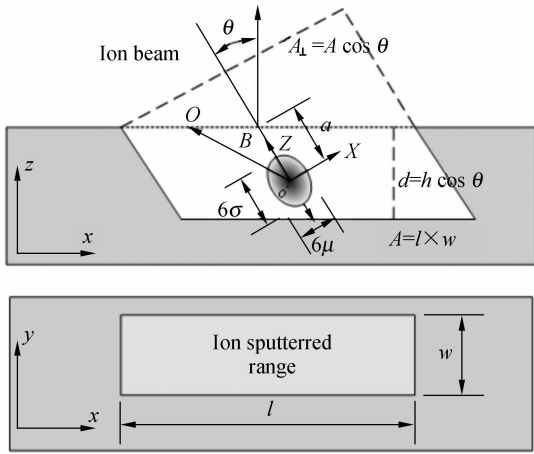


图 2 溅射产额理论计算示意图

Fig. 2 Schematic illustration of theoretical sputtering yield

倾斜 θ 角入射轰击原子密度为 N 的平面工件。根据式(3), 轰击区域任意点 O 的材料法向去除速率 v 为:

$$v = \frac{\epsilon \rho J \cos \theta}{(2\pi)^{3/2} \sigma \mu^2} \int_R \exp\left(-\frac{(a-x\sin\theta)^2}{2\sigma^2} - \frac{(x\cos\theta)^2 + y^2}{2\mu^2}\right) dx dy = \frac{p\epsilon J a_\sigma a_\mu \cos \theta}{a \sqrt{2\pi} \sqrt{f}} \exp\left(-\frac{a_\sigma^2 a_\mu^2 \cos^2 \theta}{2f}\right), \quad (4)$$

式中:

$$f = a_\sigma^2 \sin^2 \theta + a_\mu^2 \cos^2 \theta$$

$$a_\sigma = a/\sigma \quad a_\mu = a/\mu. \quad (5)$$

经过时间 t , 被溅射出的工件材料原子数为:

$$n_o = vtlwN. \quad (6)$$

在同一时间间隔内入射的离子数为:

$$n_i = JtA_\perp = Jtlw \cos \theta. \quad (7)$$

根据定义式(1), 离子溅射产额 $Y(\theta)$ 为:

$$Y(\theta) = \frac{n_o}{n_i} = \frac{vtlwN}{Jtlw \cos \theta} = \frac{vN}{J \cos \theta} = \frac{N p \epsilon a_\sigma a_\mu}{a \sqrt{2\pi} \sqrt{f}} \exp\left(-\frac{a_\sigma^2 a_\mu^2 \cos^2 \theta}{2f}\right). \quad (8)$$

式(8)所表达的 $Y(\theta) > 0$ 且 $\partial Y(\theta) / \partial \theta > 0$, 说明基于 Sigmund 理论推导出的离子溅射产额随入射倾斜角的增大而增大。但当离子入射角接近于 90° 时, 由于离子的反弹等效效应, 其离子溅射产额应接近于零, 故需对式(6)做大角度修正。

Sigmund 理论对于小角度入射情形比较准确, 修正因子的值接近于 1; 当入射角比较大时,

特别在接近于 90° 时, 修正因子的值应该迅速趋近于零。在理论式(8)中引入随入射角变化呈指数衰减的 Yamamura^[14-15] 修正因子为:

$$g(\theta) = \exp[-b(\cos^{-1}\theta - 1)], \quad (9)$$

则修正后的溅射产额公式:

$$Y(\epsilon, \theta) = \frac{N p \epsilon a_\sigma a_\mu g(\theta)}{a \sqrt{2\pi} \sqrt{f}} \exp\left(-\frac{a_\sigma^2 a_\mu^2 \cos^2 \theta}{2f}\right). \quad (10)$$

令式(10)中 $\theta = 0$, 得到垂直入射时溅射产额与入射离子能量的关系:

$$Y(\epsilon, 0) = \frac{N p \epsilon a_\sigma}{a \sqrt{2\pi}} \exp\left(-\frac{a_\sigma^2}{2}\right). \quad (11)$$

2.2 离子束加工损伤

离子束加工材料去除是离子间碰撞的结果。通过离子间相互碰撞转移能量和动量, 入射离子的能量消耗在表层原子中和被溅射出的原子中。根据 Sigmund 和 LSS 射程理论, 入射离子的能量平均散射深度与入射离子在靶材中的侵入深度相当, 为^[11]:

$$a(\epsilon) = \frac{1-m}{2m} \gamma^{m-1} \frac{\epsilon^2 m}{N C_m}, \quad (12)$$

式中: m —与入射离子能量相关的常数, N —靶材的原子密度, C_m —与原子之间相互作用势相关的常数, γ —与入射离子、工件原子质量相关的常量。

离子束加工利用的是溅射效应, 在材料去除过程中, 入射离子的能量转移给工件原子, 工件原子将这些能量消耗在克服晶格能和表面绑定能等束缚上, 或者以声子的方式消耗掉自身的能量^[16]。在碰撞过程中, 会造成晶格错位、空穴等缺陷。如此的能量消耗方式和晶格异态造成了工件亚表面损伤。依据 Sigmund 理论, 定义损伤深度为入射离子在工件中能量散布的厚度。如图 3 所示, 损伤深度为其能量散布在椭圆边界与工件表面的距离, 据此可以求解出损伤深度与入射角度的关系为:

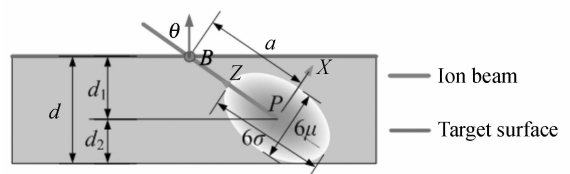


图 3 离子束加工损伤层厚度求解示意图

Fig. 3 Schematic illustration of damaged depth in ion figuring process

$$d = d_1 + d_2 = a \left(\cos \theta + \frac{3\sqrt{f}}{a_\sigma a_\mu} \right), \quad (13)$$

其中, $d_1 = a \cos \theta$ 为能量散射深度在工件方向上的投影—投影射程。式(13)所描述的损伤深度与离子能量的关系通过 a 、 a_σ 和 a_μ 与能量的关系隐性反映出来。

3 TRIM 仿真结果与分析

以 Ar^+ 轰击石英玻璃(SiO_2)为分析对象,以基于 Monte-Carlo 方法和两体碰撞假设的离子溅射仿真软件 TRIM^[17]为仿真工具,根据 TRIM 软件能够给出的直接结果—溅射产额、能量散射投影射程 d_1 和工件被溅射原子的能量进一步分析离子束加工过程中的材料去除率、损伤层厚度和热效应与入射离子能量、入射角度的关系。

本文在以下讨论的过程中忽略择优溅射效应^[19],认为 SiO_2 为一整体。并根据相关参考文献^[19]设仿真参数为:

表 1 TRIM 软件仿真参数设置表

Tab. 1 Simulation parameters for TRIM

原子密度 $N/(\text{g} \cdot \text{cm}^{-3})$	2.32
绑定能 E_B/eV	2.0
移位能 E_D/eV	0
表面绑定能 E_{SBE}/eV	4.7

3.1 材料去除效率分析

以式(10)为模型,对仿真结果进行辨识分析,拟合分析结果如图 4 所示。

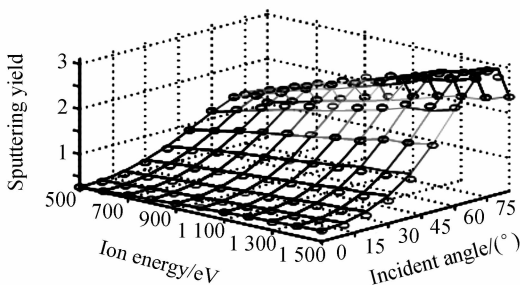


图 4 溅射产额与角度、能量的关系

Fig. 4 Relation among sputtering yield, ion energy and incident angle

图 4 表明,在所研究的区域内,离子加工去

除效率随离子能量的增大而缓慢增大;随入射角度变化的趋势比较明显,约在 $60 \sim 80^\circ$ 达到最大值,之后迅速减小,直至降为 0。

在用式(10)对加工去除效率进行拟合分析的同时,得到了离子溅射能量散布参数 a_σ 、 a_μ 和衰减因子 b 的相对变化率与能量的关系,如图 5 所示。

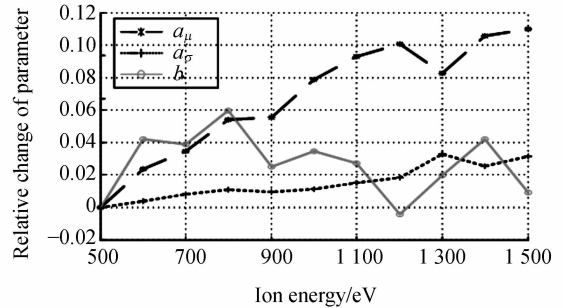


图 5 能量分布参数相对变化值与离子能量的关系
Fig. 5 Relation between the relative changes of ion distribution parameters and the ion energy

如图 5,在所研究的能量范围内, a_σ 几乎与入射离子的能量无关,而 a_μ 则随着能量的增大而增大。这表明,随着入射离子能量的增大,其能量散射区域变得越来越扁长,更多的能量散布于离子入射方向,而垂直于入射方向的能量散布宽度越来越窄。从而随着离子能量的增大,溅射产额的增大辐值将会越来越小。

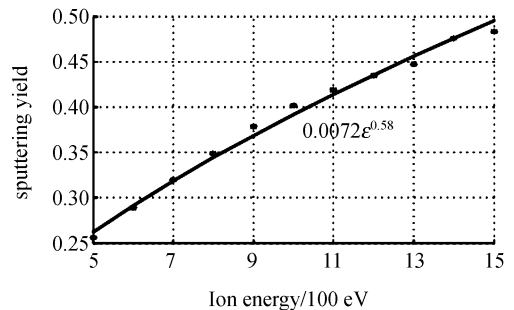


图 6 垂直入射溅射产额与能量的关系

Fig. 6 Relation between the sputtering yield at normal incident and the ion energy

如图 6 所示,优化拟合表明垂直入射时去除效率与能量近似呈平方根关系,离子束加工材料去除效率随着入射离子能量的增大而缓慢增大。500 eV 时去除效率为 0.26, 1 000 eV 时为 0.4, 1 500 eV 时为 0.48。

如图 4 所示,500 eV 的入射离子,角度 $<40^\circ$ 时去除效率随角度缓慢增大,当角度在 $40\sim 70^\circ$ 时,随角度迅速增大。 0° 时去除效率为 0.26, 60° 时增大到 1.16,约为 0° 时的 4.5 倍。

这一对比分析表明,离子束加工倾向于用大倾斜角进行加工,以大幅提高加工效率。

3.2 离子束加工损伤分析

图 7 为投影深度 TRIM 仿真结果,显然投影深度随离子能量的增大而增大,随入射角度的增大而减小。

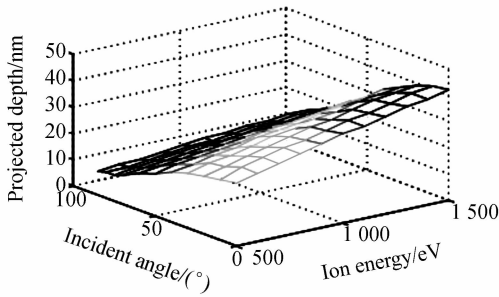


图 7 离子入射投影深度与能量、入射角的关系
Fig. 7 Relation among the ion projected depth, ion energy and incident angle

根据图 3 的关系,将投影深度转化成能量散射平均深度 a ,图 8 给出其与能量和入射角度的关系曲线。

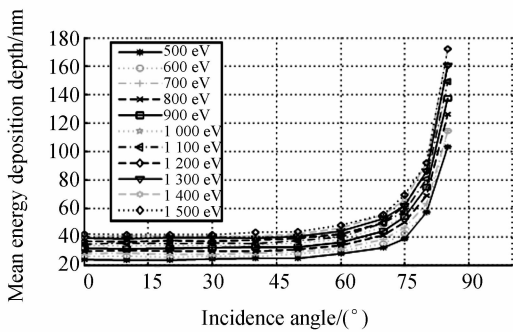


图 8 能量散射平均深度与能量和入射角的关系
Fig. 8 Relation between the mean energy deposition depth and the incident angle

理论表明能量平均深度 a 不随入射角度变化,但图 8 却显示在入射角 $<60^\circ$ 时,平均散射深度几乎保持不变,而在 60° 以上则逐步增大。增大的原因可能是当入射角较大时,由于能量散射椭圆被工件表面截断,致使 TRIM 软件统计计算

的垂直深度偏大,再通过 $\cos^{-1}\theta$ 放大,使得计算结果在大角度时出现较大的偏差。

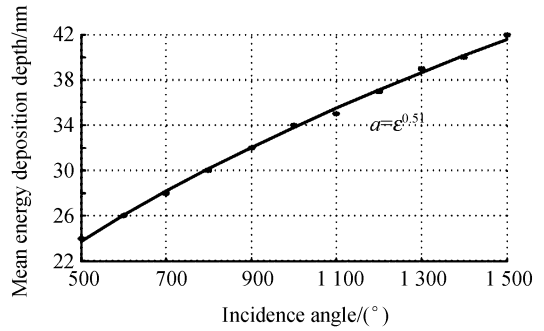


图 9 垂直入射时能量散射平均深度与能量的关系
Fig. 9 Relation between the mean energy deposition depth at normal incident and the ion energy

图 9 给出垂直入射时能量平均散射深度 a 与能量的关系,垂直入射能量散射深度与能量大约呈平方根关系。

同时,根据式(12)可以求解出能量因子 $m \approx 0.255$,将 m 代入式(11),考虑到 a_s 几乎不随能量变化的结论,可以求解出垂直入射时溅射产额与能量的平方根成比例,与图 6 的优化拟合结果基本吻合。

根据式(13)求解出离子束加工时损伤层厚度与能量和入射角度的关系,其图形表达如图 10 所示。

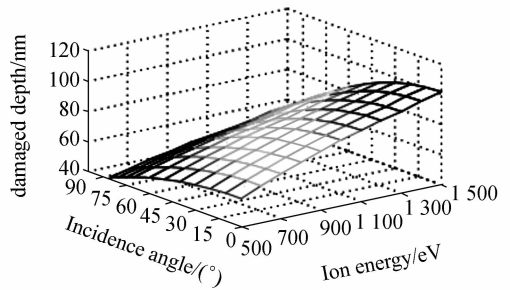


图 10 损伤层厚度与能量和入射角的关系
Fig. 10 Relation among the depth of damaged surface, ion energy and incident angle

图 10 表明,损伤层厚度随着入射离子的能量增大而增大,随着入射角增大而减小。500 eV 垂直轰击下的工件表面损伤层厚度为 60 nm, 60° 时为 51.2 nm。

图 11 所示的垂直入射时的损伤厚度与能量的增大近似成平方根关系,损伤厚度随入射离子能量缓慢增长。500 eV 时的损伤厚度为 60 nm,

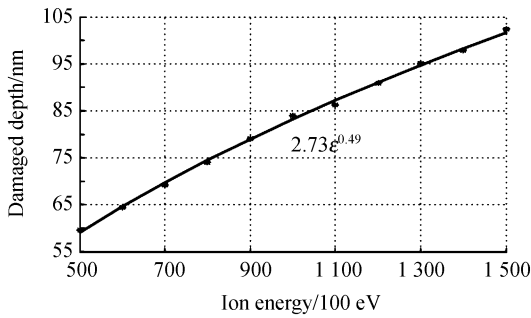


图 11 垂直入射损伤层厚度与能量的关系

Fig. 11 Relation between the depth of damaged surface at normal incident and the ion energy

1 000 eV 时为 84 nm, 1 500 eV 时为 102 nm。

对比分析表明,离子束加工通过增大入射角可以减小损伤层厚度,而提高离子能量虽然会提高材料去除效率,但也同时增大损伤层厚度。

3.3 离子束加工热效应

离子束加工中高能离子入射工件表面,通过碰撞与工件原子发生能量转移。入射离子的大部分能量都沉积在工件内部,最终通过空穴、致密等缺陷和原子振动等形式消耗掉。部分能量通过被溅射的靶材原子带出工件。忽略辐射和二次电子发射等效应,消耗在工件内部的能量最后都转变成热量。

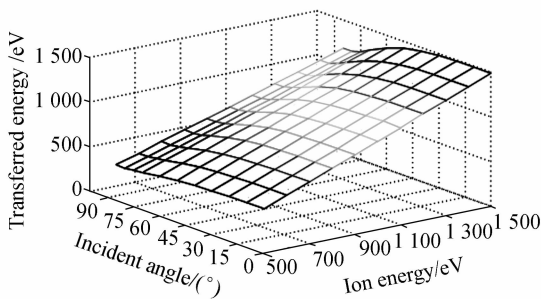


图 12 单个入射离子转移给工件的能量与入射离子能量以及入射角之间的关系

Fig. 12 Relation among the transferred energy of one incident ion to the workpiece, ion energy and incident angle

图 12 给出单个入射离子转移给工件的能量与入射离子能量以及入射角之间的关系的 TRIM 仿真结果。应当指出,图 12 的仿真结果对大角度的情形应该偏大。大角度入射时存在离子反弹效应,反弹的离子对工件的热效应影响很小。

图 12 表明,单个离子引入的能量随入射离子的能量增大而增大,随入射角的增大而减小。增大入射角有利于缓解离子束加工的工件发热效应。

同时注意到,随着入射角度的增大,束流密度以 $\cos \theta$ 的形式减小。这就意味着工件接受的热流密度也会以 $\cos \theta$ 的形式减小。

考虑以上两因素,能量为 500 eV、束流密度为 J 的离子束,垂直入射工件,对工件产生的热流密度为 $495J$ eV;以 60° 入射工件时,热流密度为 $225J$ eV。能量为 1 500 eV、束流密度为 J 的离子束,垂直入射工件,对工件产生的热流密度为 $1 485J$ eV,为 500 eV、 60° 入射时的 6.6 倍。

以上对比分析表明,离子束加工通过增大入射角可以减小热效应,而提高离子能量则会近似线性地增大热效应。

4 结 论

基于 Sigmund 溅射理论,建立了离子束加工材料去除效率、损伤厚度和热效应与入射离子能量和入射角之间的关系,并利用离子效应研究了通用软件 TRIM 仿真的数据求解相关参数,分析结果表明:

(1) 离子加工效率约与入射离子能量的平方根成正比关系,随能量增大而缓慢增大;离子加工效率随入射角先缓慢增大,尔后迅速增大,约在 $70\sim 80^\circ$ 达到最大值,约为 0° 的 4.5 倍,之后再随角度急速减小,直至降低为零。

(2) 垂直入射状态下的离子加工损伤层厚度约与入射离子能量的平方根成正比关系,随能量增大而缓慢增大;离子加工损伤层厚度随入射角度增大而减小。

(3) 离子束加工单个入射离子转递给工件的能量在垂直入射时几乎等于入射离子的能量;在同一能量状态下,随入射倾角的增大而减小。增大入射倾角,可以减小对工件的热流量面密度,并以 $\cos \theta$ 的形式降低工件表面热梯度。

增大离子入射倾角,可以同时提高材料去除效率,抑制表面损伤层的厚度,降低表面热效应,故而在条件允许的情况下应优先考虑用大倾斜角度进行加工。

参考文献:

- [1] RENÉ K. *Novel Interferometer to Measure the Figure of Strongly Aspherical Mirrors* [D]. University of Delft 2001.
- [2] 牛海燕, 张学军. $\Phi 124$ 口径碳化硅质非球面镜面数控研抛技术研究[J]. 光学 精密工程, 2006, 14(4): 539-544.
NIU H Y, ZHANG X J. Research on computer controlled polishing technology of $\Phi 124$ mm aspheric reaction-burned silicon carbide mirror [J]. *Opt. Precision Eng.*, 2006, 14(4): 539-544. (in Chinese)
- [3] 张峰, 张斌智. 磁流变辅助抛光工件表面粗糙度研究[J]. 光学 精密工程, 2005, 13(1): 34-39.
ZHANG F, ZHANG B ZH. Surface roughness of optical elements fabricated by magnetic fluid-assisted polishing [J]. *Opt. Precision Eng.*, 2005, 13(1): 34-39. (in Chinese)
- [4] LYNN N A, ROBERT E K. An ion figuring system for large optic fabrication [J]. *SPIE*, 1989, 1168: 33-50.
- [5] LYNN N A, HENRY W R. Demonstration of an ion figuring process [J]. *SPIE*, 1990, 1333: 22-33.
- [6] FLAMM D, SCHINDLER A, BERGER M. Ion beam milling of optically polished CaF_2 surfaces [J]. *SPIE*, 2003, 5180: 81-88.
- [7] PRASHANT M S, MICHAEL R F, GUIDO S S, *et al.*. Ion-beam machining of millimeter scale optics [J]. *Applied Optics*, 2000, 39(4): 599-611.
- [8] 周林, 戴一帆, 解旭辉, 等. 光学镜面离子束加工的可达性[J]. 光学 精密工程, 2007, 15(2): 160-166.
ZHOU L, DAI Y F, XIE X H, *et al.*. Machining reachability in ion beam figuring [J]. *Opt. Precision Eng.*, 2007, 15(2): 160-166. (in Chinese)
- [9] JIAO CH J, XIE X H, LI SH Y, *et al.*. Design of ion beam figuring machine for optics mirrors [C]. *Asia Pacific Precision Engineer for Optics Manufacture 2007, Hongkong, 2007.*
- [10] BEHRISCH R. *Sputtering by Particle Bombardment I: Physical Sputtering of Single-Element Solids* [M]. New York: Springer-Verlag, 1981.
- [11] SIGMUND P. Theory of sputtering. i. sputtering yield of amorphous and polycrystalline targets [J]. *Physical Review*, 1969, 184(2): 383-416.
- [12] MAXIM A M, RODOLFO C, ALBERT L B. Morphology of ion-sputtered surfaces [J]. *Nuclear Instruments and Method in Physics Research B*, 2002, 197: 185-227.
- [13] BRADLEY R M, HARPER J M E. Theory of ripple topography induced by ion bombardment [J]. *J. Vac. Sci. Technol. A*, 1988, 6(4): 2390-2395.
- [14] GIOVANNI F. Ejection process in collisional sputtering [J]. *Phys. Rev. B*, 1986, 33: 5054-5056.
- [15] MICHAEL J V, XIE J S, RAJA N. Depth control of focused ion-beam milling from a numerical model of the sputter process [J]. *Vac. Sci. Technol. B*, 1999, 17: 3085-3090.
- [16] IAIN D B. *A Review of Spacecraft Material Sputtering* [C]. AIAA 37th Joint Propulsion Conference, Salt Lake City, 2001.
- [17] ZIEGLER J F, BIRSACK J P. *The Stopping and Ranges of Ions in Matter* [M]. New York: Pergamon Press, 1985.
- [18] TORSTEN M. *Ion Beam Synthesis of Ge Nanowires* [D]. Dresden University, 2000.

作者简介: 焦长君(1979—), 男, 国防科技大学博士研究生, 主要研究方向为精密工程。E-mail: kdj@vip.sina.com
李圣怡(1946—), 男, 国防科技大学机电工程与自动化学院教授, 博士生导师, 主要研究方向为精密工程与微机电系统、机电系统测控理论与技术。E-mail: syli@nudt.edu.cn