

文章编号 1004-924X(2004)03-0340-06

材质气孔率和气孔大小与表面粗糙度的数学模拟与特征

张长瑞,刘荣军,刘晓阳,周新贵,曹英斌

(国防科技大学 航天与材料工程学院 国防科技重点实验室,湖南 长沙 410073)

摘要:为提高光学系统的成像质量,研究了光学系统中镜片表面粗糙度与镜片材质中的颗粒大小、缺陷、气孔率、气孔大小的关系。通过几何方法,建立了气孔率与气孔大小和数量的关系模型,分别给出了单位体积和单位面积中气孔率与气孔大小和数量的关系表达式。最后用数学方法建立了材质中气孔率、气孔大小与表面粗糙度的定量模型,给出了表面粗糙度与材质气孔率和气孔大小的关系表达式,表明表面粗糙度近似与材质中的气孔率成正比,与气孔大小成正比。

关键词:光学材料;气孔率;气孔大小;粗糙度;模拟

中图分类号:TQ171.734 文献标识码:A

Numerical simulation and characterization of materials' porosity, pore size, and surface roughness

ZHANG Chang-ru, LIU Rong-jun, LIU Xiao-yang, ZHOU Xin-gui, CAO Ying-bin

(Key Laboratory of National Defense Technology,
College of Aerospace & Materials Engineering,

National University of Defense Technology, Changsha 410073, China)

Abstract: The surface roughness of mirrors determine the quality of imaging in an optical system, and it depends on the optical processes and the characteristics of material itself, for example, the grain size, flaws, porosity and pore size of materials have great effect on the surface roughness. Therefore, a model was built by geometry method for the relationship between porosity and pore size d , the function relationships among number of pores N_V or N_S are described. Another model used to simulate the effect of porosity and pore size on surface roughness R_A was constructed by mathematical method. The dependence of R_A on and d is given.

Key words: optical material; porosity; pore size; surface roughness; numerical simulation

1 引言

在光学系统中,镜片的表面粗糙度对光学系统的成像质量有着决定性的影响^[1-2]。未来空间

光学系统要求能在红外、可见光、紫外、X射线甚至 γ -射线整个波段范围内工作^[3-4],随着波长的缩短,对镜面的表面粗糙度要求越来越高。如在

可见光范围工作的卫星反射镜,其表面粗糙度要求 $RMS < 10 \text{ nm}^{[5]}$ 。纳米集成电路中 X 射线光刻要求镜片表面粗糙度 $RMS = 1 \text{ nm}^{[6,7]}$,如此低的表面粗糙度对材质提出了越来越高的要求。传统的工艺方法制备的材料很难满足这些应用要求。众所周知,材质中的颗粒大小、缺陷、气孔率、气孔大小对表面粗糙度有重要的影响^[8-9],但材质和表面粗糙度的定量关系这一问题,迄今为止鲜见认真的讨论与研究。本文的目的是通过几何方法,建立起气孔率与气孔大小、多少的关系模型,然后通过数学方法建立起材质中气孔率、气孔大小与表面粗糙度的定量模型。试图为光学设计者提供选材的理论依据,为材料工作者提供对光学材料的具体要求和选择材料制备工艺的依据。

2 气孔率与气孔大小和数量的关系模型

材料质量对表面粗糙度的影响有微观结构缺陷、显微结构缺陷,如杂质的偏析和夹杂,颗粒的大小与不均匀性等;还有气孔率和气孔大小及分布。本文仅考虑气孔率和气孔大小对表面粗糙度的影响,未考虑其他微观结构和显微结构缺陷。

2.1 单位体积中气孔率与气孔大小和数量的关系模型

假定有一气孔率为 ρ (%) 的均质材料,气孔大小和形状半径为 r (本文规定 r 的单位为 μm) 的球体。气孔均匀地分布在介质中,单位体积介质(本文规定为 1 cm^3) 中的气孔的个数为 N_V 。那么,可以建立起如下关系:

$$= N_V \times \frac{4}{3} \times \pi \times (r \times 10^{-4})^3, \quad (2-1)$$

$$\text{即} \quad N_V = \frac{3 \times 10^{12}}{4 r^3}. \quad (2-2)$$

式(2-2)为气孔率、单位体积内的气孔大小和气孔数量的关系,为直观起见,将式(2-2)用图来表示。图 1 为不同气孔率的材质中气孔大小与气孔数量的关系图;图 2 为不同气孔大小材质中气孔率与气孔数量的关系。从图 1 和图 2 中可看出,随着材质中气孔率的增加,单位体积内气孔的数量急剧增加,这将影响材料的光学加工精度。从图 1 中可知,即使材质中气孔率仅为 0.000 1 时,其中的微米级的气孔数量也是很多的。

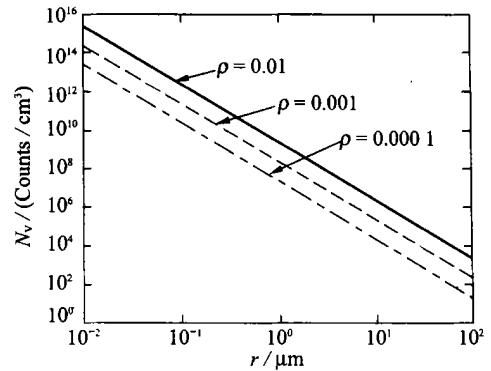


图 1 不同气孔率材质中气孔大小与气孔数量的关系
Fig.1 Relationship between pore sizes and numbers in the materials with different pore ratios

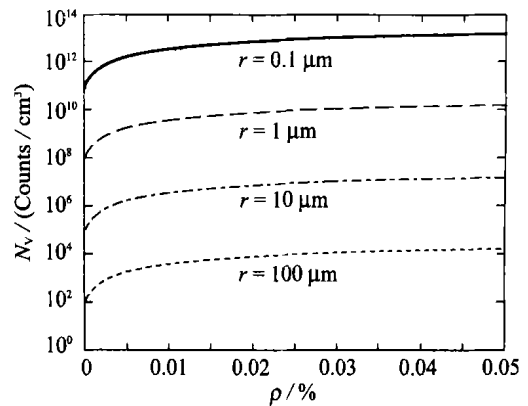


图 2 不同的气孔大小材质中气孔率与气孔数量的关系
Fig.2 Relationship between pore ratios and numbers in the materials with different pore sizes

2.2 单位表面上气孔率与气孔大小和数量的关系模型

为了得到单位面积上气孔率与气孔大小和数量的关系,要在体积模型的基础上做一些改进。假定上表面为 1 cm^2 ,高度为 1 cm 的圆柱体的介质,存在着 N_S 个半径为 r (r 的单位为 μm),高度为 1 cm 的圆柱状空洞,也就是单位面积上存在着半径为 r ,数量为 N_S 的空洞,如图 3 所示。在这一单位体积的介质中,存在着如下关系:

$$= N_S \times \pi \times (r \times 10^{-4})^2 \times h, \quad (2-3)$$

$h = 1 \text{ cm}$,所以:

$$N_S = \frac{10^8}{r^2}. \quad (2-4)$$

式(2-4)为气孔率与单位面积上半径为 r ,数量为 N_S 的相互关系。图 4 为单位面积上不同气孔率

材质中气孔大小与气孔数量的关系;图 5 为单位面积上气孔大小不同的材质中气孔率与气孔数量的关系。同样的,由图 4,图 5 可知,当材质中存在一定气孔率时,单位面积上的气孔数量是较多的。

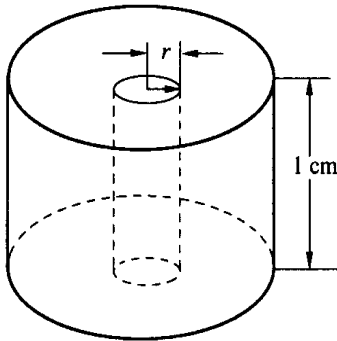


图 3 计算单位面积上气孔大小与气孔数量示意图

Fig. 3 Model for calculating the pore sizes and numbers on per area



图 4 单位面积上不同气孔率材质中气孔大小与气孔数量的关系

Fig. 4 Relationship between pore sizes and numbers per area in the materials with different pore ratios

3 表面粗糙度 R_A 与材质的气孔率和气孔大小的关系模型和特征

表面粗糙度是指材质表面的凸凹不平的程度,从本质上讲是表面几何形状对其理想几何形状的变动量^[10-11](除了与材质本身的特性有关外,还与表面的加工(如磨抛等)的质量有关)。为了建立起表面粗糙度 R_A 与材质特性之间的关系,在此假定材质是理想的平面形态。

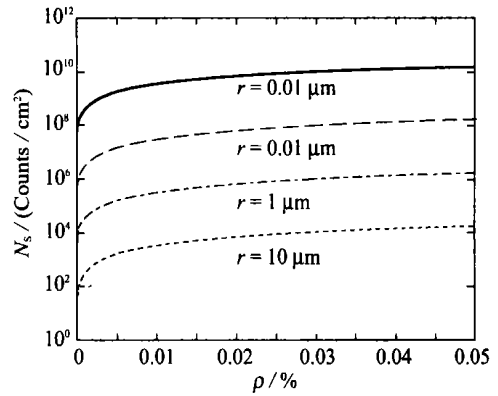


图 5 单位面积上气孔大小不同的材质中气孔率与气孔数量的关系

Fig. 5 Relationship between pore ratios and numbers per area in the materials with different pore size

3. 1 表面粗糙度的定义

表面粗糙度的意义可以用图 6 来说明:在图 6 中, x 方向代表平面方向, y 方向代表高度方向,阴影部分是材质的横断面示意。表面形态的曲线 y 为轮廓线, x 轴为轮廓中线,轮廓中线是测试表面粗糙度的基准线,也就是上面提到的理想的几何形态。

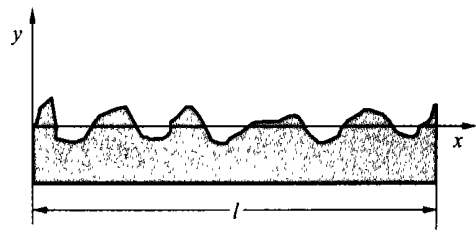


图 6 表面粗糙度计算的示意图
Fig. 6 Sketch model for calculating surface roughness

轮廓中线的确定方法是:

在 x 轴上方的轮廓线为正值,下方的轮廓线为负值,则:轮廓中线满足如下条件:

$$\int_0^l y dx (y \geq 0) = - \int_0^l y dx (y \leq 0), \quad (3-1)$$

也就是,轮廓中线上方轮廓线与 x 轴围成的面积和等于轮廓中线下方轮廓线与 x 轴围成的面积和,因此轮廓中线具有唯一性,即同一测试面上只有一条轮廓中线。

当轮廓线,轮廓中线确定之后,对于长度为 l 的区域表面粗糙度 R_A 的定义为:

$$R_A = \frac{1}{l} \int_0^l |y| dx, \quad (3-2)$$

3.2 表面粗糙度 R_A 与材质的气孔率和气孔大小关系模型和特征

根据 R_A 定义,可知表面粗糙度 R_A 完全取决于表面几何形态。影响表面的几何形态的除了与材质的本身特性有关外,还与表面的加工质量有关。为了建立起表面粗糙度 R_A 与材质的气孔率和气孔大小之间的关系,假定表面粗糙度不受加工的影响,也就是表面是理想的平面几何形态,这样表面粗糙度只受到气孔率、气孔大小、气孔形态的影响。为了保证在气孔率为 $\frac{10^4}{N_L}$ 的材质中取任一长度为 l 的表面,其轮廓线具有唯一性。在前述的体积气孔和表面气孔的基础上对气孔形状进行修正,并建立如下模型。

在气孔率为 $\frac{10^4}{N_L}$ 的单位体积 (cm^3) 材料中具有边长为 $2d$ (d 的单位为 μm) 的立方空洞,其个数为 N_V ,根据式(2-2)得到:

$$N_V = \frac{10^{12}}{8d^3}, \quad (3-3)$$

同样的单位面积 (cm^2) 上具有边长为 $2d$ (d 的单位为 μm) 正方形孔隙的个数为 N_S ,根据式(2-4):

$$N_S = \frac{10^8}{4d^2}, \quad (3-4)$$

单位长度(1 cm)中具有孔隙为 $2d$ 的个数为 N_L ,则:

$$N_L = \frac{N_S \cdot 2d}{10^4} = \frac{10^8}{4d^2} \cdot \frac{2d}{10^4} = \frac{10^4}{2d}, \quad (3-5)$$

单位长度上所经过的孔隙长度为 $2dN_L$,计算得:

$$2dN_L = 2d \cdot \frac{10^4}{2d} = 10^4, \quad (3-6)$$

由式(3-6)可知,单位长度上经过的孔隙长度与气孔的大小和数量无关,仅与气孔率 $\frac{10^4}{N_L}$ 有关。

从上可知,单位长度上有 N_L 个经过长度为 $2d$ 孔隙的周期,对于每个周期 i ,可用图 8 来表示。根据粗糙度 R_A 的定义,可以求出所建立的模型表面粗糙度(见图 7):

$$R_A = \frac{1}{l} \int_0^l |y| dx = \frac{1}{10^4} \sum_{i=1}^{N_L} [2d(h - h_1) + (\frac{10^4}{N_L} - 2d)h_1] = 10^{-4} N_L [(2d(h - h_1) + (\frac{10^4}{N_L} - 2d)h_1)], \quad (3-7)$$

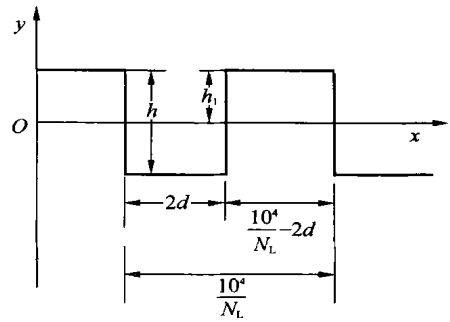


图 7 表面粗糙度模型表示
Fig.7 Model of surface roughness

所建立模型的表面粗糙度与空隙的深度 h 和轮廓中线 x 轴与 y 轴的距离 h_1 有关。显然, h 的值不是固定的,而是一随机的函数,是由表面加

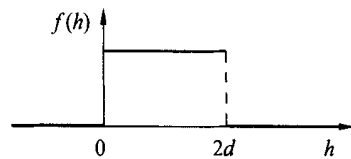


图 8 孔隙深度随机分布函数图
Fig.8 Randomly distributing figure of pore depth

工随机确定的,其值的范围由建立的模型给定为 $0 < h \leq 2d$ 。该随机函数为均匀分布,其分布图如图 8 所示,分布函数为:

$$f(h) = \begin{cases} \frac{1}{2d} & (0 < h \leq 2d) \\ 0 & (h < 0 \text{ 或 } h > 2d), \end{cases} \quad (3-8)$$

其数学期望值 $E(h)$ 为:

$$E(h) = \int_0^{2d} \frac{h}{2d} dh = d, \quad (3-9)$$

数学期望值即为 h 在 $0 \sim 2d$ 之间的平均值,用平均值代表 h 值,即: $h = d$ 。 h 值确定后,根据轮廓中线的性质和原则,可以得到:

$$(\frac{10^4}{N_L} - 2d)h_1 = 2d(h - h_1), \quad (3-10)$$

$$\text{即: } h_1 = \frac{2dhN_L}{10^4}, \quad (3-11)$$

将式(3-5)代入式(3-10)得:

$$h_1 = h, \quad (3-12)$$

将式(3-12),式(3-4)和 $h = d$ 代入式(3-7),得:

$$R_A = 2d(1 - \rho) \quad (3-13)$$

当 ρ 很小时, R_A 可简化为:

$$R_A \approx 2d \quad (3-14)$$

表面粗糙度与气孔率成正比,即气孔率越高,其表面粗糙度越大;表面粗糙度与气孔的大小成正比,气孔越大,表面粗糙度越大。按式(3-13)作图 9 和图 10,图 9 为表面粗糙度与气孔率的关系;图 10 为表面粗糙度与气孔大小的关系。

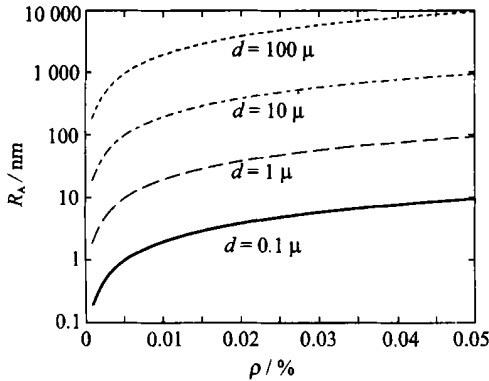


图 9 表面粗糙度与气孔率的关系图

Fig. 9 Relationship between surface roughness and pore ratio

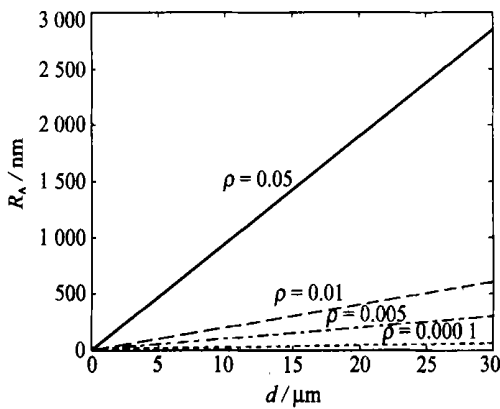


图 10 表面粗糙度与气孔大小的关系图

Fig. 10 Relationship between surface roughness and pore size

因此,为了降低表面粗糙度,从材料的选择上

要求材质的气孔率尽可能的少、气孔尺寸也要尽量小。对于传统烧结法制备的材料,控制气孔率为 0.01,气孔大小为 $2 \mu\text{m}$ 就比较困难了,这时根据式(3-14)计算可知,表面粗糙度 $R_A = 20 \text{ nm}$,显然不能满足光学材料的要求。所以为了满足精密光学材料的要求,对材质的制备工艺要合理选择。

至此,建立起了材质气孔率和气孔大小与表面粗糙度的定量关系,这对光学设计者和材料工作者选择材料制备方法提供了理论依据。但是,值得注意的是,本文所建立的模型存在着某些缺陷,如最终表征 R_A 时为简化起见认为材质中的气孔边长为 $2d$ 的立方体,显然是有误差的;同时认为材质的表面为理想的平面几何形态,这与实际的加工状态存在一些差异。对于误差分析与模型修正也是下一步将要要做的工作。

4 结 论

在光学系统中,镜片的表面粗糙度对光学系统的成像质量有着决定性的影响,而镜片的表面粗糙度不仅与光学加工工艺有关,还与材质本身的性质有关,材质中的颗粒大小、缺陷、气孔率、气孔大小对表面粗糙度有重要的影响。本文通过几何方法,建立了气孔率与气孔大小、多少的关系模型。通过数学方法建立了材质中气孔率、气孔大小与表面粗糙度的定量模型,得出如下结论:

- (1) 单位体积 (cm^3) 中气孔率 ρ 与气孔大小 r (μm) 和数量 N_V 的关系为: $N_V = \frac{3 \times 10^{12} \cdot \rho}{4 r^3}$;
- (2) 单位面积 (cm^2) 中气孔率 ρ 与气孔大小 r (μm) 和数量 N_S 的关系为: $N_S = \frac{10^8 \cdot \rho}{r^2}$;
- (3) 材质气孔率和气孔大小与表面粗糙度 R_A 的关系为: $R_A = 2d(1 - \rho)$, 即表面粗糙度近似与材质中的气孔率成正比,与气孔大小成正比。

参考文献:

[1] 何雅全,吴明根.超精密加工技术基础[D].航空航天工业部第 303 技术研究所,1993.
HE Y Q, WU M G. The basis of ultra-precise machining[D]. No. 303 Institute of Technology, Ministry of Aerospace Industry, 1993.

[2] 高宏刚,曹健林.超光滑表面及其制造技术的发展[J].物理,2000,29(10):610-614.
GAO H G, CAO J L. The development and application of ultra-smooth surfaces[J]. Physics, 2000, 29(10): 610-614.

- [3] KAWADA M. FIS: Far-infrared surveyor on board IRIS[J]. *SPIE*, 1998,3354:905-914.
- [4] MATSUHARA ,H. IRC: An infrared camera onboard the IRIS[J]. *SPIE*, 1998,3354:915-921.
- [5] MICHAELL A , PETER H. SiC lightweight telescopes for space applications[J]. *SPIE*, 1992,1693:281-283.
- [6] FREEMAN R R ,STULEN R H. Developing a soft X-ray projection lithography tool [J]. *AT&T Technical Journal* , 1991,11(12) : 37-48.
- [7] STREAMS D G. X-ray scattering from interfacial roughness in multiplayer structures [J]. *J Appl Phys* ,1992,71:4286-4298.
- [8] 全燕鸣,叶邦彦. 复合材料的切削加工表面结构与表面粗糙度[J]. *复合材料学报* ,2001,18(4) :128-132.
QUANG Y M, YE B Y. Machined surface texture and roughness of composites[J]. *Acta Material Compositae Sinica* ,2001,18(4) : 128-132.
- [9] 黄忠. 表面粗糙度[M]. 成都:四川科学技术出版社,1986.
HUANG ZH. *Surface roughness*[M]. Cheng Du: The Science and Technology Publishing House of Szechwan, Chengdu, 1986.
- [10] 袁世良. 表面粗糙度及其测量[M]. 北京:机械工业出版社,1989.
YUAN SH L. *Surface roughness and its measure*[M]. Beijing: The Publishing House of Mechanical Industry, 1989.
- [11] CHURCH E L. Fractal surface finish [J]. *Appl Opt* ,1988,27(8) :1518-1526.

作者简介:张长瑞(1955 -) ,男,湖南常德人,国防科学技术大学航天与材料工程学院教授,博士生导师,研究方向为陶瓷基复合材料及纳米复合材料,已发表论文 100 多篇。