Laser in der Materialbearbeitung Forschungsberichte des IFSW

#### A. Ruf

Modellierung des Perkussionsbohrens von Metallen mit kurz- und ultrakurzgepulsten Lasern

## Laser in der Materialbearbeitung Forschungsberichte des IFSW

Herausgegeben von Prof. Dr.-Ing. habil. Helmut Hügel, Universität Stuttgart Institut für Strahlwerkzeuge (IFSW)

Das Strahlwerkzeug Laser gewinnt zunehmende Bedeutung für die industrielle Fertigung. Einhergehend mit seiner Akzeptanz und Verbreitung wachsen die Anforderungen bezüglich Effizienz und Qualität an die Geräte selbst wie auch an die Bearbeitungsprozesse. Gleichzeitig werden immer neue Anwendungsfelder erschlossen. In diesem Zusammenhang auftretende wissenschaftliche und technische Problemstellungen können nur in partnerschaftlicher Zusammenarbeit zwischen Industrie und Forschungsinstituten bewältigt werden.

Das 1986 gegründete Institut für Strahlwerkzeuge der Universität Stuttgart (IFSW) beschäftigt sich unter verschiedenen Aspekten und in vielfältiger Form mit dem Laser als einem Werkzeug. Wesentliche Schwerpunkte bilden die Weiterentwicklung von Strahlquellen, optischen Elementen zur Strahlführung und Strahlformung, Komponenten zur Prozessdurchführung und die Optimierung der Bearbeitungsverfahren. Die Arbeiten umfassen den Bereich von physikalischen Grundlagen über anwendungsorientierte Aufgabenstellungen bis hin zu praxisnaher Auftragsforschung.

Die Buchreihe "Laser in der Materialbearbeitung – Forschungsberichte des IFSW" soll einen in der Industrie wie in Forschungsinstituten tätigen Interessentenkreis über abgeschlossene Forschungsarbeiten, Themenschwerpunkte und Dissertationen informieren. Studenten soll die Möglichkeit der Wissensvertiefung gegeben werden.

# Modellierung des Perkussionsbohrens von Metallen mit kurz- und ultrakurzgepulsten Lasern

Von Dr.-Ing. Andreas Ruf Universität Stuttgart



Herbert Utz Verlag · München

Als Dissertation genehmigt von der Fakultät für Maschinenbau der Universität Stuttgart

Hauptberichter: Prof. Dr. rer. nat. habil. Friedrich Dausinger Mitberichter: Prof. Dr.-Ing. Hans Hasse

Bibliografische Information Der Deutschen Bibliothek

Die Deutsche Bibliothek verzeichnet diese Publikation in der Deutschen Nationalbibliografie; detaillierte bibliografische Daten sind im Internet über http://nb.ddb.de abrufbar.

Zugleich: Dissertation, Stuttgart, Univ. 2004

Dieses Werk ist urheberrechtlich geschützt. Die dadurch begründeten Rechte, insbesondere die der Übersetzung, des Nachdrucks, der Entnahme von Abbildungen, der Wiedergabe auf photomechanischem oder ähnlichem Wege und der Speicherung in Datenverarbeitungsanlagen bleiben – auch bei nur auszugsweiser Verwendung – vorbehalten.

Copyright © Herbert Utz Verlag GmbH 2004

ISBN 3-8316-0372-3

Printed in Germany

Herbert Utz Verlag GmbH, München Tel.: 089/277791-00 – Fax: 089/277791-01

D93

## Kurzfassung

Bisher werden beim industriellen Einsatz des Laserbohrens vor allem Laser mit Pulsdauern im Bereich von Milli- und Mikrosekunden verwendet. Da die starke Schmelzbildung die dabei erreichbare Präzision begrenzt, geht die Entwicklung inzwischen jedoch verstärkt in Richtung kürzerer Pulsdauern. Der Abtragsprozess in diesem Regime ist derzeit allerdings nur teilweise verstanden.

Die vorliegende Arbeit befasst sich mit der Untersuchung der Möglichkeit einer ganzheitlichen Modellierung des Laserbohrens von Metallen mit kurz- und ultrakurzgepulsten Strahlquellen unter Einbeziehung des Festkörpers, der Schmelze sowie des Dampfes bzw. des Plasmas. Im Vordergrund der Betrachtungen steht nicht die möglichst genaue Nachbildung des Prozesses, sondern vielmehr die systematische Identifizierung der relevanten Mechanismen mit dem Ziel, zu einer Verbesserung des Prozessverständnisses zu gelangen. Dazu werden die Einflüsse und Besonderheiten der Werkstoffeigenschaften, der Energieeinkopplung, der Materialerwärmung, der Verdampfung und des Materialaustriebs unter den extremen thermischen und mechanischen Bedingungen des Abtragens mit kurzen Laserpulsen analysiert.

Grundlage für die Simulation des Laserbohrens ist die Kenntnis der thermophysikalischen Materialeigenschaften über einen großen Bereich der Temperatur und Dichte. Solche Kenngrößen sind oft nur bei vergleichsweise geringen Temperaturen experimentell zuverlässig messbar. Für die weit darüber hinausgehenden Prozesstemperaturen werden sie deshalb mit einem weiter entwickelten, theoretischen Zustandsgleichungsmodell abgeschätzt.

Da die Propagation der Laserstrahlung durch den Materialdampf während des Bohrprozesses erheblich durch lokale Brechungsindexunterschiede in der Wechselwirkungszone beeinflusst werden kann, wird ein numerisches Einkopplungsmodell auf Basis der Maxwell-Gleichungen vorgestellt. Berechnungen zur Einkopplung an rauen Oberflächen oder Sacklochbohrungen verdeutlichen die Effizienzsteigerung durch Vielfachreflexionen. Gleichzeitig wird gezeigt, dass Schwebeteilchen und Durchbrüche im Dampf zu einer starken Deformation des räumlichen und zeitlichen Strahlprofils führen können.

Anhand vergleichsweise einfacher analytischer und numerischer Modelle werden die Grundzüge der Materialerwärmung und des Abtragsverhalten bei Pulsdauern unter 10 ns

herausgearbeitet. Während der Prozess oberhalb von etwa 100 ps maßgeblich von der Pulsdauer beeinflusst wird, zeigt er für kürzere Pulse ein materialspezifisches Sättigungsverhalten, das z.B. eine völlig schmelzfreie Bearbeitung verhindert. Mit zunehmender Bohrtiefe werden durch die Veränderung der Topografie verschiedene Abtragsregime durchschritten, die teilweise auch auf Einkopplungs- und Wärmeleitungseinflüsse zurückgeführt werden können.

Während bei den bisher für das Laserbohren eingeführten Lasern mit längeren Pulsdauern das Material überwiegend in Form von Schmelze ausgetrieben wird, kann dies für kurze (ns) und ultrakurze (ps und fs) Pulse nicht erwartet werden. Bei den damit verbundenen höheren Leistungsdichten gewinnt der Materialaustrieb aus der Wechselwirkungszone an Bedeutung. Auch wenn der Schmelzfluss bei kurzen Laserpulsen kaum Einfluss auf die Effizienz hat, da die Schmelze dann nur um wenige Mikrometer pro Puls bewegt wird, so ist er doch maßgeblich für die Bohrungsqualität. Eine Gratentstehung kann vor allem durch eine Verringerung der Pulsenergie reduziert werden.

Die simultane Berechnung von Festkörper, Schmelze und Dampf verdeutlicht deren gegenseitige Beeinflussung und die regulierende Wirkung des Plasmas auf die Energieeinkopplung. Durch zeitliche und räumliche Pulsformung kann die Plasmaentstehung und somit der Abtragsprozess beeinflusst werden.

## Inhalt

Kı	urzfa	ssung	5
In	halt		7
Li	ste de	er verwendeten Symbole	9
Ex	tend	ed Abstract	15
1	Einl	leitung	19
	1.1	Motivation und Ziel der Arbeit	19
	1.2	Kurzbeschreibung des Bohrprozesses	22
	1.3	Modellierung des Bohrprozesses	26
	1.4	Konzeption der Arbeit	29
2	Materialeigenschaften bei hohen Temperaturen		
	2.1	Thermophysikalische Eigenschaften	32
	2.2	Transporteigenschaften	34
	2.3	Optische Eigenschaften	37
	2.4	Phasenübergänge und Verdampfung	41
3	Wec	chselwirkung der Laserstrahlung mit Materie	45
	3.1	Strahlausbreitung in einem homogenen Medium	45
	3.2	Energieeinkopplung in der Bohrkapillare	48
	3.3	Streuung und Absorption im Materialdampf	54
4	Mat	erialerwärmung und -abkühlung	59
	4.1	Klassische Wärmeleitung	60
	4.2	Zwei-Temperatur-Modell	64
	4.3	Geometrische Einflüsse	67
		4.3.1 Strahlprofil und -bewegung	67
		4.3.2 Oberflächenrundung	69

5	Mat	erialab	trag durch Verdampfung	71
	5.1	Makro	oskopisches Verdampfungsmodell	71
		5.1.1	Makroskopische Abdampfrate	71
		5.1.2	Modellbeschreibung und analytische Näherungen	73
	5.2	Einflu	ssfaktoren für die Abtragseffizienz	76
		5.2.1	Intensität und Pulsdauer	76
		5.2.2	Pulszahl	81
		5.2.3	Abtragsmechanismus	84
6	Mat	erialau	strieb	87
	6.1	Schme	elzdynamik	87
		6.1.1	Stationärer Schmelzfluss	88
		6.1.2	Schmelzbeschleunigung	91
		6.1.3	Geometrische Einflüsse	94
	6.2	Einflu	ss der Gasdynamik und des Plasmas	99
7	Zusa	ammen	fassung und Ausblick	109
A	Mat	erialda	ten ausgewählter Werkstoffe	112
B	Phys	sikalisc	he Grundlagen der Zustandsgleichung	113
	<b>B</b> .1	Grund	lagen des QEOS-Modells	113
		B.1.1	Elektronischer Anteil	113
		B.1.2	Beitrag der Ionen	114
		B.1.3	Bindungskorrektur	115
	B.2	Ionisie	erung des Dampfes nach dem Saha-Modell	115
	B.3	Berech	nnung der Stoßfrequenzen in einem teilweise ioniserten Plasma .	117
С	Nun	nerische	e Simulation der Strahlpropagation	119
D	Erw	ärmun	g eines sphärischen Hohlraums	122

# Liste der verwendeten Symbole

Symbol	Bedeutung	Wert	SI-Einheit
Lateinis	che Buchstaben		
A	Absorptionsgrad		
Ae	Normierungskonstante		
$A_{\lambda}$	Abweichung von $\lambda_{th}$ vom freien Elektronengas	5	
$A_{\sigma}$	Abweichung von $\sigma_0$ vom freien Elektronengas		
$\vec{\mathcal{B}}$	Magnetische Induktion		${ m Vsm^{-2}}$
Bs	Kompressionsmodul		Pa
Ce	Wärmekapazität der Elektronen		$Jm^{-3}K^{-1}$
Ci	Wärmekapazität der Ionen		$Jm^{-3}K^{-1}$
<i>c</i> <sub>0</sub>	Lichtgeschwindigkeit im Vakuum	$2.998 \times 10^{8}$	${ m m~s^{-1}}$
C <sub>p</sub>	Spezifische Wärmekapazität bei konst. Druck		$\mathrm{Jkg^{-1}K^{-1}}$
$\vec{\tilde{\mathcal{D}}}$	Dielektrische Verschiebung		${\rm A~s~m^{-2}}$
$d_{\mathrm{f}}$	Fokusdurchmesser		m
$d_{\rm h}$	Bohrlochdurchmesser		m
$d_{\rm m}$	Schmelzfilmdicke		m
Ĩ	Elektrisches Feld		${ m V}{ m m}^{-1}$
ŝ	Amplitude des elektrischen Felds		${ m V}{ m m}^{-1}$
Ε	Leistungsdichte (Intensität)		${ m W}{ m m}^{-2}$
Ē	Durchschnittliche Leistungsdichte im Fokus		${ m W}{ m m}^{-2}$
Ê	Maximale Leistungsdichte im Fokus		${ m W}{ m m}^{-2}$
$E_{\rm F}$	Fermi-Energie		J
$E_k$	Elektronisches Energieniveau		J
$E_{\rm s}$	Elastizitätsmodul		Pa
$E_{\rm th}$	Abtragsschwelle der Leistungsdichte		W/cm <sup>2</sup>
е	Elementarladung	$1.602 \times 10^{-19}$	С
F	Freie Enthalpie		J
Fb	Bindungsanteil der freien Enthalpie		J
Fe	Freie Enthalpie der Elektronen		J
$F_{\rm i}$	Freie Enthalpie der Ionen		J

Symbol	Bedeutung	Wert	SI-Einheit
$f_i$	Relative Oszillatorstärke		
fp	Pulswiederholfrequenz		Hz
G	Elektron-Phonon-Kopplungskonstante		$\mathrm{W}\mathrm{m}^{-3}\mathrm{K}^{-1}$
$G_{ep}$	Spezifische Kopplungskonstante		$W kg^{-1}K^{-1}$
$G_{\delta}$	Impulsantwort		
$g_k$	Entartungsgrad des k-ten Zustands		
$\vec{\mathcal{H}}$	Magnetisches Feld		$\mathrm{A}\mathrm{m}^{-1}$
Η	Energiedichte (Fluenz)		$\mathrm{J}\mathrm{m}^{-2}$
Ē	Durchschnittliche Energiedichte im Fokus		$\mathrm{J}\mathrm{m}^{-2}$
Ĥ	Maximale Energiedichte im Fokus		$\mathrm{J}\mathrm{m}^{-2}$
$H_{\mathrm{T}}$	Enthalpie		J
$H_{\mathrm{th}}$	Abtragsschwelle für Energiedichte		$\mathrm{J}\mathrm{m}^{-2}$
ħ	Planck'sche Konstante $\hbar = h/(2\pi)$	$1.055 \times 10^{-34}$	J s
$h_{\rm c}$	Wärmeübergangskoeffizient		$\mathrm{W}\mathrm{m}^{-2}\mathrm{K}^{-1}$
$\Delta h$	Charakteristische Länge für Druckabfall		m
Ι	Ionisierungsenergie		J
$\Delta I$	Ionisierungsenergie-Absenkung		J
$ec{j}_{ m th}$	Wärmestromdichte		${ m W}{ m m}^{-2}$
$\vec{j}_{ m v}$	Verdampfungsrate		${\rm kg}{\rm m}^{-2}{\rm s}^{-1}$
$\vec{k}$	Wellenvektor		$m^{-1}$
$k_{\rm B}$	Boltzmann-Konstante	$1.381 \times 10^{-23}$	$\mathrm{J}\mathrm{K}^{-1}$
Lm	Latente Schmelzwärme		$\mathrm{Jkg^{-1}}$
$L_{\rm v}$	Latente Verdampfungswärme		$\mathrm{Jkg^{-1}}$
$l_{ m th}$	Diffusionslänge		m
$l_{\alpha}$	Absorptionslänge		m
$\ln \Lambda$	Coulomb-Logarithmus		
$M^2$	Beugungsmaßzahl		
m <sub>e</sub>	Elektronenmasse	$9.109 \times 10^{-31}$	kg
mi	Ionenmasse		kg
Ν	Pulszahl		
n	Reeller Brechungsindex		
ñ	Komplexer Brechungsindex		
$\vec{n}$	Oberflächennormale		
$n_0$	Schwerteilchenkonzentration		m <sup>-3</sup>

Symbol	Bedeutung	Wert	SI-Einheit
n <sub>e</sub>	Elektronenkonzentration		$m^{-3}$
ni	Ionenkonzentration		$m^{-3}$
$n_{i}^{(Z_{i})}$	Konzentration an Zi-fach ionisierten Atomen		$m^{-3}$
n <sub>t</sub>	Gesamtteilchenkonzentration		$m^{-3}$
Ī	Polarisation		${\rm A~s~m^{-2}}$
Р	Leistung		W
$\vec{p}$	Impulsvektor		${\rm kg}{\rm m}{\rm s}^{-1}$
р	Druck		Pa
$p_0$	Umgebungsdruck		Pa
$p_{\rm v}$	Dampfdruck		Pa
$\Delta p$	Druckdifferenz		Pa
Q	Pulsenergie		J
q	Volumenenergiedichte		$\mathrm{J}\mathrm{m}^{-3}$
ġ	Volumenleistungsdichte		${ m W}{ m m}^{-3}$
r	Radiale Koordinate		m
$\bar{r}$	Mittlerer Teilchenabstand		m
r <sub>K</sub>	Krümmungsradius		m
R	Reflexionsgrad		
R <sub>s</sub>	Spezifische Gaskonstante		$\mathrm{Jkg^{-1}K^{-1}}$
ŝ	Poynting-Vektor		${ m W}{ m m}^{-2}$
Т	Temperatur		Κ
$T_{\rm F}$	Fermi-Temperatur		Κ
$T_{\rm b}$	Siedetemperatur		Κ
$T_{\rm c}$	Kritische Temperatur		Κ
T <sub>e</sub>	Elektronentemperatur		Κ
$T_{\rm i}$	Ionentemperatur		Κ
T <sub>m</sub>	Schmelztemperatur		Κ
Tp	Pulsabstand		S
$T_{\rm s}$	Oberflächentemperatur		Κ
$T_{\infty}$	Umgebungstemperatur		Κ
t	Zeit		S
t <sub>b</sub>	Zeitpunkt des Erreichens der Siedetemperatur		S
и	Geschwindigkeit		${ m m~s^{-1}}$
$u_{\rm Puls}$	Mittlere Abtragsgeschwindigkeit pro Puls		${ m m~s^{-1}}$

Symbol	Bedeutung	Wert	SI-Einheit
<i>u</i> <sub>e</sub>	Elektronengeschwindigkeit		${ m ms^{-1}}$
um	Abtragsgeschwindigkeit durch Schmelzaustrieb		${ m m~s^{-1}}$
$u'_{\rm m}$	Fließgeschwindigkeit der Schmelze		${\rm m}{\rm s}^{-1}$
$u_{\rm v}$	Verdampfungsgeschwindigkeit		${\rm m}{\rm s}^{-1}$
V	Volumen		m <sup>3</sup>
$\dot{V}$	Volumenabtragsrate		$\mathrm{m}^3\mathrm{s}^{-1}$
Ve	Elektrisches Potenzial		V
W	Strahlradius		m
Wf	Strahlradius im Fokus		m
x	Laterale Koordinate		m
$x_0$	Laterale Laserposition		m
у	Laterale Koordinate		m
<i>y</i> <sub>0</sub>	Laterale Laserposition		m
Ζ	Ionisierungsgrad		
$Z_i$	Diskrete Ionisierungsstufe		
Zat	Kernladungszahl		
z	Axiale Koordinate, Tiefe		m
$z_{\rm R}$	Rayleigh-Länge		m
$\Delta z$	Abtragstiefe pro Puls		m
Griechis	che Buchstaben		
α	Absorptionskoeffizient		$m^{-1}$
$lpha_{ m bs}$	Rückstreukoeffizient		
$\Gamma_{\rm s}$	Grüneisenkonstante		
γ	Adiabatenexponent		
$\gamma_{\rm s}$	Elektronischer Wärmekapazitätskoeffizient		$\mathrm{Jkg^{-1}K^{-2}}$
Ya	Elektronen-Streuungskorrektur für $\lambda_{th}$		
γσ	Elektronen-Streuungskorrektur für $\sigma_0$		
δ	Dirac Deltafunktion		
$\varepsilon_0$	Dielektrizitätskonstante	$3.854 \times 10^{-12}$	$A \mathrm{s}\mathrm{V}^{-1}\mathrm{m}^{-1}$
$\mathcal{E}_{r}$	Relative Dielektrizitätszahl		
$\epsilon_{\rm rad}$	Emissivität		
ζ	Zustandssumme		
η	Dynamische Viskosität		$N  s^{-1} m^{-2}$

Symbol	Bedeutung	Wert	SI-Einheit
$\Theta_{\rm D}$	Debye-Temperatur		Κ
θ	Einfallswinkel		
κ	Absorptionsindex		
ĸ <sub>th</sub>	Thermische Diffusivität $\kappa_{\rm th} = \lambda_{\rm th} / \rho c_{\rm p}$		$m^2 s^{-1}$
$\lambda_0$	Wellenlänge im Vakuum		m
$\lambda_{\rm D}$	Debye-Länge		m
$\lambda_{ m ep}$	Supraleitungskopplungskonstante		
$\lambda_{ m th}$	Wärmeleitfähigkeit		$\mathrm{W}\mathrm{m}^{-1}\mathrm{K}^{-1}$
μ	Chemisches Potenzial		J
$\mu_0$	Induktionskonstante	$1.257 \times 10^{-6}$	$V s A^{-1}m^{-1}$
v	Lichtfrequenz		Hz
$V_j$	Stoßfrequenz der Elektronen		Hz
ρ	Dichte		${\rm kg}{\rm m}^{-3}$
$ ho_{ m s}$	Festkörperdichte		${\rm kg}{\rm m}^{-3}$
σ	Oberflächenspannung		${ m N}{ m m}^{-1}$
$\sigma_0$	Gleichstromleitfähigkeit		$AV^{-1}m^{-1}$
$\sigma_{ m el}$	Wechselstromleifähigkeit		$AV^{-1}m^{-1}$
$\sigma_{\rm F}$	Fließspannung		Pa
$\sigma_{ m rad}$	Stefan-Boltzmann-Konstante	$5.670 \times 10^{-8}$	$\mathrm{W}\mathrm{m}^{-2}\mathrm{K}^{-4}$
$\sigma^{(Z_i)}$	Wirkungsquerschnitt bei $Z_i$ -facher Ionisation		m <sup>2</sup>
τ	Mittlere stoßfreie Zeit der Elektronen		S
$ au_{ m H}$	Pulsdauer (volle Halbwertsbreite)		S
$ au_{ m ee}$	Elektron-Elektron-Stoßzeit		S
$ au_{ m ei}$	Elektron-Ionen-Stoßzeit		S
$ au_{ m ii}$	Ionen-Ionen-Stoßzeit		S
$ au_{ m ep}$	Elektron-Phonon-Relaxationszeit		S
$ au_{ m rel}$	Relaxationszeit		S
$\varphi$	Azimuthaler Winkel		
$\chi^{(i)}$	Elektrische Suszeptibilität i-ter Ordnung		$V^{1-i}m^{i-1}$
ω	Kreisfrequenz des Lichts		$s^{-1}$
$\omega_{\rm ep}$	Phononenfrequenz		$s^{-1}$
$\omega_j$	Optische Eigenfrequenz		$s^{-1}$
$\omega_{\rm p}$	Plasmafrequenz		$s^{-1}$

### **Extended Abstract**

The ability of short pulsed lasers to produce microstructures of high quality and with good efficiency has led to an increasing demand for such tools in the industrial production. Due to the non contact nature of the laser drilling process, it can be used without significant wear for a wide range of materials, including not only metals but also ceramics as well as synthetic and composite materials. Additionally, the laser discloses a new dimension of microfabrication with decreasing structure sizes combined with a high performance. Practical applications include the drilling and structuring of spinnerets, diamond tools, printing and embossing plates as well as motor and turbine components such as the honing of cylinder bores, the drilling of injection nozzles, fuel filters, and cooling holes in turbines [1-10]. Furthermore, the laser has also been applied successfully in medicine and microelectronics [11-17].

In order to utilize the advantages of the laser, the fabrication process has to be optimized for each specific application concerning both efficiency and quality. In recent years the availability of short and ultrashort pulsed laser systems has allowed a considerable enhancement of the quality of the ablated surface by reducing the melt formation [18, 19]. Nevertheless even for femtosecond laser pulses, recast has been observed, the avoidance of which necessitates a further improvement of the processing strategy [20]. The latter can be facilitated by a fundamental insight of the physical mechanisms during the ablation process which are difficult to identify by diagnostic experiments alone due to the short timescales and small interaction zones. Therefore, the simulation is used to understand the important influences of the energy coupling, the material heating and evaporation as well as the ejection dynamics at least in qualitative manner. Both experiments and theoretical considerations have demonstrated the importance of the interaction of the different material phases for the resulting structures, thereby requiring a model which not only takes these states into account but also can describe their influence on each other. The aim of this work is to examine the possibility of an integral simulation of the laser drilling process by first identifying the important mechanisms and then suggesting a continuous way of their description.

The basis for the modeling of laser ablation is a good knowledge of the material properties such as heat capacities and thermal conductivity or the optical characteristics. Since it is difficult to obtain these values over a wide range of temperatures, densities, and compositions by experimental measurements alone, a theoretical approach can be used for a complete description. The QEOS-model (quotidian equation of state) [21] has been developed for that purpose and yields particularly for aluminum thermodynamic potentials which are in good agreement with experimental data. By means of a developed extension, it can also be used for the description of the transport properties such as the thermal conductivity, the viscosity, and the optical properties. The latter can include the influence of both the photoionization and the inverse bremsstrahlung, if a more rigorous treatment of the ionization process is used.

One of most important effects for the process efficiency and the resulting hole geometries is the question of the energy coupling. For the case of a flat surface surrounded by a homogeneous gas atmosphere, the beam propagation and its absorption can be described by classical ray optics. For deeper holes, the intensity drops due to the larger surface area and the radiation which is reflected from the side walls can be absorbed again when it hits the opposite surface. The coupling enhancement resulting from the latter effect can be described by ray-tracing, in principle. However to get a more detailed picture of the beam propagation on such small spatial dimensions, a direct solution of Maxwell's equations is useful. Such calculations exhibit considerable local variations in both the intensity distribution within the hole and the absorbed power density beneath the surface of the workpiece. Most of the small interference patterns probably will not have a significant influence on the ablated structure since the distribution is likely to change as the hole deepens. Nevertheless, the concentration of intensity near the optical axis could be important for the plasma breakdown and the smaller local variations could also constrict the process stability. If the ambient atmosphere is not optically transparent, the beam propagation can be modified in both space and time. While a condensed particle or a plasma breakdown can scatter the beam in a conical way, the nonlinear optical properties of the gas can alter the temporal and thereby the spectral properties of the laser pulse. The scattering could explain the ring-like structures around the main hole which are sometimes observed in the early stages of drilling [22, 23].

Once the incident light has been absorbed by the conduction electrons, subsequent collisions between electrons and phonons lead to a thermalization within the electronic system as well as between the electrons and the lattice. The latter relaxation needs much more time due to the large mass difference between the two collision partners and can last for up to 100 ps. Models for the ablation process with ultrashort laser pulses have to include this time delay. The characteristic process times for evaporation and solidification are strongly influenced by the pulse duration if this is sufficiently long, while for pulses shorter than 100 ps a material specific saturation is observed. Generally, a shorter pulse duration leads to a lower energetical ablation threshold and less melt formation. However as these quantities also saturate at small interaction times, the process will never be completely melt free in the case of metals. When small power densities are used, a large fraction of the applied energy is needed for the heating of the workpiece and will be lost due to heat conduction, finally. On the other hand for elevated intensities, the ablated vapor will be heated to higher temperatures such that it contains an increasing fraction of the laser power. When the hole becomes deeper and hence the surface area larger, not only the energy coupling changes but also the heat conduction such that the heat is diffused faster at the tip due to the concave curvature there. Both effects together can reduce the ablation rate by one or two orders of magnitude with growing hole depth. As a result, a double-logarithmic plot of the hole depth versus the number of applied laser pulses reveals two distinct ablation regimes. Initially when the surface is almost flat, the ablation depth increases linearly with the number of pulses N. After this planar ablation, the drilling rate decreases rapidly such that the depth z can be estimated by a relation of the form  $z \propto N^m$ . Experiments reveal a similar behavior although with some additional regimes [24-26]. These might be a consequence of the strong plasma influence which has not been accounted for in these calculations. Generally, the investigations of the ablation characteristics for laser drilling with short pulses indicate a strong influence of the generated plasma such that the simulations have to include it.

Since the material undergoes several phase transitions during the drilling process, a continuous description of the problem is advantageous although it complicates the numerical treatment due to the heavily varying material properties. As a first step it is possible to simulate the heating and evaporation of the workpiece together with the melt dynamics by using a commercially available finite-element fluid dynamics code. In good agreement with simplified analytical estimations, the results demonstrate a considerable delay of melt ejection with respect to the laser pulse. Although the vapor pressure can be fairly high and often exceeds 1 kbar, the acceleration of the melt is limited by the short vaporization time which typically ends a few nanoseconds after the laser pulse such that the resulting maximum flow velocities are only on the order of some 10 m/s. On the other hand, the decelerating forces of viscosity and surface tension are too small to slow down the melt significantly on a nanosecond time scale. Hence, the melt ejection continues until the material solidifies again which sometimes takes as long as some hundreds of nanoseconds. The volume of a burr surrounding the ablation zone is mainly related to the hole volume and hence the applied pulse energy. For short laser pulses it is not possible to eject the molten material within a single laser pulse from the bottom of the hole to the rim. As a consequence, the melt ejection has to be viewed as a cumulative process which becomes more and more difficult with increasing hole depth because of the diminishing pressure gradients which are responsible for the acceleration of the fluid.

Particularly for picosecond and shorter pulses and intensities well above the ablation threshold, the process dynamics is too high for the used finite-element software. Furthermore, it is not possible to include in this program the description of the vapor dynamics simultaneously with that of the melt. For these reasons, an additional approach [27, 28] has been examined which is also based on a commercial code but uses a different numerical algorithm which has been optimized particularly for a high process dynamics as for the description of shock waves in conjunction with several different material phases. The material itself is described continuously by an equation of state. By using the developed extension of the OEOS-model for the transport properties, it is possible to include the absorption due to photoionization and inverse bremsstrahlung in the model. The calculations then indicate a typical threshold behavior for the plasma breakdown. Above a certain pulse energy the vapor temperature can rise rapidly to values of some 100 000 K, triggering shock waves with velocities on the order of 10 km/s which is in good agreement with experimental observations. The strong absorption in the vapor at high temperatures blocks the target from the laser radiation and thereby diminishes the ablation. This mutual influence of vapor transmission and generation leads to a buffering effect which can keep the drilling process rather stable even in the presence of small fluctuations in energy coupling or material expulsion which might arise from the geometrical changes during the hole evolution. At the same time, pressure waves with amplitudes that can be as high as 10 kbar propagate into the workpiece such that the elastic-plastic deformation, which is also accounted for in the model, can be important for the resulting hole geometry. While the vapor related quantities show a reasonable good agreement with experimental results, the hydrodynamical model overestimates the ablation rates by an order of magnitude. Possible reasons for this discrepancy are shortages in the used equation of state but also numerical errors or convergence problems. The latter have been considerable for pulse durations below 1 ns and for higher intensities.

### 1 Einleitung

#### 1.1 Motivation und Ziel der Arbeit

Der Laser hat sich in vielen Bereichen der industriellen Fertigung und der Medizintechnik als flexibles Werkzeug bewährt. Das Marktvolumen von Lasermaterialbearbeitungssystemen ist daher in den vergangenen Jahren kontinuierlich auf derzeit über vier Milliarden Euro angestiegen und eine weitere Steigerung auf das Dreifache dieses Betrages wird für die nächsten zehn Jahre prognostiziert [29]. Gegenüber herkömmlichen Verfahren bietet der Laser neue Möglichkeiten hinsichtlich Präzision, Effizienz und Vielseitigkeit. Dennoch stehen diesen Vorteilen häufig entscheidende Kostennachteile durch die vergleichsweise hohen Anschaffungs- und Wartungskosten gegenüber. Um diese zu kompensieren müssen an den Laserfertigungsprozess besonders hohe Qualitäts- und Produktivitätsanforderungen gestellt werden.

In der Mikrobearbeitung, also z. B. beim Präzisionsbohren und -schneiden oder dem Strukturieren von Oberflächen, konkurriert der Laser vor allem mit mechanischen und elektrochemischen Verfahren. Durch das Feinschneiden, das Stechen oder das mechanische Wendelbohren auf der einen Seite und die Funkenerosion oder das Elektronenstrahlbohren auf der anderen lassen sich prinzipiell ebenfalls Bohrungen mit kleinen Abmessungen und hoher Präzision darstellen. Der Laser bietet jedoch gegenüber solchen Methoden zahlreiche entscheidende Vorteile, die in den letzten Jahren zu einem stetigen Anstieg seiner industriellen Bedeutung in der Fertigungstechnik geführt haben.

Da es sich beim Laserbohren und -abtragen um ein berührungsloses Verfahren handelt, bietet es eine hohe Flexibilität bei der Auswahl der Materialien, der Zugänglichkeit der Bearbeitungsstelle und der Kombination verschiedener Fertigungsschritte. Im Gegensatz zu mechanischen Methoden können durch den Einsatz des Lasers auch spröde und harte Materialien wie Keramiken, Diamant oder faserverstärkte Verbundwerkstoffe ohne Werkzeugverschleiß bearbeitet werden. Da diese elektrisch nicht leitfähig sind, sind elektrochemische Verfahren hierfür nicht geeignet. Solche Werkstoffe gewinnen aber beispielsweise durch ihre Hitzebeständigkeit, ihr vergleichsweise geringes Gewicht sowie ihre Härte, Festigkeit und chemische Beständigkeit immer mehr an industrieller und medizintechnischer Bedeutung. Der Laser ermöglicht dabei entweder ihre direkte Bearbeitung oder, wie beim laserunterstützten Zerspanen, durch eine geeignete Vorerwärmung der Abtragsstelle eine Reduktion des Werkzeugverschleißes mechanischer Verfahren [30]. Beispiele für den erfolgreichen Einsatz des Lasers bei solchen Aufgabenstellungen sind die Herstellung keramischer Spinndüsen sowie von Motor- oder Turbinenkomponenten [1–3, 26]. Außerdem wurde das Schneiden und Polieren von Diamant im Werkzeugbau demonstriert [4].

Aber auch bei der Mikrobearbeitung von Metallen kann der Laser die herkömmlichen Fertigungsverfahren im Hinblick auf Produktivität und Qualität übertreffen. Im Flugzeugbau ermöglicht der Laser z. B. durch das schnelle Einbringen von mehreren Millionen kleinster Löcher in Leitbleche eine Absaugung der Verwirbelungen an der Oberfläche und damit eine Reduktion des Luftwiderstands bzw. des Treibstoffverbrauchs [3]. Mit einer ähnlich hohen Effizienz werden inzwischen auch Kraftstofffilter in Düsenspannschrauben großindustriell hergestellt [5]. In zahlreichen anderen Anwendungen steht die durch den Lasereinsatz erhöhte Formtreue und Reproduzierbarkeit im Vordergrund. Die Kombination aus Bohren und Abtragen ermöglicht dabei auch die Erzeugung von Formbohrungen wie z. B. im Fall von Kühlbohrungen in Turbinenschaufeln [3]. Auch bei der Herstellung von Einspritzdüsen für Motoren verspricht der Laser eine Miniaturisierung und Steigerung der Präzision gegenüber der Funkenerosion bei gleichzeitig hoher Effizienz [5–7]. In ähnlicher Weise lassen sich auch Oberflächen mikroskopisch strukturieren um z. B. die tribologischen Eigenschaften zu verbessern. Das Laserhonen von Zylinderlaufbahnen wird inzwischen in der industriellen Serienproduktion eingesetzt [8]. In der Drucktechnik ist die hohe Genauigkeit des Lasers zum Strukturieren von Druckklischees und zur Gravur von Walzen von Vorteil [9, 10].

Neben den erwähnten Beispielen gibt noch zahlreiche weitere Anwendungsmöglichkeiten der Lasermikrobearbeitung beispielsweise in der Mikroelektronik, der Herstellung von Düsenplatten in Tintenstrahldruckern oder der Medizin [11–17]. Entscheidend für den wirtschaftlichen Einsatz des Lasers ist in allen diesen Fällen eine auf die jeweiligen Anforderungen des Produktes abgestimmte Bearbeitungsstrategie. Beim Laserbohren muss dabei zunächst ein guter Kompromiss zwischen Produktivität und Qualität gefunden werden. Diese beiden Grundanforderungen stehen sich oft gegensätzlich gegenüber, da zur Qualitätssteigerung meist die Abtragsgeschwindigkeit reduziert werden muss. Wie in Bild 1.1 schematisch dargestellt wird, können dabei verschiedene Verfahren zum Einsatz kommen. Normalerweise werden beim Laserbohren gepulste Laserquellen eingesetzt, um durch die entsprechende Pulsüberhöhung die notwendigen hohen Leistungsdichten von über 10<sup>7</sup> W/cm<sup>2</sup> zu erzeugen. Beim Einzelpulsbohren ist die Pulsdauer so lang, dass innerhalb eines Pulses Materialstärken von einigen Millimetern Dicke durchdrungen werden können. Oft werden hierzu mit Blitzlampen gepumpte Festkörperlaser



Bild 1.1: Übersicht über die wichtigsten Laserbohrverfahren. Durch die Reduzierung der Pulsdauer und des Abtragsvolumens pro Puls kann bei den repetierenden Verfahren eine höhere Präzision erreicht werden. Die Strahlbewegung führt zu einer weiteren Verbesserung der Formtreue und des Materialaustriebs. Ref. [31]

verwendet, die Pulsdauern in Bereich von 10 µs-1 ms (lange Pulsdauern) erzeugen. Bei diesem Verfahren wird jedoch vor allem bei Metallen ein hoher Anteil des Materials in Form von Schmelze ausgetrieben, was meist zu qualitätsmindernden Rückständen an den Bohrungswänden und der Oberfläche führt. Eine Qualitätssteigerung kann durch die Verkürzung der Pulsdauer und damit der Schmelze erzeugenden Einwirkdauer erreicht werden. Dabei sinkt jedoch gleichzeitig das Abtragsvolumen je Laserpuls, so dass beim Perkussionsbohren mehrere Pulse auf die selbe Stelle gerichtet werden müssen. Typischerweise kommen hier bislang durch Güteschaltung gepulste Festkörperlaser (z. B. Nd:YAG) oder beim flächigeren Abtragen auch Excimer-Laser mit Pulsdauern im Bereich von 1 ns-1us (kurze Pulsdauern) und Repetitionsraten bis zu einigen Kilohertz zum Einsatz. Um statistische Geometrieschwankungen des thermischen Abtragsprozesses ausgleichen und somit eine höhere Formtreue der Bohrungen erreichen zu können, wird beim Trepanieren und Wendelbohren ein stärker fokussierter Laserstrahl auf einer Kreisbahn geführt. Beim Trepanieren wird dabei zunächst zur Verbesserung des Materialaustriebs eine kleine Durchgangsbohrung erzeugt und anschließend das Loch in einem Umlauf ausgeschnitten. Auf diese Weise entstehen häufig deutlich sichtbare Einstichspuren, die beim Wendelbohren dadurch vermieden werden, dass sich die Abtragsfront kontiniuierlich, über mehrere Laserumläufe hinweg, in die Tiefe bewegt.

Die Reduzierung der Pulsdauern auf Werte unter 10 ps (ultrakurze Pulsdauern) in Verbindung mit hohen Repetitionsraten von über 10 kHz verspricht eine weitere Steigerung der Qualität bei gleichzeitig hoher Wirtschaftlichkeit, so dass das Bohren mit solchen ultrakurzen Laserpulsen in zunehmendem Maß Gegenstand der aktuellen Forschung ist [18, 19, 32–34]. Dabei sind sowohl die Entwicklung industriell tauglicher Laser als auch einer geeigneten Fertigungsstrategie gefragt. Infolge der höheren Leistungsdichten solcher Laser steigen jedoch die Prozesstemperaturen und damit die Dynamik und die Anzahl der physikalisch relevanten Teilprozesse. Die Optimierung des Bohrergebnisses erfordert daher die Berücksichtigung einer Vielzahl von Einflussgrößen, so dass sie durch ein grundlegendes Prozessverständnis erheblich erleichtert werden kann. Letzteres kann aber, vor allem wegen der kurzen Zeitskalen und geringen räumlichen Abmessungen, nur in begrenztem Umfang experimentell gewonnen werden.

Der Modellierung und Simulation kommt aus diesem Grund in verstärktem Maß die Aufgabe zu, Einblicke in die experimentell nicht oder nur schwer zugänglichen Abläufe zu geben. Die gegenüber den Vorgängen beim Abtragen mit längeren Laserpulsen in ihrer Bedeutung stark veränderten physikalischen Einflussfaktoren erfordern eine spezielle Modellbildung für kurze und insbesondere ultrakurze Pulse. Ähnlich wie der experimentelle Prozess selbst befindet sich auch die Modellierung solcher Bohrungen derzeit in einem Forschungsstadium. Besonders schwierig gestalten sich hierbei die Einbeziehung der hochdynamischen gegenseitigen Wechselwirkung der einzelnen Vorgänge im Festkörper, der Schmelze sowie im Dampf bzw. Plasma. Diese Arbeit soll, ausgehend von Erkenntnissen über den Ablauf und die Bedeutung der Einflussfaktoren, Wege für eine ganzheitliche theoretische Beschreibung aufzeigen. Aufgrund der unter diesen extremen Bearbeitungsbedingungen experimentell nur unzureichend bekannten Materialeigenschaften steht dabei nicht die genaue quantitative Nachbildung des Prozesses sondern eine qualitative Modellierung der wesentlichen Grundzüge im Vordergrund. Diese kann dann als Grundlage für eine gezieltere Auswahl der vielen experimentellen Prozessparameter und somit letztendlich zur Entwicklung einer hinsichtlich Qualität und Produktivität verbesserten Bohrstrategie dienen.

#### 1.2 Kurzbeschreibung des Bohrprozesses

Das Laserbohren von Metallen ist in erster Linie ein thermischer Fertigungsprozess und ist, wie in Bild 1.2 und Bild 1.3 dargestellt, durch eine Vielzahl in kürzester Zeit ablaufender physikalischer Vorgänge gekennzeichnet. Die Laserstrahlung wird dabei zunächst vom Werkstoff absorbiert, der sich daraufhin erwärmt, aufschmilzt und schließlich verdampft. Insbesondere bei kurzgepulsten Strahlquellen entstehen dabei kurzzeitig extrem hohe Oberflächentemperaturen von einigen tausend Kelvin. Die energiereichen Atome



**Bild 1.2:** Darstellung der elementaren Prozesse beim Laserbohren. Die Laserstrahlung wird vom Werkstück absorbiert, das sich daraufhin erwärmt bis es zur Verdampfung kommt. Der Prozessdruck treibt den Dampf und die Schmelze aus dem Bohrloch aus, so dass ein Abtrag entsteht. Ein Teil der Strahlung kann dann auch vom Materialdampf bzw. Plasma absorbiert werden.



**Bild 1.3:** Schematische Darstellung des Laserbohrprozesses. Die Absorption der Laserstrahlung führt zu einer Materialaufschmelzung und -verdampfung. Dabei entstehen Schockwellen in der Umgebungsatmosphäre und dem Werkstück. Der Dampfdruck treibt zudem die Schmelze an, die sich am Bohrungseintritt in Form eines Grates ablagert oder sich dort als Tröpfchen ablösen kann.

lösen sich daraufhin vom Festkörper, so dass ein Volumenabtrag entsteht. Der Phasenübergang vom kondensierten in den dampfförmigen Zustand führt zu einer starken Volumenexpansion des Materials und damit zu einer schnellen Ausbreitung der Dampfwolke. Infolge der hohen Verdampfungsraten entstehen dabei Schockwellen mit Ausbreitungsgeschwindigkeiten von bis zu einigen 10 km/s [35–37]. Die Expansion führt schlussendlich zu einer Abkühlung und Kondensation des Metalldampfes.

Das Abdampfen der Atome von der Oberfläche erzeugt gleichzeitig eine Rückstoßkraft auf die in der Schmelze zurückbleibenden Atome. Dieser Dampfdruck kann bis zu einigen Kilobar [37,38] betragen und beschleunigt die Schmelze zum Rand der Bohrung hin. Insbesondere bei längeren Laserpulsen mit höherem Schmelzaufkommen entsteht durch diese Verdrängung der Schmelze ein zusätzlicher Materialabtrag, der energetisch sogar günstiger ist als die Verdampfung bei höheren Temperaturen. Am Bohrungsrand erstarrt die Schmelze schließlich unter Bildung eines Grates. Bei stärkerer Beschleunigung kann sich dort jedoch auch ein Teil der zähflüssigen Phase in Form von Tropfen ablösen und aus der Wechselwirkungszone geschleudert werden. Hochgeschwindigkeitsaufnahmen zeigen, dass der Schmelzaustrieb bei kurzen Laserpulsen zeitlich verzögert und über einen die Pulslänge um ein Vielfaches überschreitenden Zeitraum erfolgt [39–41]. Die Geschwindigkeit der beobachteten Tropfen beträgt dabei typischerweise mindestens einige m/s [41–45]. Prinzipiell führt die Verkürzung der Pulsdauer zu einer Reduzierung des Schmelzaufkommens und bietet damit eine Möglichkeit zur Steigerung der Qualität [18,19]. Dennoch zeigt sich, dass selbst bei Verwendung von ultrakurzen Pulsen von 100 fs Dauer oft noch Schmelzablagerungen entstehen, die nur durch eine optimierte Strategie vermieden werden können [20, 46].

Der Ablationsdruck wird von der Schmelze auch auf den darunter liegenden Festkörper übertragen und führt dort zur Ausbreitung von Schallwellen [47]. Deren Amplituden können dabei so groß sein, dass der Druck die plastische Zerstörschwelle überschreitet. Vor allem bei spröden Materialien kann dies auch zur mechanischen Schädigung des Werkstücks, wie Abplatzungen oder zurückbleibende Verspannungen, führen [46].

Vor allem bei längeren Laserpulsen ist eine Wechselwirkung zwischen dem einfallenden Strahl und der ablatierten Materie möglich. Der heiße Dampf kann besonders nahe der Schockfront so hohe Temperaturen erreichen, dass die durch thermische Ionisierung erzeugten freien Elektronen das Laserlicht absorbieren. Dadurch kommt es zu einer weiteren Aufheizung des Dampfes und zu einer zusätzlichen Steigerung der Absorption. Als Ergebnis dieser lokalen Energieeinkopplung an der Schockfront können dann so genannte LSD-Wellen (engl.: laser supported detonation) beobachtet werden [36,48–50]. Diese breiten sich im Gegensatz zur hemisphärischen Expansion des Ablationsdampfs vor allem in Richtung der Strahlquelle aus. Lokal treten dabei Temperaturen von mehreren 10000 K bis hin zu einigen 100000 K auf [37, 49, 51-53]. Infolge der hohen Elektronendichten in solchen Plasmen sinkt der Brechungsindex, so dass neben der Absorption auch eine starke Beeinflussung der Strahlpropagation entstehen kann. Die lokalen Veränderungen der optischen Eigenschaften des Dampfes können diagnostisch mit interferometrischen oder fotografischen Methoden und Transmissionsmessungen erfasst werden [22, 35, 54–56]. Solche Untersuchungen zeigen, dass selbst bei ultrakurzen Pulsen ein erheblicher Teil der Strahlungsenergie das Werkstück nicht erreicht, obwohl dem ablatierten Material dann kaum Zeit zur Ausbreitung bleibt. Ursache hierfür ist vermutlich die schnelle Entstehung eines Plasmas infolge der niedrigen Ionisierungsschwellen von kleinen Partikeln in der Gasphase, die von vorangegangenen Laserpulsen ablatiert wurden und teilweise noch Sekunden nach dem Laserpuls in der Wechselwirkungszone verbleiben können [57, 58]. Bei noch höheren Energiedichten kann es zudem zu einem Luftdurchbruch kommen, bei dem die Umgebungsatmosphäre ionisiert wird. Gleichzeitig steigt dann die Bedeutung von nichtlinearen optischen Effekten, so dass z.B. Frequenzkonversion beobachtet wird [22, 23]. Die gegenseitige Beeinflussung von Laserpropagation und Materialdampf spiegelt sich letztendlich auch im Bearbeitungsergebnis wieder. Wie Bild 1.4 zeigt, kann die starke Streuung im Plasma zu einer erheblichen Verbreiterung der Bohrungen führen. Eine ähnliche Aufweitung der Kapillare kann auch



**Bild 1.4:** Fortschreiten einer Bohrung in einem 500 µm dicken Stahlblech mit zunehmender Zahl der Laserpulse ( $\bar{H} = 250 \text{ J/cm}^2$ ,  $\tau_{\text{H}} = 125 \text{ fs}$ ,  $d_{\text{f}} = 18 \text{ µm}$ ,  $f_{\text{p}} = 1 \text{ kHz}$ ). Während sich anfangs vor allem das Strahlprofil abbildet, dominiert mit zunehmender Bohrzeit eine ringförmige, vermutlich durch Streuung verursachte, Struktur mit größerem Durchmesser. Ref. [22, 23].

dadurch entstehen, dass der abströmende heiße Materialdampf die Bohrungswände abträgt [31, 55, 58]. Neben dem primären Bohrwerkzeug, dem Laser selbst, tritt dann also das Plasma als ein sekundäres Werkzeug auf.

Insgesamt zeichnet sich der Laserbohrprozess durch eine komplizierte Wechselwirkung von Energieeinkopplung, Materialeigenschaften und Schmelz- bzw. Gasdynamik aus. Während des Fortschreitens der Ablationsfront mit zunehmender Bohrdauer verändern sich diese Eigenschaften dynamisch und damit letztendlich auch das Abtragsergebnis. Die experimentell ermittelten Abtragsraten in Bild 1.5 verdeutlichen dabei die Existenz verschiedener Bohrphasen. Das Hirschegg-Modell deutet diese Prozessabschnitte als Folge der geometrischen Veränderungen der Oberflächentopografie [31, 60]. Anfangs



**Bild 1.5:** Gemessene Abhängigkeit des Pulsabtrags von der Bohrtiefe bei CVD-Diamant ( $\bar{H} = 10 \text{ J/cm}^2$ ,  $\tau_{\text{H}} = 220 \text{ ps}$ ) und Stahl ( $\bar{H} = 15 \text{ J/cm}^2$ ,  $\tau_{\text{H}} = 300 \text{ ps}$ ). Dem anfänglich deutlichen Abfall der Abtragsrate um 1–2 Größenordnungen folgt eine konstante Bohrphase bis zum Bohrstopp. Ref. [55,59] trifft der Laser auf eine ebene Oberfläche. Während dieser planaren Ablation werden die höchsten Abtragsraten erzielt. Anschließend fällt die Abtragsrate mit zunehmender Bohrtiefe um bis zu 1-2 Größenordnungen ab. Diese Reduktion entsteht durch die veränderte Energieeinkopplung, Wärmeleitung oder Austriebsdynamik infolge der geometrischen Vertiefung [57]. Das unterschiedliche Abströmverhalten des Metalldampfs hat dabei einen erheblichen Einfluss auf die Plasmaentstehung. Deren Bedeutung zeigt sich besonders deutlich in der dritten Bohrphase, in der die Abtragsrate nahezu konstant bleibt. Hier wirkt das Plasma vermutlich als Puffer, der die Energieeinkopplung ins Werkstück regelt. Eine Erniedrigung des Materialabtrags, beispielsweise infolge von höheren Wärmeleitungs- oder Einkopplungsverlusten in der Kapillare, würde demnach zu einer geringeren Dampfdichte führen und so schließlich durch eine höhere Transmission in der Gasphase kompensiert werden. Erst wenn in der vierten Bohrphase die Abtragsschwelle erreicht wird und der Dampf infolge seiner geringen Dichte und Temperatur nahezu transparent ist, kommt es zu einem abrupten Bohrstopp. In einzelnen Fällen kann es vorkommen, dass bei langer Nachbohrzeit durch langsame Geometrieänderungen der Abtragsprozess zu einem späteren Zeitpunkt fortgesetzt wird bevor er endgültig zum Stillstand kommt [26].

#### 1.3 Modellierung des Bohrprozesses

Die Modellierung des Prozesses ist fast so alt wie das Bohren selbst. Am Anfang stand dabei eine einfache Abschätzung der Bilanz aus eingekoppelter Energie und abgetragenem Volumen [61]. Diese Betrachtung wurde dann durch verschiedene analytische, teilweise mehrdimensionale und transiente Betrachtungen der Wärmeleitung ergänzt [38,62,63]. Viele der aktuelleren Modelle sind eine numerische Weiterentwicklung dieser Ansätze unter Berücksichtigung weiterer Einflussfaktoren wie z. B. von temperaturabhängigen oder anistropen Materialeigenschaften, Strahlgeometrie und -bewegung sowie Vielfachreflexionen [64–68]. In einigen Fällen wurden dabei zur Vereinfachung des Problems auch strenge Annahmen, beispielsweise hinsichtlich der Geometrie des Bohrlochs, verwendet [69].

Die besondere Bedeutung der Energieübertragung von Elektronen auf das Kristallgitter bei ultrakurzen Laserpulsen wurde ebenfalls schon früh erkannt [38, 70]. Das Interesse an den daraus resultierenden Zwei-Temperatur-Modellen ist jedoch vor allem in den 90er Jahren mit zunehmender Verfügbarkeit von robusten ultrakurzgepulsten Laserquellen gestiegen. Die meisten Untersuchungen konzentrieren sich vor allem auf die Besonderheiten der Materialerwärmung selbst und weniger auf das Abtragen [18,71–73]. Nur vereinzelt wurde bisher auch der Materialabtrag durch Laser mit ultrakurzer Pulsdauer untersucht [74]. Dies gilt insbesondere für die Anregung mit Pulsdauern unterhalb von 100 fs, bei denen eine Temperaturdefinition anfangs nicht möglich ist [75, 76]. Dieser Fall ist mangels industrietauglicher Strahlquellen für dieses Regime allerdings eher von physikalischem Interesse.

Gegenüber den zahlreichen Wärmeleitungsmodellen sind theoretische Untersuchungen zur Schmelzdynamik eher selten. Dies beruht wohl vor allem auf der numerischen Schwierigkeit, die hohe Prozessdynamik stabil abbilden zu können, zumal der Schmelzfluss dabei prinzipiell mehrdimensional beschrieben werden muss. Letzteres erschwert vor allem die analytische Betrachtung, die hier nur durch sehr einschränkende Geometrieannahmen wie z. B. einer zylinderförmigen, stationären Schmelzdynamik möglich ist [77]. Werden zusätzlich Vereinfachungen hinsichtlich der Materialerwärmung und Schmelzbeschleunigung eingeführt, so kann bei mäßiger Prozessdynamik auch die zeitliche Entwicklung des Austriebs analytisch untersucht werden [44]. In den meisten Fällen werden zur Simulation der Schmelzdynamik jedoch numerische Verfahren benötigt, auch wenn dabei nach wie vor oft vereinfachende geometrische Näherungen verwendet werden, um die Dimensionalität des Problems zu reduzieren [78-82]. Nahezu alle diese Untersuchungen konzentrieren sich vor allem auf den Schmelzfluss bei Pulsdauern oberhalb einiger Mikrosekunden bei denen durch das hohe Schmelzaufkommen diese Form des Materialaustriebs von besonderem Interesse für den Bearbeitungsprozess ist. Da mit abnehmender Pulsdauer die Prozessdynamik und damit die numerischen Schwierigkeiten zunehmen, lassen sich diese Modelle kaum auf den Bereich kurzgepulster Strahlquellen übertragen. Bei niedrigen Energiedichten wurde jedoch auch für Nanosekundenpulse der Schmelzaustrieb bereits erfolgreich modelliert [40].

Für die gasdynamische Beschreibung des Materialdampfs gilt zunächst Ähnliches wie für die Schmelze. Auch hier erschweren die hohe Dynamik und die mehrdimensionale Ausbreitung die theoretische Modellierung erheblich. Anders als bei der Schmelze handelt es sich hierbei jedoch um eine stark kompressible Strömung mit Schockwellen, deren Beschreibung wieder andere numerische Ansätze erfordert. Das Interesse an der Simulation der Dampfausbreitung und der Plasmaentstehung ist aufgrund der hohen Bedeutung für die Energieeinkopplung und der experimentellen Zugänglichkeit mittels optischer Diagnostik groß. Um die vergleichsweise aufwändige Modellierung der Gasdynamik zu vermeiden, wird häufig die Absorption im Dampf nur phänomenologisch durch Annahmen zum Absorptionsindex in Verbindung mit der Höhe der Dampfsäule über dem Werkstück berücksichtigt [83–85]. Analytisch lässt sich die Dampfausbreitung nur in stark vereinfachten Fällen wie der adiabatischen Expansion in Vakuum infolge einer explosionsartigen Energiefreisetzung an der Oberfläche oder getrieben von einer konstanten Abdampfrate lösen [86–88]. Die Berücksichtigung von transienten Abdampfraten, der Wechselwirkung mit unterschiedlichen Umgebungsatmosphären oder der Laserabsorption im Dampf erfordert dagegen eine numerische Simulation [89–93]. In diesen Modellen stellt die Abdampfkinetik meist nur eine Randbedingung für die Gasdynamik dar, so dass hiermit eine Untersuchung der gegenseitigen Beeinflussung von Energieeinkopplung, Verdampfung und Dampfausbreitung nicht möglich ist.

In den wenigsten Fällen wurde bisher in der Literatur der Versuch unternommen alle wichtigen Prozesse simultan zu modellieren. Ursache hierfür ist, dass meist aufgrund der stark unterschiedlichen Eigenschaften von Festkörper, Schmelze und Dampf für jede dieser Phasen jeweils eigene, zunächst voneinander unabhängige Modelle benötigt werden, um z. B. die numerisch anspruchsvolle Beschreibung der hohen Schmelz- und Gasdynamik überhaupt erst zu ermöglichen. Die nachträgliche Kopplung der Einzelmodelle unter Berücksichtigung der gegenseitigen Beeinflussung gestaltet sich dann vergleichsweise schwierig. Im eindimensionalen Fall wurde ein derartiges Modell ohne Schmelzaustrieb aber unter Berücksichtigung der gegenseitigen Beeinflussung von Abtrag und Dampf über die Absorption und Wärmeleitung im Plasma demonstriert [94]. Eine ganzheitliche, mehrdimensionale Betrachtung in Verbindung mit weiteren Einflussfaktoren, wie z. B. der Schmelzdynamik, erscheint auf diesem Weg jedoch relativ aussichtslos. Vielversprechender sind hierfür hydrodynamische Modelle, die alle Materialphasen mit dem gleichen numerischen Algorithmus behandeln [27, 28, 95, 96]. Dadurch entfällt zwar das Problem der Kopplung, gleichzeitig steigen durch die stark variierenden Materialeigenschaften jedoch die Anforderungen an die Stabilität der Numerik.

Im Gegensatz zu den bisher erwähnten makroskopischen Ansätzen versucht die Molekulardynamik eine mikroskopische Beschreibung der Bewegung der einzelnen Atome [97–103]. Alle physikalischen Wechselwirkungskräfte werden hierbei ausschließlich durch ein interatomares, abstandsabhängiges Potenzial berücksichtigt. Dieses Vorgehen ermöglicht ohne weitere Annahmen zwar eine genaue Analyse der Abdampfkinetik, stellt jedoch durch den damit verbundenen hohen Rechenaufwand infolge der großen Teilchenzahl auch das Hauptproblem dar. Bei den heutigen Rechnerkapazitäten bleiben diese Verfahren daher einerseits auf räumliche Abmessungen von typischerweise wenigen Nanometern und auf kurze Wechselwirkungszeiten unter 100 ps beschränkt. Andererseits müssen gleichzeitig die Wechselwirkungspotentiale meist derart vereinfacht werden, dass sie häufig bestenfalls die wichtigsten Materialeigenschaften wie die Kristallstruktur wiedergeben. Da durch den klassischen Ansatz nur die Bewegung der Ionen erfasst werden kann, bleibt zudem die Einbeziehung der elektronischen Anregung bei ultrakurzen Pulsdauern ein zu lösendes Problem. Aus diesen Gründen kann die molekulardynamische Simulation mittelfristig die makroskopische Abtragsmodellierung nicht ersetzen. Sie liefert jedoch wichtige Einblicke in mikroskopische Prozesse, anhand derer die Annahmen der thermodynamischen Modelle überprüft und verbessert werden können.

#### 1.4 Konzeption der Arbeit

Ziel dieser Arbeit ist zunächst eine möglichst umfassende Identifizierung von qualitätsund effizienzbestimmenden Einflussfaktoren beim Laserbohren mit Pulsdauern unterhalb von 100 ns. Die daraus gewonnenen Erkenntnisse sollen vor allem vor dem Hintergrund einer zukünftigen ganzheitlichen Modellierung des Prozesses stehen und erste Ansatzmöglichkeiten hierfür aufzeigen. Der Schwerpunkt liegt daher eher auf dem qualitativen Verständnis der grundlegenden Mechanismen und weniger auf einer quantitativen prozessnahen Analyse.

Aus diesen Gründen konzentriert sich die Arbeit auf den grundlegenden Fall des Perkussionsbohrens von Metallen auch wenn, wie einleitend erwähnt, inzwischen vor allem andere Bohrstrategien und auch keramische Werkstoffe in der Mikromaterialbearbeitung zum Einsatz kommen. In den meisten Fällen kann erwartet werden, dass die wesentlichen Erkenntnisse zu den Mechanismen auch auf diese Prozesse übertragen werden können. An einigen wichtigen Stellen wird jedoch auch der Einfluss der Strahlbewegung und die Besonderheiten von dielektrischen Materialien angesprochen werden. Die Berechnungen werden normalerweise am Beispiel von Aluminium erörtert, da hierfür die thermophysikalischen Eigenschaften vergleichsweise gut bekannt sind.

Im Vordergrund der Untersuchungen stehen vor allem die Ergebnisse selbst und weniger die mathematischen Grundlagen der Modellierung. Daher finden sich zwar einige detailliertere Beschreibungen im Anhang, generell ist jedoch auf die genaue Beschreibung der numerischen Modelle aus Platzgründen verzichtet worden. Es handelt sich dabei vorwiegend um Ansätze, die in der Fachliteratur bereits mehr oder weniger ausführlich beschrieben wurden, so dass der interessierte Leser auf die entsprechenden Zitate verwiesen sei. Im einzelnen sind dies die folgenden Programme:

QEOS Hauptaufgabe des QEOS-Programms (*engl.: quotidian equation of state*) ist die numerische Lösung der Elektronenzustandsgleichung nach dem Thomas-Fermi-Modell, die zusammen mit einer empirischen Zustandsgleichung für die Ionen die Grundlage für die in Kapitel 2 vorgestellten Materialeigenschaften bildet [21, 104].

AXISFDTD	Dieses selbstentwickelte Programm ist ein zweidimensionaler, rotati- onssymmetrischer Lösungsalgorithmus für die inhomogenen Maxwell-
	Gleichungen basierend auf dem FDTD-Verfahren (engl.: finite-
	differences time-domain) [105, 106]. Eine Kurzbeschreibung der Me-
	thodik kann in Anhang C nachgelesen werden.
Trans3d	Ein dreidimensionales Abtragsmodell mit adaptivem Rechennetz ba-
	sierend auf der Wärmeleitungsgleichung. Es ermöglicht die Berück-
	sichtigung von temperaturabhängigen Materialeigenschaften, verschie-
	denen Strahlprofilen und -bewegungen sowie Vielfachreflexionen [66,
	67, 107].
FIDAP	Eine kommerzielle FEM-Software (engl.: finite-element method) von
	Fluent Inc., mit der in dieser Arbeit der Schmelzaustrieb beim Bohren
	modelliert wurde.
PARCIPHAL	Diese kommerziell erhältliche Software basiert auf dem CIP-Verfahren
	(engl.: cubic interpolated pseudoparticle) zur Berechnung hydrodyna-
	mischer Strömungen. Es ermöglicht die Simulation von Vielphasen-
	problemen durch Verwendung von Zustandsgleichungen [27, 28].

Der Aufbau der Arbeit orientiert sich dabei im Wesentlichen an dem in Bild 1.2 skizzierten Ablauf des Bohrprozesses. Jeder der zunächst zeitlich aufeinander folgenden Teilprozesse Energieeinkopplung, Erwärmung, Verdampfung und Austrieb wird in einem eigenen Kapitel untersucht. Durch die gegenseitige Beeinflussung der einzelnen Mechanismen in diesem Kreisprozess, wie z. B. Materialaustrieb und Energieeinbringung, können die einzelnen Abläufe dabei nicht immer streng getrennt werden, so dass an einzelnen Stellen etwas vorgegriffen werden muss. Grundlage für die Modellierung bildet jedoch eine gute Kenntnis der Materialeigenschaften, die im Fall des Laserbohrens zumindest den weiten Temperaturbereich von dem Umgebungswert bis etwa 100 000 K umfassen sollte. Da Materialgrößen experimentell meist nur bis maximal zur Siedetemperatur oder gelegentlich auch für Plasmen mit noch höheren Temperaturen vorliegen, soll den prozesspezifischen Kapiteln zunächst ein weiteres vorangestellt werden, mit Schwerpunkt auf theoretischen Erkenntnissen zu den Materialeigenschaften bei derart hohen Temperaturen.

## 2 Materialeigenschaften bei hohen Temperaturen

Da der Werkstoff beim Laserbohren in einer Vielzahl von Zuständen vorliegen kann, angefangen vom Festkörper über die Schmelze bis hin zum Dampf und Plasma, ist für die Modellierung auch eine gute Kenntnis der Materialeigenschaften in einem entsprechend weiten Temperaturbereich notwendig. Leider ist deren experimentelle Bestimmung kaum möglich, da solche Zustände insbesondere jenseits der Siedetemperatur nur schwer kontrolliert erzeugt werden können. Die wenigen Messungen sind meist durch das Auftreten von oft nur schwer abschätzbaren zusätzlichen Effekten mit relativ großen Unsicherheiten verbunden. Ein deutliches Beispiel hierfür sind die um mehrere 1000 K voneinander abweichenden Angaben für kritische Temperaturen bei Metallen [108].

Aus diesem Grund werden bei der Modellierung meist vereinfachende Annahmen getroffen und z. B. temperaturunahängige Werte verwendet wie sie in Anhang A für einige typische Werkstoffe zusammengefasst sind. Dennoch ist es wichtig, sich bewusst zu machen, welche Fehler damit verbunden sind. Außerdem sind zumindest hydrodynamische Modelle, die auf einer kontinuierlichen Beschreibung der Materialzustände über Phasengrenzen hinweg basieren, auf temperaturabhängige Kenngrößen angewiesen. Wenn solche Werte experimentell nicht in ausreichendem Maß vorhanden sind, können vereinfachte theoretische Zustandsgleichungen helfen, die grundlegenden Tendenzen zu verdeutlichen. Die wichtigsten Ergebnisse eines dieser Modelle sollen in diesem Kapitel kurz vorgestellt werden. Es zeichnet sich einerseits durch seine Einfachheit aus und ist auf der anderen Seite dennoch in der Lage, die wichtigsten bekannten Grenzfälle wiederzugeben. Auf eine detaillierte Beschreibung dieses QEOS-Modells (engl.: quotidian equation of state) soll hier jedoch verzichtet werden, da es bereits in der Literatur ausgiebig vorgestellt wurde [21, 104]. Eine Kurzzusammenfassung seiner wichtigsten Grundlagen findet sich in Anhang B. Da sich Aluminium durch seine einfache elektronische Atomstruktur besonders gut durch dieses Modell beschreiben lässt, sollen die wesentlichen Merkmale der Zustandsgleichung anhand dieses Elements diskutiert werden.



**Bild 2.1:** Aus der QEOS-Zustandsgleichung berechneter Druck für Aluminium. Die Kurven entsprechen den Isothermen für 1500 K, 2000 K, 2500 K, 2800 K, 4000 K, 5000 K, 7000 K, 9400 K, 15 000 K, 30 000 K, 50 000 K und 100 000 K, die graue Fläche stellt das Zweiphasengebiet aus Schmelze und Dampf dar. Die Siedetemperatur beträgt  $T_{\rm b} = 2765$  K, der kritische Punkt wird bei  $T_{\rm c} = 9420$  K erreicht.

#### 2.1 Thermophysikalische Eigenschaften

Das QEOS-Modell berechnet im Wesentlichen die freien Enthalpie *F* des Werkstoffes, die sich additiv aus den Komponenten der Elektronen, Ionen und einer Bindungskorrektur zusammensetzt. Hieraus lassen sich verschiedene thermophysikalische Materialgrößen ableiten. In Bild 2.1 ist die Abhängigkeit des Gesamtdrucks von der Dichte für verschiedene Isothermen für Aluminium dargestellt. Deutlich ist der grau hinterlegte Zweiphasenbereich aus Schmelze und Dampf zu erkennen. Zu hohen Dichten ist er von der flüssigen Phase und dem Festkörper begrenzt, bei dem für eine kleine Dichteänderung relativ große Druckänderungen notwendig sind. Bei hohen Temperaturen und geringen Dichten zeigt das Modell zwischen Druck, Dichte und Temperatur den linearen Zusammenhang der idealen Gasgleichung. Bei der Siedetemperatur von  $T_b = 2765$  K beträgt der Dampfdruck gerade 1 bar, die kritische Temperatur  $T_c$  liegt bei 9420 K und damit etwas über den neuesten Literaturangaben von bis zu 9000 K [108, 109].

Eine besondere Stärke des Modells ist die getrennte Betrachtung von Elektronen und Kristallgitter, wie sie zur Beschreibung von Relaxationsvorgängen wie beim Zwei-Temperatur-Modell in Kapitel 4.2 benötigt wird. Dies kommt z. B. zum Ausdruck wenn wie in Bild 2.2 die spezifische Wärmekapazität  $c_p$  bei einem konstantem Druck von 1 bar betrachtet wird. Unterhalb der Siedetemperatur von rund 2800 K wird sie vom Anteil der Ionen dominiert während im Dampf der elektronische Anteil überwiegt. Letzterer



**Bild 2.2:** Aus der QEOS-Zustandsgleichung berechnete spezifische Wärmekapazität bei 1 bar für Aluminium. Die gestrichelten bzw. strichpunktierten Kurven entsprechen den getrennten Beiträgen von Elektronen und Gitter, die punktierte Linie einer linearen Annäherung der elektronischen Komponente in der kondensierten Phase durch  $c_{p,e} = \gamma_s T$ mit  $\gamma_s = 0.047 \text{ J kg}^{-1} \text{K}^{-2}$ . Die experimentellen Werte (offene Kreise) wurden der Referenz [110] entnommen.

steigt dabei näherungsweise linear mit der Temperatur an, so dass für den Festkörper mit  $\gamma_s = 0.047 \, J \, kg^{-1} K^{-2}$  sehr gut der Zusammenhang aus der Literatur wiedergegeben wird [111]. Die sprunghafte Änderung bei der Verdampfung ist auf die starke Dichteänderung bei konstantem Druck zurückzuführen. Die Wärmekapazität im kondensierten Zustand entspricht dabei weitgehend den Literaturwerten auch wenn der Abfall beim Aufschmelzen erheblich überschätzt wird.

Das QEOS-Modell ermöglicht auch eine Abschätzung des Ionisierungsgrades, so dass ein Vergleich mit Berechnungen der Elektronen- und Ionenkonzentrationen aus dem Saha-Modell interessant ist. Letzteres basiert auf der Annahme eines lokalen thermischen Gleichgewichts und wird kurz in Anhang B.2 skizziert. In Bild 2.3 wurden die



**Bild 2.3:** Vergleich der aus der Saha-Gleichung bzw. dem QEOS-Modell berechneten Gesamtteilchenund Elektronenkonzentrationen. Für das Saha-Modell wurden zusätzlich auch die Konzentrationen der unterschiedlich stark ionisierten Atome eingezeichnet. In der Gasphase sind die ermittelten Gesamtdichten und bei Temperaturen oberhalb von ca. 10000 K auch die Elektronendichten der beiden Ansätze praktisch identisch. derart ermittelten Teilchenkonzentrationen denen aus dem QEOS-Modell gegenübergestellt. Bei niedrigen Temperaturen zeigen sich naturgemäß zunächst deutliche Abweichungen zwischen den beiden Modellen. Während das QEOS-Modell unterhalb der Siedetemperatur  $T_{\rm b} \approx 2800 \,{\rm K}$  mit  $1.8 \times 10^{23} \,{\rm cm}^{-3}$  etwa die Elektronendichte des Leitungsbands im Festkörper liefert, ergibt hier die Saha-Gleichung die verschwindend geringe Dichte n<sub>e</sub> freier Elektronen eines nichtionisierten Gases. Bis etwa 10000 K liegt die Konzentration ne der Zustandsgleichung noch deutlich über der des Saha-Modells, da nur in letzterem die atomaren Energiezustände und damit die quantisierten Energieschwellen für die Ionisierung berücksichtigt werden. Aus diesem Grund kann das QEOS-Modell auch nur die Gesamtkonzentrationen von Elektronen und Ionen ne bzw.  $n_i$  angeben, nicht jedoch die Verteilung auf die einzelnen Ionisierungszustände  $n_i^{(Z_i)}$ . Bei höheren Temperaturen stimmen die Gesamtwerte jedoch sehr gut mit den Vorhersagen der Saha-Gleichung überein, da beide Modelle in diesem Bereich die Boltzmann-Statistik für nichtentartete Teilchen wiedergeben. Der Abfall der Gesamtteilchenkonzentration  $n_t$  mit der Temperatur ist dabei eine Konsequenz aus der idealen Gasgleichung bei konstantem Druck.

#### 2.2 Transporteigenschaften

Als Transporteigenschaften werden die Materialkennwerte bezeichnet, die auf die mikroskopische Verschiebung von Teilchen zurückgeführt werden können. Dies sind zum Beispiel die thermische und elektrische Leitfähigkeit sowie die Viskosität. Diese werden vom ursprünglichen QEOS-Modell nicht erfasst, können jedoch durch einfache Erweiterungen berücksichtigt werden [112–114].

Grundlage für die Erweiterung ist die Kenntnis der mittleren Stoßfrequenzen, aus denen sich anhand der Boltzmannschen Transportgleichung die dynamischen Größen abschätzen lassen. In Anhang B.3 werden einige Grundbeziehungen zur Berechnung der mittleren Stoßzeiten der Elektronen und Ionen untereinander,  $\tau_{ee}$  bzw.  $\tau_{ii}$ , sowie miteinander,  $\tau_{ei}$ , diskutiert. Hierbei muss beachtet werden, dass aufgrund der großen Vereinfachungen bei der Berechnung dieser Zeiten alle damit verbundenen Kennwerte eine erhebliche Unsicherheit aufweisen und nur als Abschätzung verstanden werden sollten. Die Stoßzeiten sind vor allem von der Teilchenkonzentration abhängig, also von der Materialdichte und dem Ionisierungsgrad, und liegen beim Festkörper etwa in der Größenordnung einiger Femtosekunden. Während der Energieübertrag von Elektron zu Elektron bzw. Ion zu Ion innerhalb weniger solcher Stöße erfolgt, werden für die Thermalisierung von Elektronen und Ionen untereinander wesentlich mehr Stöße benötigt. Ursache hierfür ist der



**Bild 2.4:** Temperaturabhängigkeit der Elektron-Phonon-Relaxationszeiten  $\tau_{ep}$  für Aluminium bei verschiedenen Drücken. Die Relaxationszeit im Festkörper ist mit 0.7 ps nahezu konstant.

große Massenunterschied, so dass bei jedem Stoß nur ein kleiner Energieanteil übertragen werden kann. Die Elektron-Phonon-Relaxationszeit  $\tau_{ep}$ , die ein Maß für diesen Energieübertrag darstellt, liegt daher auch etwa um einen Faktor  $m_i n_i / (2m_e n_e)$  höher als die Elektronen-Ionen-Stoßzeit  $\tau_{ei}$ . Insgesamt lässt sich die Relaxationszeit über einen weiten Temperaturbereich durch

$$\tau_{\rm ep} = (4\pi\epsilon_0)^2 \frac{3\pi m_{\rm i}\hbar^3 (1+A_{\rm e})}{8m_{\rm e}^2 Z^2 e^4 \ln\Lambda}$$
(2.1)

abschätzen, wobei die Normierungskonstante Ae aus der impliziten Gleichung

$$n_{\rm e} = \frac{1}{\pi^2} \left(\frac{m_{\rm e}}{\hbar}\right)^3 \int u_{\rm e}^2 \left[1 + A_{\rm e} \exp\left(\frac{m_{\rm e} u_{\rm e}^2}{2k_{\rm B}T_{\rm e}}\right)\right] \mathrm{d}u_{\rm e}$$
(2.2)

berechnet wird [112]. In diesen Ausdrücken stehen  $m_i$  und  $m_e$  für die Ionen- bzw. Elektronenmasse,  $u_e$  für die Geschwindigkeit der Elektronen, Z für den mittleren Ionisierungsgrad und ln  $\Lambda$  für den Coulomb-Logarithmus, dessen Berechnung in Anhang B.3 erläutert wird und der bei Temperaturen unter 100 000 K typischerweise Werte von 1–10 annimmt [115]. Werden diese Größen aus den Daten des QEOS-Modells berechnet, so ergibt sich für Aluminium der in Bild 2.4 dargestellte Verlauf. Bei konstantem Druck ist die Variation der Relaxationszeit mit der Temperatur im Plasma vergleichsweise gering. Es zeigt sich jedoch, dass sie in starkem Maß von den Ladungsträgerdichten abhängt, so dass sie im nichtentarteten Fall näherungsweise proportional zum Druck ist wie im Diagramm bei Temperaturen über 10 000 K erkennbar ist. Eine Extrapolation in den Festkörperbereich liefert entsprechend der dort nahezu konstanten Teilchenkonzentrationen einen druckunabhängigen Wert von rund 0.7 ps. Dieser ist deutlich geringer als die nach der Supraleitungstheorie mit

$$\tau_{\rm ep} = \frac{3\hbar\lambda_{\rm ep}\langle\omega_{\rm ep}^2\rangle\gamma_{\rm s}}{\pi k_{\rm B}\rho c_{\rm p}}$$
(2.3)

aus der Supraleitungskopplungskonstante  $\lambda_{ep}$  und dem mittleren Phononenfrequenzmoment  $\langle \omega_{ep}^2 \rangle$  berechnete Relaxationszeit von etwa 5 ps [116]. Die Diskrepanz verdeutlicht die großen Unsicherheiten in den verwendeten Theorien aufgrund ihrer starken Vereinfachungen. Beide Ansätze haben jedoch gemeinsam, dass die Relaxationszeit im Festkörper nicht oder, im Fall des Plasmamodells nach Gleichungen 2.1 und 2.2, nur geringfügig von der Temperatur abhängt.

Ausgehend von der in Anhang B.3 abgeschätzten Elektronen-Ionen-Stoßzeit  $\tau_{ei}$  lassen sich weitere Transporteigenschaften berechnen, beispielsweise die Wärmeleitfähigkeit  $\lambda_{th}$  und die elektrische Gleichstromleitfähigkeit  $\sigma_0$  [113, 114]:

$$\lambda_{\rm th} = \frac{n_{\rm e}k_{\rm B}^2 T \tau_{\rm ei}}{m_{\rm e}} \gamma_{\lambda} A_{\lambda}(T) \qquad (2.4)$$

$$\sigma_0 = \frac{n_e e^2 \tau_{ei}}{m_e} \gamma_\sigma A_\sigma(T) . \qquad (2.5)$$

 $A_{\lambda}$  und  $A_{\sigma}$  sind dabei Funktionen der Temperatur und liegen etwa in der Größenordnung von 1–10. Die Faktoren  $\gamma_{\lambda}$  und  $\gamma_{\sigma}$  stellen eine Korrektur hinsichtlich des Einflusses der Elektron-Elektron-Streuung bei nichtentarteten Plasmen dar. In ähnlicher Weise lassen sich auch die thermoelektrische Kraft und die Viskosität aus den Stoßzeiten berechnen [114, 117], worauf an dieser Stelle jedoch verzichtet werden soll.

Zur Berechnung der Leitfähigkeiten in den Gleichungen (2.4) und (2.5) genügt es in den meisten Fällen aufgrund der hohen Beweglichkeit der Elektronen, ausschließlich deren Beitrag zu berücksichtigen. Nur in Bereichen, in denen die Elektronendichte gering ist, wie z. B. für Temperaturen etwas über der Verdampfungstemperatur oder bei stark unterschiedlichen Elektronen- und Ionentemperaturen bzw. -konzentrationen, können auch die Schwerteilchen einen nennenswerten Beitrag liefern [112]. Nach der klassischen Gastheorie kann die Wärmeleitfähigkeit der Neutralteilchen im Wesentlichen durch eine ähnliche funktionelle Abhängigkeit wie in Gleichung (2.4) abgeschätzt werden [118]. Insgesamt ergibt sich dann das in Bild 2.5 gezeigte Verhalten für die Wärmeleitfähigkeit von Aluminium. Die hohen Konzentrationen an Valenzelektronen führen im Festkörper zu einer sehr guten Leitfähigkeit. Die mittleren Stoßzeiten wurden dabei entsprechend Anhang B.3 in diesem Bereich so nachgebildet, dass die experimentellen Vergleichswerte gut wiedergegeben werden. Jenseits der Verdampfungstemperatur sind die Werte um mehrere Größenordnungen geringer, was sich besonders deutlich im Bereich bis etwa 8000 K zeigt, in dem die Konzentration freier Elektronen so gering ist, dass hier die Leitfähigkeit der Neutralteilchen dominiert. Der Einfluss der Dichte bzw. des Drucks ist nach Gleichung (2.4) gering, da bei höheren Teilchenkonzentrationen die mittlere Zeit zwischen zwei Stößen in vergleichbarem Maß abnimmt.


**Bild 2.5:** Temperaturabhängigkeit der Wärmeleitfähigkeit  $\lambda_{th}$  für Aluminium bei verschiedenen Drücken. Die Siedetemperatur steigt dabei mit dem Druck an. Die experimentellen Werte (offene Kreise) wurden der Referenz [110] entnommen.



**Bild 2.6:** Temperaturabhängigkeit der elektrischen Leitfähigkeit  $\sigma_0$  für Aluminium bei verschiedenen Drücken. Die experimentellen Werte aus [110,119] wurden zur Bestimmung der Stoßfrequenzen im Festkörper verwendet (siehe Anhang B.3).

Ähnliches gilt nach Bild 2.6 auch für die elektrische Leitfähigkeit. Sie fällt im Festkörper und der Schmelze zunächst durch die Zunahme der mittleren Stoßfrequenz ab. Beim Phasenübergang zum Dampf erfolgt dann eine sprunghafte Reduktion durch das Fehlen der freien Ladungsträger. Mit zunehmender Ionisierung bei höheren Temperaturen steigt die Leitfähigkeit wieder an.

### 2.3 Optische Eigenschaften

Die optischen Eigenschaften eines Werkstoffes stehen in direktem Zusammenhang mit der Beweglichkeit der Elektronen. Das elektromagnetische Feld des Lichts wirkt zwar zunächst auf alle vorhandenen Ladungsträger, aber nur die Elektronen können aufgrund ihrer geringen Masse den Oszillationen des elektrischen Feldes teilweise folgen. Klassisch lässt sich die resultierende Bewegung durch ein Oszillatormodell beschreiben mit einer elektrischen Suszeptibilität: [111, 120, 121]

$$\chi^{(1)} = \varepsilon_{\rm r} - 1 = \frac{{\rm i}\sigma_0}{\varepsilon_0 \omega (1 - {\rm i}\omega\tau)} + \omega_{\rm p}^2 \sum_j \frac{f_j}{\omega_j^2 - \omega(\omega + {\rm i}v_j)}.$$
 (2.6)

Der erste Term auf der rechten Seite entspricht dabei dem Beitrag der nahezu freien Elektronen und ist vor allem bei Metallen und Plasmen von Bedeutung. Er ist proportional zur frequenzabhängigen elektrischen Leitfähigkeit, die sich nach Drude aus dem Verhältnis des Gleichstromanteils  $\sigma_0$  zum Faktor  $1 - i\omega\tau$  ergibt. Der zweite Term in Gleichung (2.6) stellt den Anteil der gebundenen Rumpfelektronen dar, die sich zusätzlich im anziehenden Coulomb-Feld der Kerne bewegen. Durch die gemeinsame Beeinflussung von externem Feld und Kernanziehung treten bestimmte Eigenfrequenzen  $\omega_j$ auf, bei deren Anregung eine besonders starke Polarisierung beobachtet wird. Die einzelnen Resonanzen sind relativ zueinander mit einer Oszillatorstärke  $f_j$  gewichtet, die Gesamtamplitude wird aber vor allem durch die Plasmafrequenz

$$\omega_{\rm p} = \sqrt{\frac{n_{\rm e}e^2}{m_{\rm e}\varepsilon_0}} \tag{2.7}$$

bestimmt. Der Beitrag der freien Elektronen ist letztendlich nur der Spezialfall des Rumpfelektronenbeitrags für  $\omega_i = 0$  und die Stoßfrequenz  $v_i = \tau^{-1}$ .

Gleichung (2.6) ist eine klassische Näherung, die prinzipiell sowohl auf Festkörper und Schmelze als auch Plasmen anwendbar ist und insgesamt die optischen Eigenschaften vergleichsweise gut beschreibt. Dennoch lässt sich in Festkörpern die Bewegung der Elektronen nicht immer durch eine einfache harmonische Schwingung beschreiben. In diesen Fällen muss die Berechnung der optischen Eigenschaften unter Berücksichtigung der elektronischen Bänder erfolgen. Der Drude-Anteil der freien Elektronen in Gleichung (2.6) entspricht in dieser Betrachtung so genannten Intrabandübergängen während die charakteristischen Resonanzen durch Interbandübergänge hervorgerufen werden. Wenn, wie in Metallen, Leitungsbandelektronen zur Verfügung stehen, kann der Interbandanteil häufig vernachlässigt werden, da dessen Anregungswahrscheinlichkeit durch die strengen Auswahlregeln für Energie und Impuls meist wesentlich geringer ist. Eine Ausnahme hiervon kann jedoch beobachtet werden, wenn, wie z. B. in Aluminium, zwei Bänder über einen größeren Impulsbereich energetisch nahezu parallel verlaufen. Dies führt zu dem in Bild 2.7 bei Raumtemperatur deutlich erkennbaren Absorptionsmaximum bei rund 900 nm. Die optischen Eigenschaften wurden in diesem Fall mit einem Modell berechnet, das diese Parallelbandabsorption berücksichtigt [122, 123]. Als Ausgangsgrößen hierfür dienen die temperaturabhängigen Stoßzeiten und die Leitfähigkeit des Zustandsgleichungsmodells. Die relativen Oszillatorstärken wurden dabei derart angepasst, dass der experimentelle Verlauf aus den Referenzen [124-127] möglichst gut wiedergegeben wird. Gleichung (2.6) würde zwar für längere Wellenlängen und das Maximum selbst eine gute Näherung darstellen, bei niedrigen Wellenlängen jedoch den Absorptionsgrad deutlicher unterschätzen [128].

Mit steigender Temperatur und abnehmender Kristallordnung nimmt der Beitrag der freien Elektronen kontinuierlich zu und dominiert letztendlich wie in Bild 2.7 das Spektrum der Schmelze. In der Literatur finden sich dabei unterschiedliche Angaben über den Temperaturbereich, ab dem die Parallelbandabsorption nicht mehr zu beobachten



**Bild 2.7:** Wellenlängenabhängigkeit des Absorptionsgrades *A* von festem und flüssigem Aluminium bei verschiedenen Temperaturen. Die Raumtemperaturwerte wurden aus [129] entnommen.



**Bild 2.8:** Vergleich der Temperaturabhängigkeit des Absorptionsgrades *A* von Aluminium mit Literaturwerten aus [130, 131] für die CO<sub>2</sub>- und Nd:YAG-Grundwellenlängen.

ist. Während einige Autoren bereits ab dem Aufschmelzen keine Absorptionserhöhung mehr erkennen konnten [124], wurde in anderen Messungen auch noch bei rund 1500 K ein deutlicher Einfluss nachgewiesen [126,127]. Diese experimentelle Unsicherheit spiegelt sich durch die Anpassung der Oszillatorstärken im Modell auch in den derart berechneten Kurven wieder. Während die Kurve für 900 K kaum eine Absorptionsspitze bei 900 nm zeigt, ist diese bei 1500 K wieder erkennbar. Ursache für diese Diskrepanz sind möglicherweise Unterschiede bei der Probenzusammensetzung und -präparation, die sich vor allem auf die strukturell besonders beeinflusste Parallelbandabsorption auswirken dürften. Solche Einflüsse würden sich dann auch besonders bei Wellenlängen in der Nähe des Absorptionsmaximums auf die beobachtete Temperaturabhängigkeit auswirken. Der in Bild 2.8 im Vergleich zum Experiment starke Abfall der berechneten Absorption für 1064 nm bei Temperaturen unter 600 K ist eventuell darauf zurückzuführen. Eine Änderung der Materialzusammensetzung könnte z. B. das Absorptionsmaximum verbreitern und damit den Temperatureinfluss reduzieren. Insgesamt werden die optischen Eigenschaften im Festkörper vergleichsweise gut wiedergegeben. Für geschmolzenes Aluminium liegen leider nur wenige systematische Messungen vor, die Rückschlüsse auf die Wellenlängen- und Temperaturabhängigkeit der komplexen Dielektrizitätskonstante  $\varepsilon_r$  erlauben würden.

In Plasmen kann die Absorption auf eine halbklassische Weise behandelt werden, die eine genauere Berücksichtigung des Einflusses der elektronischen Zustände der Atome erlaubt [132]. Hierbei werden verschiedene Wechselwirkungsmechanismen auf atomarer Ebene betrachtet, von denen hier nur die für die Lasermaterialbearbeitung besonders wichtige inverse Bremsstrahlung (IB) und die Photoionisation (PI) kurz beschrieben werden sollen. Informationen zu weiteren Arten der Licht-Materie-Wechselwirkung wie z. B. der Mie-Streuung können in den Referenzen [107, 132, 133] nachgelesen werden. Die Gesamtabsorption setzt sich dabei additiv aus den einzelnen Komponenten zusammen. Für die beiden hier untersuchten Fälle bedeutet dies für den Absorptionskoeffizienten  $\alpha$  bzw. die Absorptionslänge  $l_{\alpha}$ :

$$\alpha = \frac{1}{l_{\alpha}} = \left[1 - \exp\left(-\frac{hv}{k_{\rm B}T}\right)\right] \sum_{Z_i} n_i^{(Z_i)} \sigma^{(Z_i)} .$$
(2.8)

Hierbei wurde der Wirkungsquerschnitt  $\sigma^{(Z_i)} = \sigma_{IB}^{(Z_i)} + \sigma_{PI}^{(Z_i)}$  eingeführt, der die Absorption unter Beteiligung der  $Z_i$ -fach ioniserten Atome mit Konzentration  $n_i^{(Z_i)}$  beschreibt. Zur Berücksichtigung der stimulierten Emission wurde zusätzlich der Vorfaktor in der eckigen Klammer hinzugefügt [132].

Die inverse Bremsstrahlung entspricht dem oben diskutierten Fall der freien Ladungsträger während bei der Photoionisation ein gebundenes Elektron infolge der optischen Anregung freigesetzt wird. Damit entsteht im ersten Fall ein nahezu kontinuierliches Spektrum während im zweiten Fall deutliche Einflüsse der elektronischen Struktur der Atome oder Moleküle erkennbar sind. Nach [132, 134] können die beiden Wirkungsquerschnitte durch

$$\sigma_{\rm IB}^{(Z_i)} = \frac{4(1+Z_i)^2 e^6}{3(4\pi\epsilon_0)^3 h c_0 m_{\rm e} v^3} \sqrt{\frac{2\pi}{3m_{\rm e} k_{\rm B} T}} \frac{n_{\rm e} n_{\rm i}^{(Z_i+1)}}{n_{\rm i}^{(Z_i)}}$$
(2.9)

$$\sigma_{\mathrm{PI}}^{(Z_i)} = \sigma_{\mathrm{IB}}^{(Z_i)} \frac{1}{k_{\mathrm{B}}T} \sum_{k} \left| \frac{\mathrm{d}E_k^{(Z_i)}}{\mathrm{d}k} \right| \exp\left(\frac{E_k^{(Z_i)}}{k_{\mathrm{B}}T}\right)$$
(2.10)

beschrieben werden. Falls die an der Photoionisation beteiligten energetischen Zustände  $E_k^{(Z_i)}$  sehr dicht beieinander liegen, kann die Summation in Gleichung (2.10) durch eine Integration ersetzt werden und man erhält das besonders einfache Ergebnis für den gesamten Absorptionskoeffizienten:

$$\alpha = \alpha_{\rm IB} + \alpha_{\rm PI} = \left[ \exp\left(\frac{hv}{k_{\rm B}T}\right) - 1 \right] \sum_{Z_i} n_i^{(Z_i)} \sigma_{\rm IB}^{(Z_i)} . \tag{2.11}$$

Die Darstellung über die Wirkungsquerschnitte hat dabei den Vorteil, dass diese nahezu dichteunabhängig sind, da das darin enthaltene Verhältnis der Ladungsträgerkonzentrationen nach Saha im Wesentlichen eine Funktion der Temperatur ist (vgl. Anhang B.2). In Bild 2.9 ist der derart berechnete Wirkungsquerschnitt für die Neutralatome  $\sigma^{(0)}$  in Abhängigkeit von der Wellenlänge  $\lambda_0$  für verschiedene Temperaturen dargestellt. Hier zeigt sich, dass bei niedrigen Temperaturen im sichtbaren Spektrum deutliche Absorptionskanten zu erkennen sind, die auf die Photoionisation zurückzuführen sind. Zu ihrer





**Bild 2.9:** Wellenlängenabhängigkeit des Absorptionswirkungsquerschnittes  $\sigma^{(0)}$  von Aluminiumdampf bei verschiedenen Temperaturen. Die sprunghaften Anstiege bei den niedrigeren Temperaturen werden durch die Photoionisation hervorgerufen, bei höheren Werten dominiert die inverse Bremsstrahlung.

**Bild 2.10:** Temperaturabängigkeit der optischen Eindringtiefe  $l_{\alpha}$  von Aluminium bei verschiedenen Wellenlängen. Die gepunktete Kurve zeigt die deutliche Verringerung der Eindringtiefe bei höheren Drücken am Beispiel  $\lambda_0 = 1064$  nm bei 100 bar.

Berechnung wurde für die energetisch tiefsten Zustände das Termschema nach [135] verwendet und für höher gelegene ein kontinuierliches Spektrum angenommen. Bei Temperaturen von einigen 10 000 K überwiegt jedoch die inverse Bremsstrahlung, so dass die Absorption kontinuierlich mit der Wellenlänge ansteigt. Abgesehen von den Absorptionskanten zeigen dabei beide Komponenten eine Proportionalität zur dritten Potenz der Wellenlänge.

Eine Gesamtbetrachtung für die optische Eindringtiefe  $l_{\alpha}$  von Aluminium ergibt das in Bild 2.10 gezeigte Verhalten. Sie liegt im Festkörper für Wellenlängen unter 1 µm bei knapp 10 nm. Am Verdampfungspunkt steigt sie durch das Fehlen von freien Ladungsträgern im nahezu neutralen Metalldampf sprunghaft an. Mit zunehmender Ionisierung fällt  $l_{\alpha}$  dann zunächst wieder ab und steigt schließlich bei konstantem Druck durch die Abnahme der Gesamtteilchenkonzentration etwas an. Insgesamt wird die Absorption vor allem von letzterer beeinflusst, was sich in einer starken Druckabhängigkeit im Plasma mit Temperaturen über 10 000 K äußert.

#### 2.4 Phasenübergänge und Verdampfung

Mit zunehmender Erwärmung treten in den Werkstoffen nacheinander verschiedene Phasenübergänge auf, die zu strukturellen Änderungen im Kristall, zum Aufschmelzen oder zur Verdampfung führen. Meist wird für diese Umwandlungen in energetisch günstigere Atomverteilungen eine Aktivierungsenergie benötigt, da hierzu Bindungen gelöst werden müssen. Diese so genannte latente Wärme wird zunächst dem Werkstoff entzogen, so dass bei langsamer Energiezufuhr die lokale Temperatur erst dann wieder ansteigt, wenn das Material dort umgewandelt wurde. Wenn, wie beim Verdampfen, die energiereichsten Atome anschließend entfernt werden, so führt dies letztendlich zu einer Kühlung der Schmelze. Bei schneller Erwärmung oder Abkühlung bleibt dem Werkstoff eventuell zunächst keine Zeit für den Phasenübergang, so dass dieser entweder zeitlich verzögert bei höheren bzw. niedrigeren Temperaturen erfolgt oder, wie beim Härten von Stahl, ganz unterdrückt wird und das Material in einen metastabilen Zustand übergeht.

Obwohl die Ionenzustandsgleichung des QEOS-Modells zwischen Festkörper und Schmelze unterscheidet, wird der damit verbundene Phasenübergang nicht näher definiert und ihm insbesondere keine latente Wärme zugeordnet. Im Gegensatz dazu führt die Zustandsgleichung bei der isothermen Verdampfung durch ein Zweiphasengebiet aus Schmelze und Dampf, innerhalb dessen der Druck trotz Dichteänderung konstant bleibt (vgl. grau hinterlegten Bereich in Bild 2.1). Dies ist eine Folge der so genannten Maxwell-Konstruktion, bei der die thermodynamisch instabilen negativen Druck-Dichte-Gradienten der ursprünglichen mathematischen Beschreibung durch Annahme eines sich isobar mit der Dichte ändernden Mischungsverhältnisses der beiden Phasen kompensiert werden. Die Differenz der Enthalpie der Schmelze unmittelbar vor dem Zweiphasengebiet und der des Dampfes direkt danach entspricht gerade der latenten Verdampfungswärme  $L_v$ . Ihre Temperaturabhängigkeit ist in Bild 2.11 dargestellt. Auffällig ist, dass sie über einen weiten Temperaturbereich mit rund  $1.5 \times 10^7$  J/kg vergleichsweise konstant ist, bevor sie mit zunehmender Annäherung an den kritischen Punkt bei



**Bild 2.11:** Temperaturabhängigkeit der latenten Verdampfungswärme  $L_v$  von Aluminium nach dem QEOS-Modell. Der Wert bleibt zunächst relativ konstant und fällt dann bis zum kritischen Punkt bei  $T_c = 9420$  K schnell ab.



**Bild 2.12:** Vergleich der Dampfdruckkurven nach dem QEOS-Modell, der Clausius-Clapeyron-Gleichung ( $T_b = 2793$  K,  $L_v = 1.1 \times 10^7$  J/kg,  $R_s = 308$  J kg<sup>-1</sup>K<sup>-1</sup>) und experimentellen Werten aus Referenz [110].

 $T_c \approx 9400 \text{ K}$  schnell abfällt. Hier zerfällt das Material spontan in eine Art kaltes, dichtes Plasma. In der Literatur wird die latente Wärme von Aluminium mit rund  $1.1 \times 10^7 \text{ J/kg}$  etwas niedriger angegeben [110], aber angesichts der Vereinfachungen im Modell und der Tatsache, dass auch die experimentellen Daten nur auf Messungen in einem kleinen Temperaturintervall beruhen, erscheint die Übereinstimmung gut.

Die Messung der latenten Wärme erfolgt dabei oft durch die Bestimmung des Dampfdrucks, der sich nach Clausius-Clapeyron in der integralen Form

$$p_{\rm v}(T) = p_0 \exp\left\{\frac{L_{\rm v}}{R_{\rm s}} \left(\frac{1}{T_{\rm b}} - \frac{1}{T}\right)\right\}$$
(2.12)

als Funktion der Siedetemperatur  $T_b$  beim Umgebungsdruck  $p_0 = 1$  bar schreiben lässt, wobei  $R_s$  für die spezifische Gaskonstante steht. Zur Herleitung dieser Beziehung wurde angenommen, dass die latente Wärme weitgehend konstant ist. Empirische Untersuchungen zeigen jedoch, dass diese funktionelle Abhängigkeit auch nahe des kritischen Punkts erhalten bleibt [136]. Dies wird durch die gute Übereinstimmung der Dampfdruckkurve aus dem QEOS-Modell mit der aus Gleichung (2.12) in Bild 2.12 bestätigt. Obwohl bei der Druckberechnung nach Clausius-Clapeyron eine etwas niedrigere, experimentell bestimmte latente Verdampfungswärme verwendet wurde, ergeben sich lediglich bei höheren Temperaturen geringfügige Abweichungen zum QEOS-Modell.

Prinzipiell beginnt die Materialverdampfung wenn der Dampfdruck des Materials den Umgebungsdruck überschreitet. Bei einem Druck von 1 bar ist dies bei der Siedetemperatur  $T_b$  der Fall. Im Vakuum kann es jedoch auch schon bei geringeren Temperaturen zur Verdampfung kommen, selbst wenn, wie in Bild 2.12 ersichtlich ist, der Dampfdruck unterhalb von  $T_b$  schnell abfällt. Umgekehrt kann bei hohem Gegendruck die Verdampfung erst bei höheren Temperaturen in nennenswertem Umfang stattfinden. Diese Betrachtung gilt allerdings zunächst nur bei langsamer Erwärmung, bei der die Leistung ebenso schnell durch das Verdampfen von Atomen oder Clustern an der Materialoberfläche oder durch Blasenbildung aus dem Inneren der Schmelze entfernt werden kann wie sie zugeführt wird. Dies ist meist beim normalen "Kochen" oder "Sieden" der Fall, so dass hier die Oberflächentemperatur stets etwa der Siedetemperatur  $T_b$  entspricht. Bei schnellerer Erwärmung führt jedoch die endliche Geschwindigkeit der Phasenumwandlung zu einer Überhitzung. Dies ist bei der Bearbeitung mit kurzgepulsten Lasern und hoher Energiedichte der Fall, weshalb hier dem Prozess keine feste Verdampfungstemperatur zugeordnet werden kann.

Die Geschwindigkeit der Blasenbildung hängt neben dem Überhitzungsgrad auch stark von der Oberflächenspannung ab, die bei Metallschmelzen vergleichsweise hoch ist [137,138]. Man unterscheidet dabei zwischen der so genannten heterogenen und der homogenen Nukleation. In dem zuerst genannten, energetisch günstigeren Fall bilden sich die Blasen an Fremdmolekülen oder geometrisch exponierten Stellen wie z. B. Oberflächenunebenheiten der Gefäßwände, was zu einer erheblichen Absenkung der zur Entstehung notwendigen Energie führt, so dass diese Art der Blasenbildung vergleichsweise schnell abläuft. Da die Anzahl solcher heterogenen Keime jedoch begrenzt ist, kann diese Art der Verdampfung bei der intensiven Lasererwärmung nicht in ausreichendem Maß für Kühlung sorgen [139]. Im Fall der homogenen Nukleation bilden kleine Dichtefluktuationen den Keim für die Blase. Die Wahrscheinlichkeit hierfür ist normalerweise relativ gering, so dass wohl auch die daraus resultierenden Nukleationsraten die schnelle Erwärmung beim Laserbohren nicht generell kompensieren können. Dies ändert sich jedoch wenn Temperaturen nahe des kritischen Punktes erreicht werden, so dass sowohl die Dichtefluktuationen und die Überhitzung zunehmen als auch die Oberflächenspannung sinkt [139–141]. In diesem Fall könnte eine so genannte Phasenexplosion mit schneller, spontaner Verdampfung auftreten. Auch wenn einige Autoren aufgrund der von ihnen beobachteten Oberflächenbeschaffenheiten und Abtragsraten einen derartigen Mechanismus bei der Laserbearbeitung vermuten [142–144], so ist hierfür der Nachweis bisher nicht zweifelsfrei erbracht, so dass die Phasenexplosion ebenso Gegenstand kontroverser Diskussionen ist, wie die Möglichkeit einer nennenswerten Überhitzung tiefer gelegener Schmelzbereiche gegenüber der Oberfläche [145, 146].

Untersuchungen der ablatierten Partikel zeigen, dass der Abtragsprozess bei Metallen auch bei ultrakurzen Laserpulsen weitgehend von thermischer Natur ist [147]. Bei Dielektrika wird dagegen bei derart kurzen Pulsdauern eine Emission von Ladungsträgern vor dem eigentlichen thermischen Abtrag beobachtet, die vermutlich auf die so genannte Coulomb-Explosion zurückzuführen ist [147, 148]. Dabei werden einige hoch angeregten Elektronen aus der Oberfläche entfernt, so dass sich die Ionen infolge der zurückbleibenden positiven Nettoaufladung derart stark abstoßen, dass einige davon aus dem Werkstück heraus geschleudert werden. Vor allem beim Abtragen von Kunststoffen mit kurzwelliger Strahlung können darüber hinaus auch fotophysikalische und -chemische Mechanismen für den Abtrag von Bedeutung sein [149].

# 3 Wechselwirkung der Laserstrahlung mit Materie

Auch wenn im Allgemeinen beim Laserbohren der Materialabtrag nicht zwangsläufig mit der räumlichen Verteilung der einfallenden Strahlung korreliert ist, so zeigt sich doch in zahlreichen Experimenten und Berechnungen der hohe Einfluss der Energieeinkopplung auf das Bearbeitungsergebnis. Dabei ist neben dem Absorptionsverhalten der Werkstückoberfläche auch die Strahlpropagation im ablatierten Dampf oder der Umgebungsatmosphäre von Bedeutung. Aus diesem Grund sollen in den folgenden Abschnitten einige Aspekte der Energieeinbringung näher erläutert werden. Dabei werden zunächst die Strahlausbreitung in einer homogenen Atmosphäre und anschließend das Absorptionsverhalten an der Grenzfläche zum Werkstück untersucht, bevor abschließend noch einige Besonderheiten der Ausbreitung in einer inhomogenen Gasatmosphäre oder bei hohen Leistungsdichten erörtert werden. Als metallisches Material wird in diesem Kapitel Eisen für die Berechnungen verwendet, da es im Vergleich zu Aluminium eine größere optische Eindringtiefe bei 1064 nm Wellenlänge hat und somit numerisch mit einem gröberen Rechennetz erfasst werden kann. Prinzipiell lassen sich die hier gefundenen Ergebnisse jedoch auch direkt auf Aluminium übertragen.

#### 3.1 Strahlausbreitung in einem homogenen Medium

Die Ausbreitung der elektromagnetischen Laserstrahlung wird durch die Maxwell-Gleichungen beschrieben [121]. Falls keine Ladungen vorhanden sind, können die beiden inhomogenen Gleichungen, die dem Biot-Savart-Gesetz bzw. dem Ampère-Gesetz entsprechen, zur Wellengleichung für das elektrische Feld  $\vec{\mathcal{E}}$  und das magnetische Feld  $\vec{\mathcal{H}}$ zusammengefasst werden (Lichtgeschwindigkeit im Vakuum  $c_0$ ):

$$\left(\triangle - \frac{\varepsilon_{\rm r}}{c_0^2} \frac{\partial^2}{\partial t^2}\right) \left\{ \begin{array}{c} \vec{\mathcal{E}} \\ \vec{\mathcal{H}} \end{array} \right\} = 0.$$
(3.1)

Die relative Dielektrizitätskonstante  $\varepsilon_r$  entspricht dem Quadrat des Brechungsindex

$$\tilde{n} = n + i\kappa = \sqrt{\varepsilon_{\rm r}},$$
 (3.2)

der sich aus einem reellen Anteil *n* und dem Absorptionsindex  $\kappa$  zusammensetzt. Diese Größen sind grundlegende, frequenzabhängige Materialeigenschaften, was z. B. die Dispersionsrelation in Gleichung (2.6) verdeutlicht. Die einfachste Lösung von Gleichung (3.1) ist eine sich mit der Geschwindigkeit  $c_0/n$  ausbreitende ebene Welle

$$\tilde{\mathcal{E}}(\vec{x},t) = \hat{\mathcal{E}} e^{i(\vec{k}\vec{x} - \omega t)}$$
(3.3)

mit der Amplitude  $\hat{\mathcal{E}}$ , der Frequenz  $\omega$  und dem komplexen Wellenvektor mit dem Betrag  $k = \tilde{n}_{c_0}^{\underline{\omega}}$ . Im Vakuum ist n = 1, so dass hier die Amplitude in Gleichung (3.3) und damit auch die Intensität *E* räumlich konstant sind. Letztere entspricht dem zeitlich gemittelten Betrag des durch den Poynting-Vektor  $\vec{S}$  beschriebenen Strahlungsflusses:

$$E = |\langle \vec{S} \rangle| = |\langle \vec{\mathcal{E}} \times \vec{\mathcal{H}} \rangle| = \frac{n}{2} \sqrt{\frac{\varepsilon_0}{\mu_0}} \hat{\mathcal{E}}^2.$$
(3.4)

In absorbierenden Medien führt der imaginäre Anteil des komplexen Brechungsindexes zu einer Dämpfung der Welle und damit gemäß dem Lambert-Beer-Gesetz

$$E(z) = E(0)e^{-\alpha z} = E(0)e^{-z/l_{\alpha}}$$
(3.5)

zu einer exponentiellen Abnahme der Intensität in Propagationsrichtung z mit der optischen Eindringtiefe  $l_{\alpha}$  als charakteristische Absorptionslänge. Die Absorptionskonstante  $\alpha = 4\pi\kappa/\lambda_0$  ist dabei auch durch den Absorptionsindex  $\kappa$  stark von der Wellenlänge  $\lambda_0$ abhängig, wie bereits in Kapitel 2.3 am Beispiel der Plasmaabsorption erörtert wurde.

Im Gegensatz zur ebenen Welle ist beim Laser die Intensität senkrecht zur Propagationsrichtung räumlich nicht konstant und wird maßgeblich von der Geometrie des verwendeten Resonators bestimmt [150]. Da bei der Laserstrahlung die Variation der Feldamplitude entlang der axialen Ausbreitungsrichtung deutlich geringer ist als die in radialer Richtung, kann die Wellengleichung (3.1) hier durch die so genannte paraxiale Wellengleichung angenähert werden [151]. Deren allgemeine Lösung lässt sich durch Überlagerung verschiedener Moden beschreiben. Der Grundmode ist im Fall eines stabilen Resonators mit konfokalen rotationssymmetrischen Spiegeln eine gaußförmige Abhängigkeit der Leistungsdichte E vom Radius r

$$E(r,z) = \hat{E} \frac{w(z)^2}{w_f^2} \exp\left(-2\frac{r^2}{w(z)^2}\right)$$
  
mit  $w(z) = w_f \sqrt{1 + \frac{z^2}{z_R^2}}, \ z_R = \frac{\pi w_f^2}{\lambda_0}$  (3.6)

wobei z = 0 der Position des Fokus mit dem Durchmesser  $d_f = 2w_f$  entspricht. Die Rayleigh-Länge  $z_R$  entspricht dem Abstand zum Fokus, in dem die Leistungsdichte



Bild 3.1: Numerisch berechnete Wellenfronten eines gaußförmigen Laserstrahls der Wellenlänge 1 μm (oben) und Linien konstanter Intensität (Isophoten, unten). Der Vergleich mit analytisch bestimmten Krümmungsradien (durchgezogene Linien, oben) zeigt eine gute Übereinstimmung. Zur Verdeutlichung der Strahldivergenz wurde dabei ein kleiner Fokusdurchmesser von 5 μm verwendet, entsprechend einer Rayleigh-Länge von 20 μm.

durch die Strahldivergenz um einen Faktor 2 geringer ist als im Fokus. Die numerische FDTD-Simulation der Strahlausbreitung (vgl. Anhang C) in Bild 3.1 verdeutlicht die Wellenfronten und Leistungsdichteverteilung des Gaußstrahls. Die gute Übereinstimmung zur analytischen Lösung ist zugleich eine Verifikation des Lösungsalgorithmus. Bild 3.2 zeigt die Abhängigkeit des Strahlradius *w* vom Fokusabstand. Zur Verdeutlichung der Divergenz wurde hier ein sehr geringer Fokusdurchmesser von 5 µm verwendet, was bei der betrachteten Wellenlänge von 1 µm einer Rayleigh-Länge von rund 20 µm entspricht. Beim Laserbohren werden dagegen meist Fokusduchmesser von einigen 10 µm verwendet, so dass die Rayleigh-Länge im Bereich einiger hundert Mikrometer liegt. Reale Strahlprofile zeigen normalerweise eine stärkere Divergenz als der theo-



**Bild 3.2:** Vergleich von analytisch (durchgezogene Kurve) und numerisch berechnetem (Kreise) Strahlradius w(z) eines idealen Gaußstrahls in Abhängigkeit vom Abstand zum Fokus mit dem Durchmesser 5 µm.

retische, beugungsbegrenzte Fall, was in Gleichung (3.6) dadurch berücksichtigt werden kann, dass der Fokusdurchmesser mit der so genannten Beugungsmaßzahl  $M^2 \ge 1$  multipliziert wird. Bei Festkörperlasern mit guter Strahlqualität liegt dieser Faktor im Bereich von 1–2. Meist werden solche gaußförmigen Laserstrahlen für das Laserbohren verwendet, da sie rotationssymmetrisch sind und zugleich ein Optimum an Fokussierbarkeit und erzielbarer Leistungsdichte darstellen. In einzelnen Fällen wird die Strahlung auch über eine Glasfaser ans Werkstück geführt. Dadurch entsteht am Faserende ein radial homogenes, zylinderförmiges (*engl.: top-hat*) Intensitätsprofil mit steilen Flanken, das anschließend auf das Werkstück abgebildet wird. Experimentell wird meist anstelle der maximalen Leistungsdichte im Fokus  $\hat{E}$  der Mittelwert  $\bar{E}$  angegeben, der dem Quotient aus Laserleistung und Fokusfläche entspricht:

$$\bar{E} = \frac{1}{2}\hat{E} = \frac{4P}{\pi d_{\rm f}^2}.$$
(3.7)

#### 3.2 Energieeinkopplung in der Bohrkapillare

Die bisherigen Betrachtungen gelten nur für die Strahlpropagation in einem homogenen Medium. Beim Übergang zwischen Materialien mit unterschiedlichen optischen Eigenschaften wird meist ein Anteil *R* der einfallenden Strahlung an der Grenzfläche reflektiert. Die restliche Energie kann in das zweite Medium eindringen und wird dort absorbiert (Absorptionsgrad *A*) oder bei hinreichend dünnen Schichten auch transmittiert. Besonders in inhomogenen Werkstoffen, wie z. B. Keramiken mit zahlreichen mikroskopischen Grenzflächen zwischen Keramikkörnern und Bindemitteln, wird darüber hinaus auch ein Teil des Lichts gestreut und verlässt dann das Material



**Bild 3.3:** Schematische Darstellung der Strahlpropagation an der Grenzfläche zweier Medien mit unterschiedlichem Brechungsindex.

vergleichsweise ungerichtet. Aufgrund der Energieerhaltung entspricht die Summe dieser Anteile stets 100 % der einfallenden Energie. Bei Metallen mit optischen Eindringtiefen im Bereich von Nanometern können die beiden zuletzt genannten Komponenten vernachlässigt werden. Die Reflexion einer aus einem Medium mit Brechungsindex  $\tilde{n}_1$ unter einem Einfallswinkel  $\vartheta_1$  auf die Oberfläche eines zweiten Werkstoffes ( $\tilde{n}_2$ ) treffenden ebenen Welle mit Feldamplitude  $\hat{\varepsilon}_1$  lässt sich aus den Fresnelgleichungen und dem Brechungsgesetz bestimmen (vgl. Bild 3.3) [152]:

$$\frac{\tilde{n}_2}{\tilde{n}_1} = \frac{\sin \vartheta_1}{\sin \vartheta_2}$$

$$r_{\perp} = \frac{\hat{\mathcal{E}}'_{1,\perp}}{\hat{\mathcal{E}}_{1,\perp}} = \frac{\tilde{n}_1 \cos(\vartheta_1) - \tilde{n}_2 \cos(\vartheta_2)}{\tilde{n}_1 \cos(\vartheta_1) + \tilde{n}_2 \cos(\vartheta_2)}$$
$$r_{\parallel} = \frac{\hat{\mathcal{E}}'_{1,\parallel}}{\hat{\mathcal{E}}_{1,\parallel}} = \frac{\tilde{n}_1 \cos(\vartheta_2) - \tilde{n}_2 \cos(\vartheta_1)}{\tilde{n}_1 \cos(\vartheta_2) + \tilde{n}_2 \cos(\vartheta_1)}.$$
(3.8)

Die Amplitude der ins Medium 1 unter dem Winkel  $\vartheta_1$  gegen die Oberflächennormale  $\vec{n}$  zurückreflektierten Welle beträgt dabei  $\hat{\mathcal{E}}'_1$ . Die Indizes  $\perp$  und  $\parallel$  entsprechen den Komponenten senkrecht bzw. parallel zur Einfallsebene, die durch den Wellenvektor  $\vec{k}$  der einfallenden Strahlung und  $\vec{n}$  aufgespannt wird. Die Gleichungen (3.8) sind, wie im Fall von absorbierenden Metallen, auch für komplexe Brechungsindizes gültig. Die imaginären Anteile ergeben dann eine Phasenverschiebung gegenüber der einfallenden Welle und einen komplexen Brechungswinkel  $\vartheta_2$ , der die Trennung der Propagationsrichtung von der stets senkrecht zur Oberfläche abnehmenden Intensität zum Ausdruck bringt. Die Reflektivität *R* entspricht nach Gleichung (3.4) dem Betragsquadrat der Amplitudenverhältnisse. Bei senkrecht einfallender Strahlung (d. h.  $\vartheta_1 = 0$ ) ergibt sich hierfür der einfache Ausdruck:

$$R = R_{\perp} = R_{\parallel} = |r_{\perp,\parallel}|^2 = \frac{(n_2 - n_1)^2 + (\kappa_2 - \kappa_1)^2}{(n_2 + n_1)^2 + (\kappa_2 + \kappa_1)^2}.$$
(3.9)

Bei schrägem Einfall wird im Allgemeinen die parallel zur Einfallsebene polarisierte Komponente besser absorbiert als die, bei der der elektrische Feldvektor senkrecht zu dieser Ebene liegt. Dies ist in Bild 3.4 am Beispiel von Licht, das auf Oberflächen aus Eisen bzw. Siliziumnitrid einfällt, dargestellt. Während die Absorption des senkrecht polarisierten Anteils kontinuierlich mit ansteigendem Einfallswinkel abnimmt, steigt die der parallelen Komponente zunächst bis zum so genannten Brewster-Winkel an. Bei schwach absorbierenden Werkstoffen wie Si<sub>3</sub>N<sub>4</sub> wird letztere bei diesem Einfallswinkel praktisch überhaupt nicht reflektiert, was in der Praxis zur Trennung der Polarisationsrichtung verwendet werden kann.

Falls die Materialoberfläche nicht glatt ist, sondern eine gewisse Rauigkeit aufweist, so ist die Absorption im Mittel durch die lokal unterschiedlichen Einfallswinkel erhöht. In Bild 3.5 ist dies am Beispiel einer Eisenoberfläche mit sinusförmigen Strukturen von 1 µm Tiefe und unterschiedlicher Periodenabmessung dargestellt. Dabei bleiben die Rauheitskenngrößen  $R_a$  bzw.  $R_q$  konstant, nicht jedoch die Welligkeit. Bei Verringerung des Strukturabstands nimmt zunächst insbesondere die Absorption der parallelen Komponente stark zu. Wenn das Aspektverhältnis der Vertiefungen, also das Verhältnis von Tiefe zu Breite, groß wird, so wird das Verhalten komplizierter. In diesem Fall kann die zunächst in einer Kerbe reflektierte Strahlung erneut auf die Materialoberfläche treffen und dort absorbiert werden. Solche Vielfachreflexionen führen zu einer weiteren Erhöhung des Absorptionsgrades. Sind die Strukturen dagegen in der Größenordnung der



**Bild 3.4:** Absorptionsgrade von Eisen und Siliziumnitrid für parallele (durchgezogen) und senkrechte (gestrichelt) Polarisation als Funktion des Einfallswinkels. Im Gegensatz zum stetigen Abfall des senkrecht polarisierten Anteils nimmt die Absorption der parallelen Komponente bis zum Brewster-Winkel zu.



**Bild 3.5:** Mit FDTD berechneter Absorptionsgrad für parallele und senkrechte Polarisation beim Auftreffen eines gaußförmigen Laserstrahls mit 20 µm Durchmesser auf eine raue Oberfläche. Die Strukturen mit einer Periode von  $\Delta L$  haben dabei stets eine Tiefe von 1 µm so dass die Rauheitswerte  $R_a$  bzw.  $R_q$  konstant bleiben.

Wellenlänge, so ändert sich das Verhalten erneut, da dann die Strahlung ähnlich wie bei Hohlleitern unter Umständen nicht mehr in die Vertiefungen eindringen kann und somit die Absorption wieder abnimmt, wie in Bild 3.5 am Beispiel der senkrecht polariserten Komponente zu erkennen ist. Dieser Interferenzeffekt ist jedoch stark von dem Verhältnis von Strukturperiode und Wellenlänge abhängig, was zu den einzelnen Absorptionsextrema in dem Diagramm führt.

Die Winkelabhängigkeit der Absorption ist auch bei der Entstehung einer Laserbohrung von Bedeutung. Wird ein radial gaußförmiger Strahl auf die Materialoberfläche fokussiert, so findet an den Stellen ein Materialabtrag statt, an denen die absorbierte Leistungsdichte AE(r) die Abtragsschwelle  $E_{\text{th}}$  überschreitet. Dadurch bildet sich eine Vertiefung, die zu einer lokalen Änderung des Einfallswinkels und damit der Absorption führt. Gleichzeitig steigt jedoch die Gesamtgröße der Oberfläche, so dass insbesondere an den steilen Bohrungswänden die einfallende Leistungsdichte stark abnimmt. Wie in Bild 3.6 schematisch dargestellt ist, wird die auf einem Radiusbereich  $\Delta r$  einfallende Leistung auf eine Oberfläche mit Länge  $\Delta l = \sqrt{\Delta r^2 + \Delta z^2}$  projiziert, so dass die Intensität um das Verhältnis von  $\Delta r$  zu  $\Delta l$  abnimmt. Dies ist auch



**Bild 3.6:** Schematische Darstellung der Leistungsprojektion auf die Oberfläche einer Bohrung.



**Bild 3.7:** Numerisch berechnete Entwicklung einer Bohrung in Eisen (unten) und die entsprechenden auf die Oberfläche projizierten Leistungsdichten (oben). Mit zunehmender Pulszahl *N* sinkt die Leistungsdichte an den Wänden bis zu einer Abtragsschwelle von rund  $3 \times 10^7$  W/cm<sup>2</sup>. Nach 10 000 Pulsen ist in diesem Fall der Bohrstopp näherungsweise erreicht.



**Bild 3.8:** Vergleich der numerisch berechneten Oberflächentopografie nach 10000 Pulsen (durchgezogene Linie) mit der analytischen Näherung für den Bohrstopp nach Gleichung (3.10) (gepunktet). Auf der linken Seite wurde dabei eine winkelunabhängige Absorptivität von A = 1 angenommen, während beim Ergebnis auf der rechten Seite die Fresnelgleichungen berücksichtigt wurden.

an den, für verschiedene Stadien der Bohrlochentwicklung numerisch berechneten, projizierten Leistungsdichten in Bild 3.7 zu erkennen. Ausgehend von der gaußförmigen Verteilung auf dem flachen Werkstück führt die Ausbildung der Kapillare mit zunehmender Pulszahl zu einer deutlichen Abnahme der Absorption an den Wänden. Falls dabei lokal die Abtragsschwelle unterschritten wird, findet an dieser Stelle von da an kein Materialabtrag mehr statt, so dass die endgültige Oberflächentopografie erreicht wurde. In diesem Beispiel ist der Bohrstopp nach etwa 10 000 Pulsen näherungsweise erreicht. Die Abtragsschwelle scheint dabei mit rund  $3 \times 10^7$  W / cm<sup>2</sup> radial weitgehend konstant zu sein. Lediglich an der Bohrspitze, an der der Strahl stets senkrecht auf die Oberfläche trifft, kommt der Abtrag trotz der hier unverändert hoch bleibenden Leistungsdichte schließlich ebenfalls zum Erliegen. Ursache hierfür ist, wie in Kapitel 4.3.2 gezeigt wird, die verbesserte Wärmeableitung bei den kleinen Krümmungsradien der Spitze. Falls die Schwellleistungsdichte  $E_{th}$  in erster Näherung als räumlich konstant angesehen wird, so lässt sich aus der Gleichsetzung mit der auf die Oberfläche projizierten Leistungsdichte des Strahlprofils eine Bohrlochgeometrie beim Bohrstopp ableiten [153]:

$$z(r) = \int_{r_{\rm th}}^{r} \sqrt{\left(\frac{A(\vartheta(r'))E(r')}{E_{\rm th}}\right)^2 - 1} \, \mathrm{d}r'.$$
(3.10)

Die Integration beginnt dabei beim Radius  $r_{th}$ , an dem der absorbierte Anteil des senkrecht auftreffenden Strahlprofils AE(r) der Ablationsschwelle  $E_{th}$  entspricht. Der Vergleich mit der numerisch berechneten Bohrungsgeometrie in Bild 3.8 zeigt insgesamt eine gute Übereinstimmung wenn als Schwellleistungsdichte ein Wert von  $3 \times 10^7$  W/cm<sup>2</sup> angenommen wird. Die Abweichungen sind einerseits auf Wärmeleitungseinflüsse und andererseits auch darauf zurückzuführen, dass selbst nach 10 000 Pulsen rechnerisch noch ein minimaler Abtrag von Bruchteilen eines Nanometers pro Puls stattfindet, wenn wie in diesem Fall ein ideales Vakuum als Umgebungsatmosphäre angenommen wird. Auf der linken Seite von Bild 3.8 wurde dabei eine winkelunabhängige Absorptivität angenommen, während auf der rechten Seite die Fresnelgleichungen berücksichtigt wurden. Insgesamt sind für das hier untersuchte kleine Aspektverhältnis diese beiden Fälle weitgehend identisch, auch wenn bei Berücksichtigung des Einfallswinkels der Abtrag geringfügig höher ist.

Eine derart einfache Abschätzung ist allerdings nur dann möglich, wenn die Vielfachreflexionen im Bohrloch vernachlässigt werden können. Falls jedoch der Einfallswinkel in die Größenordnung von 45° und darüber ansteigt, also etwa ab einem Schachtverhältnis (Tiefe zu Durchmesser) von 0.5, verlassen nicht alle der an der Oberfläche reflektierten Strahlen anschließend die Bohrung. Ein Teil der reflektierten Leistung trifft auf der gegenüberliegenden Wand auf und kann dort absorbiert werden. Dies führt zu einer verbesserten Energieeinkopplung und damit prinzipiell zu höheren Abträgen und einer Verbreiterung der Bohrspitze [69, 107, 154]. Meist wird zur Berechnung solcher Vielfachreflexionen eine geometrische Strahlausbreitung angenommen. Dies ist jedoch nur dann eine gute Näherung, wenn die Oberfläche auf der Größenordnung der optischen Wellenlänge nahezu eben ist. Nach dem Huygens-Prinzip kann die reflektierte Strahlung zunächst als eine Überlagerung von Kugelwellen angesehen werden, die von jedem Punkt der Oberfläche ausgehen. Falls die Bohrungswand hinreichend planar ist, so führt die Interferenz dieser Teilwellen wieder auf die ebene Phasenfront der geometrischen Optik mit Amplitude und Wellenvektor entsprechend der Fresnelgleichungen. Im Allgemeinen ist dies jedoch auf den für die Mikromaterialbearbeitung wichtigen, durch Oberflächenunebenheiten und -krümmungen bestimmten, räumlichen Skalen nicht unbedingt der Fall. Eine genauere Analyse der Energieeinkopplung ist dann nur noch numerisch möglich. Bild 3.9 zeigt ein Beispiel für eine solche Rechnung bei der der Einfall eines gaußförmigen Laserstrahls mit 40 µm Durchmesser auf eine Sacklochbohrung von rund 25 µm Tiefe mit dem FDTD-Verfahren simuliert wurde. Deutlich sind sowohl in



**Bild 3.9:** Numerisch berechnete Strahlpropagation beim Einfall eines gaußförmigen Laserstrahls ( $d_f = 40 \,\mu$ m,  $\lambda_0 = 1064 \,n$ m, Polarisationsrichtung in Bildebene) auf eine Sacklochbohrung in Eisen. Auf der linken Seite ist die Volumenenergiedichte relativ zu der des ungestörten Strahls ( $q_0 = \hat{E}/c_0$ ) dargestellt. Der Ausschnitt auf der rechten Seite zeigt die Verteilung der absorbierten Leistungsdichte ( $\dot{q}_{abs,0} = \hat{E}/\lambda_0$ ). Nur innerhalb einer Schicht unterhalb der Oberfläche von der Größenordnung der optischen Eindringtiefe (ca. 20 nm) kann eine nennenswerte Absorption beobachtet werden.

der Energiedichte im Bohrloch als auch bei der an der Oberfläche absorbierten Leistungsdichte durch Interferenzen hervorgerufene lokale Schwankungen zu erkennen. Besonders auffällig ist dabei die gegenüber der freien Strahlpropagation um bis zu einem Faktor 70 überhöhte Energiedichte entlang der Symmetrieachse der Vertiefung. Dies ist eine Folge der Vielfachreflexionen, da geometrisch betrachtet die reflektierten Strahlen aufgrund der Rotationssymmetrie stets das Zentrum durchlaufen müssen. Auch wenn die hier gewählte Oberflächentopografie prinzipiell der in Bild 3.8 entspricht, so zeigt die mikroskopische Simulation der elektromagnetischen Absorption erhebliche Abweichungen von den Berechnungen mittels geometrischer Optik. Während in Bild 3.8 z. B. die Absorption an der Bohrspitze besonders hoch ist, ist dort nach der numerischen Lösung praktisch keine Energieeinkopplung zu erwarten. Ähnlich wie bei Hohlleitern kann die elektromagnetische Welle nicht in derart kleine Öffnungen eindringen. Eine Bilanzierung der absorbierten Leistung ergibt insgesamt eine deutliche Steigerung der Energieeinkopplung durch die Vielfachreflexionen. Während der Absorptionsgrad bei senkrechtem Einfall auf eine Eisenoberfläche rund 36 % beträgt, wird im berechneten Beispiel die senkrecht polarisierte Komponente im Bohrloch zu 45 % absorbiert und der parallel polarisierte Anteil sogar zu 67 %.

### 3.3 Streuung und Absorption im Materialdampf

Durch die hohen Abtragsraten beim Laserbohren bildet sich schnell eine sehr dichte und heiße Dampfatmosphäre über dem Werkstück. Aufgrund der hohen Temperatur und Verdichtung werden insbesondere an der Spitze der sich ausbreitenden Schockwelle hohe Elektronendichten von einigen 10<sup>19</sup> cm<sup>-3</sup> erreicht, die zu einer lokalen Verringerung des Brechungsindex führen [54]. Außerdem enthält der Dampf auch kleine Partikel, die entweder in dieser Form abgetragen wurden oder zu einem späteren Zeitpunkt der Expansion kondensiert sind [103, 107]. Diese Materialcluster können die Strahlausbreitung ebenso beeinflussen wie die beim Abtragen entstandenen Schmelztröpfchen. Im Folgenden soll an einigen Beispielen untersucht werden, welche Bedeutung solche Inhomogenitäten im Materialdampf für die Energieeinkopplung beim Laserbohren haben.

Entscheidend für das Maß der durch kleine Partikel hervorgerufenen Störung der Strahlausbreitung ist vor allem deren Größe im Vergleich zur Laserwellenlänge. Sehr große Teilchen blockieren die Strahlung weitgehend im Sinne der geometrischen Optik. Beim Laserbohren sind die Dampfpartikel jedoch eher von der Größenordnung der Wellenlänge, so dass nach der Mie-Theorie eine Streuung und teilweise auch Absorption des Lichts erwartet wird [155]. Für sphärischen Partikel kann die Propagation einer auf das Hindernis treffenden ebenen Welle analytisch berechnet werden. In Bild 3.10 sind auf der linken Seite eine Momentaufnahme der Wellenfronten sowie ein axialer Schnitt durch die Energiedichteverteilung für die Streuung an einem Teilchen mit 4 um Durchmesser und einem Brechungsindex von 1.5 dargestellt. Die analytisch berechnete Kurve bestätigt weitgehend das Ergebnis der numerischen Simulation mit dem FDTD-Verfahren. Das sphärische Partikel wirkt wie eine Linse, die die Strahlung fokussiert, so dass unmittelbar dahinter um einen Faktor 100 höhere Energiedichten auftreten als in der einfallenden Welle. Da in der Realität solche Partikel jedoch auch einen kleinen Teil der Strahlung absorbieren, bedeutet eine derart hohe Energiekonzentration mit Sicherheit eine erhebliche Erwärmung oder sogar die Verdampfung des Teilchens. Beim Abtragen von Metallen sind die Cluster und Tröpfchen im Dampf leitfähig, so dass wie auf der rechten Seiten von Bild 3.10 ein deutlicher Unterschied der Strahlpropagation gegenüber dem rein dielektrischen Fall zu erkennen ist. Die Strahlung kann hier das Eisenpartikel nicht durchdringen, so dass sich unmittelbar dahinter ein Schattenraum anschließt. Erst im Abstand von einigen Wellenlängen erreicht die Strahlung durch Beugung wieder in zunehmendem Maß die optische Achse. Handelt es sich bei der einfallenden Welle jedoch um ein gaußförmiges Strahlprofil, so wird die ursprüngliche Leistungsdichte im Zentrum nicht mehr erreicht. Erwartungsgemäß ist die Abschwächung dabei umso höher, je größer das Hindernis im Vergleich zum Strahldurchmesser ist.



**Bild 3.10:** Mit dem FDTD-Verfahren numerisch berechnete Streuung einer ebenen Welle an einem dielektrischen (links) bzw. metallischen Partikel (rechts) mit jeweils 4 µm Durchmesser. Das Graustufenbild stellt eine Momentaufnahme der elektrischen Feldstärke dar. Das Diagramm zeigt die normierte Energiedichte ( $q_0 = \hat{E}/c_0$ ) entlang der optischen Achse. Der grauschattierte Bereich kennzeichnet die Ausdehnung des Teilchens. Die analytisch nach der Mie-Theorie berechneten Kurven sind nahezu identisch mit den numerischen Simulationen. Im Fall von Eisen wurde zusätzlich der Energiedichteverlauf für ein radial gaußförmiges Strahlprofil mit 10 µm Fokusdurchmesser eingezeichnet.

Während solche Partikel in der Regel einen höheren Brechungsindex besitzen als der sie umgebende Dampf, führen hohe Elektronendichten zu Werten n < 1. Experimentelle Messungen im Luftdurchbruch zeigen, dass bei den hohen Intensitäten ultrakurzer Pulse der Brechungsindex lokal auf Werte von unter 0.94 absinken kann [156]. Diese Veränderung wird dabei schon auf ähnlichen Zeitskalen wie die Pulsdauer selbst beobachtet, so dass eine Beeinflussung der Strahlpropagation erwartet werden kann. In Bild 3.11 wurde die Streuung an einer sphärisch symmetrischen Brechungsindexverteilung numerisch berechnet. In Anlehnung an das Experiment wurde angenommen, dass die Dielektrizitätszahl durch  $\varepsilon_{\rm r}(\vec{x}) = 1 + (n_{\rm min}^2 - 1) \exp\left(-0.25\,\mu {\rm m}^{-2} |\vec{x} - \vec{x}_0|^2\right)$  radial nach außen gaußähnlich von einem Minimalwert  $n_{\min}$  auf den Umgebungswert ansteigt. Damit hat die Störung einen charakteristischen Radius von etwa 2 µm. Die Rechnungen für verschiedene Minimalwerte zeigen, dass zwar bei  $n_{\min} = 0.99$  nur eine geringe Streuung entsteht, dass diese jedoch bei  $n_{\min} = 0.94$  bereits so groß ist, dass ein fast völlig von Strahlung abgeschirmter Bereich hinter der Störung entsteht. Das Licht wird dabei konisch nach außen gestreut. Solche Strahlablenkungen könnten für die ringförmigen Abtragsstrukturen in Bild 1.4 verantwortlich sein.



**Bild 3.11:** Streuung eines gaußförmigen Laserstrahls ( $d_f = 10 \,\mu$ m,  $\lambda_0 = 1 \,\mu$ m) an einer sphärisch symmetrischen, inhomogenen Brechungsindexverteilung (siehe Text). Mit abnehmendem Brechungsindex wird die Strahlung mehr und mehr konisch gestreut, so dass eine Abschattung unmittelbar hinter der Störung (Kreis) entsteht. Die dargestellte Energiedichte ist relativ zum ungestörten Strahl normiert ( $q_0 = \hat{E}/c_0$ ).

Während bei geringen Leistungsdichten die Elektronen im Umgebungsgas näherungsweise der harmonischen Schwingung des Lichtfeldes folgen, führen Abweichungen davon bei höheren Anregungsleistungen zur Entstehung von zusätzlichen Frequenzkomponenten im Spektrum. In diesem Fall können die höheren Ordnungen der Taylor-Entwicklung der Polarisation  $\vec{\mathcal{P}}$  nach dem elektrischen Feld  $\vec{\mathcal{E}}$  nicht mehr vernachlässigt werden. Ohne Berücksichtigung der tensoriellen Eigenschaften der Suszeptibilität  $\chi$  führt dies auf eine skalare Gleichung der Form [151]

$$\mathcal{P} = \varepsilon_0 \left( \varepsilon_r \mathcal{E} + \chi^{(2)} \mathcal{E}^2 + \chi^{(3)} \mathcal{E}^3 + \dots \right).$$
(3.11)

In punktsymmetrischen Medien hat der zweite Term aus Symmetriegründen keine Bedeutung, so dass die Nichtlinearität vor allem durch die dritte Ordnung in  $\mathcal{E}$  entsteht. Für den Brechungsindex eines Dielektrikums bedeutet dies, dass zusätzlich zum konstanten Wert *n* ein weiterer Term proportional zur Leistungsdichte *E* auftritt, d. h.  $n(E) = n + n_2 E$ . Die nichtlinearen Anteile können bei langer Propagation eines Laserpulses in Luft (Proportionalitätsfaktor  $n_2 = 3/(4n^2)\sqrt{\mu_0/\epsilon_0}\chi^{(3)} \approx 5.7 \times 10^{-23} \,\mathrm{W}^{-1} \mathrm{m}^2)$ zur Veränderung der räumlichen und zeitlichen Pulsform führen, wenn die Leistungsdichte mindestens einige  $10^{11} \,\mathrm{W/cm^2}$  beträgt [157–159]. Bei Verwendung von kurzen Pulsdauern können solche Intensitäten bei der Lasermaterialbearbeitung leicht erreicht werden. Spektrale Messungen nach einem Luftdurchbruch zeigen daher z. B. deutliche Anteile von gegenüber der Laserfrequenz höheren Frequenzkomponenten [22,23]. Wird Gleichung (3.11) zusammen mit dem numerischen FDTD-Algorithmus verwendet, so lässt sich wie in Bild 3.12 die Propagation eines intensiven Gaußstrahls in Luft berechnen. Während anfangs deutlich das zeitlich ebenfalls gaußförmige Profil des elektrischen



**Bild 3.12:** Zeitliche Entwicklung der elektrischen Feldstärke eines zeitlich und räumlich gaußförmigen Laserpulses ( $\tau_{\rm H} = 100$  fs,  $Q = 500 \,\mu$ J,  $d_{\rm f} = 20 \,\mu$ m,  $\lambda_0 = 1064$  nm) an vier verschiedenen Stellen entlang der Propagationsachse. Mit zunehmender Ausbreitung ist eine Pulsverkürzung gefolgt von einer Pulsaufspaltung zu erkennen.

Feldes zu erkennen ist, entsteht mit zunehmender Ausbreitung im nichtlinearen Medium eine Pulsverkürzung mit höheren Amplituden. Die Leistungsdichteabhängigkeit des Brechungsindex und damit der Lichtgeschwindigkeit führt schließlich zur Aufspaltung in zwei zeitlich aufeinander folgende Pulse.

Die Änderung der Pulsform spiegelt sich auch im Frequenzspektrum in Bild 3.13 wieder. Nach einer Propagationslänge von  $100 \,\mu\text{m} (z = 0 \,\mu\text{m})$  ist das Spektrum noch weitgehend gaußförmig während nach der dreifachen Distanz gegenüber der Grundfrequenz von etwa  $3 \times 10^{14}$  Hz verschobene Komponenten zu erkennen sind. Im Gegensatz zum



**Bild 3.13:** Normiertes Frequenzspektrum des Laserpulses aus Bild 3.12 nach 100  $\mu$ m (oben) bzw. 300  $\mu$ m (unten) Propagationsdistanz. Die einzelnen Kurven zeigen dabei die Spektren an radial unterschiedlich weit von der optischen Achse entfernten Stellen, die aus Gründen der Übersichtlichkeit jeweils um 10 % im Absolutwert gegeneinander verschoben wurden. Experiment zeigt diese Rechnung jedoch vor allem einen hohen Anteil an niedrigeren Frequenzen. Ursache für diese Abweichung könnte die Vernachlässigung von zeitlichen Verzögerungen in Gleichung (3.11) sein, die z.B. durch die begrenzte Dynamik der Elektronen entstehen können [158, 159]. Die numerische Rechnung berücksichtigt außerdem nicht die Abhängigkeit des Brechungsindex von der lokalen Elektronenkonzentration, die wiederum von der Ionisierung infolge von Absorption beeinflusst wird. Eine genauere Rechnung müsste daher zusätzlich zur Strahlpropagation im nichtlinearen Medium auch eine Rückkopplung auf den Brechungsindex einbeziehen. Die in Bild 3.13 erkennbaren Unterschiede des Spektrums auf der optischen Achse von dem bei radial weiter außen gelegenen Stellen sind praktisch ausschließlich auf die Abnahme der Leistungsdichte und damit der nichtlinearen Frequenzkonversion mit zunehmendem Abstand vom Zentrum zu erklären.

# 4 Materialerwärmung und -abkühlung

Die Laserstrahlung wird im Werkstoff zunächst lokal von den leicht beweglichen Elektronen absorbiert. Anschließend findet durch Stöße untereinander auf einer Zeitskala der Größenordnung von 100 fs eine Thermalisierung der Elektronen statt [76, 160]. Die daraus resultierende energetische Verteilung kann nach Maxwell durch eine charakteristische Elektronentemperatur Te beschrieben werden. Erst diese Reduzierung des Vielteilchenproblems auf eine einzelne thermodynamische Größe ermöglicht schließlich eine makroskopische Beschreibung. Im Gegensatz zu den Elektronen können die schweren Ionen und Atomrümpfe direkt keine Strahlung absorbieren, da sie den schnellen Oszillationen des elektromagnetischen Feldes nicht folgen können. Durch Stöße mit energiereichen Elektronen findet jedoch nach und nach auch eine Erwärmung des Kristallgitters statt. Durch den hohen Massenunterschied zwischen Elektronen und Ionen kann pro Stoß nur ein kleiner Energieanteil übertragen werden, so dass die charakteristische Zeit  $\tau_{ep}$  für diese Anregung ein Vielfaches der Elektronen- oder Ionen-Stoßzeiten  $\tau_{ee}$  bzw.  $\tau_{ii}$  beträgt (vgl. Kapitel 2.2). Bei Metallen mit starker Elektronen-Phonon-Kopplung wie Eisen liegt die charakteristische Relaxationszeit  $\tau_{ep}$  im Bereich von 0.5 ps, bei solchen mit schwächerer Kopplung wie Aluminium oder Kupfer etwa ein bis zwei Größenordnungen höher [73]. Erst nach Ablauf eines Vielfachen dieser Elektron-Phonon-Relaxationszeit sind die Elektronen und das Kristallgitter auch untereinander im thermodynamischen Gleichgewicht und das System kann durch eine einzige makroskopische Temperatur T beschrieben werden.

Da die Laserstrahlung vor allem oberflächennah absorbiert wird, handelt es sich hierbei zunächst nur um ein lokales Gleichgewicht. Der Energieübertrag auf tiefer gelegene Materialbereiche benötigt oft erheblich länger als die lokale Thermalisierung. Diese Wärmeleitung wird dabei wieder vor allem durch Stöße der beweglichen Elektronen untereinander hervorgerufen. Ihre mathematische Beschreibung muss dabei unter Berücksichtigung der diskutierten Zeitskalen erfolgen (vgl. Bild 4.1). Falls die zu untersuchenden Prozesse kürzer als rund 100 fs sind, müssen die Stoßprozesse selbst z. B. mit Hilfe der Boltzmannschen Transportgleichung einbezogen werden [76, 160]. Da die derzeit üblichen Laserpulsdauern in der Materialbearbeitung meist länger sind, soll dieser Fall hier jedoch nicht näher untersucht werden. In der Mikrobearbeitung werden inzwischen allerdings auch Laser mit Pulsdauern von einigen hundert Femtosekun-



Bild 4.1: Schematische Darstellung des zeitlichen Ablaufs des Laserbohrens von Metallen. Anfangs wird die Laserenergie von den im Werkstoff schwach gebundenen Elektronen absorbiert. Anschließend findet lokal eine Thermalisierung innerhalb des Elektronensystems und auf einer längeren Zeitskala auch zwischen Elektronen und Kristallgitter statt. Abtrag und Schmelzaustrieb laufen demgegenüber erst deutlich verzögert ab. Die angegebenen Prozesszeiten sind nur als Anhaltspunkt zu verstehen da sie insbesondere bei längeren Zeiten auch durch die Prozessparameter beeinflusst werden. Bei längeren Pulsdauern halten die Anregung, die Relaxation und der Abtrag über die gesamte Pulsdauer und darüber hinaus an.

den bis einigen Pikosekunden eingesetzt. In diesem Zeitbereich muss die Elektronen-Phononen-Relaxation bei der Wärmeleitung berücksichtigt werden. Dieser Einfluss soll in Kapitel 4.2 näher untersucht werden. In den meisten Fällen liegen die Pulsdauern jedoch immer noch über diesen Relaxationszeiten, so dass eine klassische Beschreibung der Wärmeleitung unter Vernachlässigung dieser anfänglichen Anregungsmechanismen möglich ist.

#### 4.1 Klassische Wärmeleitung

Die klassische Beschreibung der Wärmeleitung erfolgt durch Berücksichtigung eines diffusiven Wärmestroms proportional zum Temperaturunterschied bzw. -gradienten, d. h.  $\vec{j}_{th} = -\lambda_{th} \nabla T$ . Die Wärmeleitfähigkeit  $\lambda_{th}$  entspricht dabei weitgehend dem elektronischen Anteil da der ionische Beitrag bei vergleichbarer Temperatur um etwa zwei Größenordnungen geringer ist [112]. Eine lokale Bilanz aus eingekoppelter Leistungsdichte  $\dot{q}$ , Differenz aus Wärmezustrom und -abfluss sowie der zur Materialerwärmung benötigten Leistung führt dann auf die Wärmeleitungsgleichung

$$\frac{\mathrm{d}H_{\mathrm{T}}(\mathbf{x},t)}{\mathrm{d}t} = \frac{\mathrm{d}\rho c_{\mathrm{p}} T(\mathbf{x},t)}{\mathrm{d}t} = -\nabla \left(-\lambda_{\mathrm{th}} \nabla T(\mathbf{x},t)\right) + \dot{q}(\mathbf{x},t) , \qquad (4.1)$$

wobei angenommen wurde, dass die spezifische Wärmekapazität  $c_p$  temperaturunabhängig ist, so dass die Enthalpie  $H_T$  des Materials mit der Dichte  $\rho$  proportional zur Temperatur T ist. Die Annahme temperaturunabhängiger Materialeigenschaften führt auf eine lineare Differentialgleichung, die z. B. mit Hilfe von Laplace-Transformationen vergleichsweise einfach gelöst werden kann [62, 153, 161–163]. In einem homogenen, unendlich ausgedehnten Medium ist dann die lokale Temperatur als Folge der Absorption einer Leistungsdichte  $\dot{q}(\mathbf{x}, t)$  durch

$$T(z,t) = T_{\infty} + \int_{t'=0}^{t} \int \int \int \frac{\dot{q}(\mathbf{x}',t')}{8\rho c_{\rm p} \sqrt{\pi \kappa_{\rm th}(t-t')^3}} \exp\left\{-\frac{|\vec{x}-\vec{x}'|^2}{4\kappa_{\rm th}(t-t')}\right\} {\rm d}^3 \vec{x} {\rm d} t' \qquad (4.2)$$

gegeben wenn  $T_{\infty}$  der Anfangs- und Umgebungstemperatur entspricht. Diese Lösung lässt sich auch auf endliche Werkstücke übertragen, falls zusätzliche virtuelle Absorptionsquellen eingeführt werden, um die thermische Isolierung an den Oberflächen sicher zu stellen [161, 164].

Bei eindimensionaler Betrachtung kann die Leistungsdichte nach dem Lambert-Beer-Gesetz als Funktion der an der Oberfläche absorbierten Intensität *AE* beschrieben werden (vgl. Kapitel 3.1):

$$\dot{q}(z,t) = \alpha A E(t) e^{-\alpha z}.$$
(4.3)

Die lokale Temperatur eines halbunendlichen Werkstücks lässt sich dann als Faltung

$$T(z,t) = T_{\infty} + \int_0^t AE(t-t')G_{\delta}(z,t')dt'$$
(4.4)

der Anregungsleistungsdichte mit der Impulsantwort

$$G_{\delta}(z,t) = \frac{\alpha}{2\rho c_{\rm p}} e^{\frac{1}{4}\alpha^2 l_{\rm th}^2} \left\{ e^{\alpha z} \operatorname{erfc}\left(\frac{\alpha}{2} l_{\rm th} + \frac{z}{l_{\rm th}}\right) + e^{-\alpha z} \operatorname{erfc}\left(\frac{\alpha}{2} l_{\rm th} - \frac{z}{l_{\rm th}}\right) \right\}$$
(4.5)

der Differentialgleichung ausdrücken. Hierbei steht  $\operatorname{erfc}(x)$  für die komplementäre Fehlerfunktion. Es wurde zudem angenommen, dass die Oberfläche thermisch isoliert ist, d. h. dass kein Wärmeübergang zum angrenzenden Dampf stattfindet. Einfache Abschätzungen der Verluste durch den Wärmeübergang auf ein angrenzendes Gas zeigen, dass diese meist um Größenordnungen geringer sind als die Laserintensität selbst [67]. Dies kann sich jedoch ändern wenn im Laufe des Prozesses ein heißes Plasma gebildet wird [94]. Auffallend ist, dass die Temperatur nur von den Verhältnissen aus Materialtiefe *z*, optischer Eindringtiefe  $l_{\alpha} = 1/\alpha$  und der thermischen Diffusionslänge

$$l_{\rm th} = 2\sqrt{\kappa_{\rm th}t} = 2\sqrt{\frac{\lambda_{\rm th}t}{\rho c_{\rm p}}} \tag{4.6}$$



Bild 4.2: Transienter Verlauf der Oberflächentemperatur beim Erwärmen von Aluminium (links) und Siliziumnitrid (rechts) mit Laserpulsen von 10 ns Dauer und verschiedenen zeitlichen Pulsformen (Rechteck, symmetrisches Dreieck, Gauß). Die durchgezogenen Linien entsprechen den analytischen Ergebnissen, die Symbole wurden mit dem TRANS3D-Programm berechnet. Im Gegensatz zu Al ist bei Si<sub>3</sub>N<sub>4</sub> wegen der hohen optischen Eindringtiefe die maximal erreichte Temperatur nur von der Fluenz und nicht von der Pulsform abhängig.

abhängt. Letztere ist ein materialspezifisches Maß für das zeitliche Eindringen der Wärme.

Die Integration in Gleichung (4.4) ist nur für einfache Anregungsfunktionen analytisch lösbar und führt selbst dann häufig auf umfangreiche Ausdrücke [62,161–163]. Dennoch kann prinzipiell jeder zeitliche Leistungsdichteverlauf in eine Potenz- oder Fourierreihe zerlegt werden, für deren einzelne Terme das Integral lösbar ist [153]. An dieser Stelle sollen jedoch nur zwei einfache Grenzfälle für die Oberflächentemperatur  $T_s$  erwähnt werden, welche die wesentlichen Merkmale verdeutlichen. Bei Metallen ist die optische Eindringtiefe meist vernachlässigbar, so dass hier die Oberflächentemperatur durch

$$T_{\rm s,met} = T_{\infty} + \frac{1}{\rho c_{\rm p}} \int_0^t \frac{AE(t-t')}{\sqrt{\pi \kappa_{\rm th} t'}} {\rm d}t' \stackrel{E={\rm const}}{=} T_{\infty} + \frac{2AE}{\lambda_{\rm th}} \sqrt{\frac{\kappa_{\rm th} t}{\pi}}$$
(4.7)

gegeben ist. Dies zeigt insbesondere, dass bei konstanter Absorption ein wurzelförmiger zeitlicher Anstieg der Temperatur erwartet werden kann. Bei Dielektrika ist dagegen die optische Eindringtiefe bis zu Zeiten von einigen Mikrosekunden deutlich höher als die thermische Eindringtiefe, so dass hier

$$T_{\rm s,diel} = T_{\infty} + \frac{\alpha}{\rho c_{\rm p}} \int_0^t AE(t-t') dt' \stackrel{E=\rm const}{=} T_{\infty} + \frac{\alpha}{\rho c_{\rm p}} AEt$$
(4.8)

gilt. Bei konstanter Leistungsdichte steigt hier die Oberflächentemperatur linear mit der Zeit an auch wenn die Erwärmung durch den kleinen Absorptionskoeffizienten  $\alpha$  insgesamt deutlich langsamer erfolgt. Um eine ähnliche maximale Oberflächentemperatur wie im Fall von Aluminium zu erreichen, muss daher, wie in Bild 4.2 dargestellt, die

absorbierte Energiedichte bei Siliziumnitrid um mehr als zwei Größenordnungen angehoben werden. Die numerischen Werte wurden dabei mit der TRANS3D-Software berechnet, die analytischen Kurven entsprechen Gleichung (4.4). Während bei Aluminium die Oberflächentemperatur nach einem 10 ns Puls auch von der Pulsform abhängt, führen sämtliche betrachtete Leistungsdichteverläufe bei Si<sub>3</sub>N<sub>4</sub> auf die gleiche Endtemperatur. Bild 4.2 zeigt zusätzlich den Temperaturverlauf bei deltaförmiger Anregung nach Gleichung (4.5) (gestrichelt). Sowohl für Metalle als auch für Keramiken kennzeichnet diese Funktion unabhängig von der ursprünglichen Pulsform das Abkühlverhalten bei längeren Zeiten.

Der Abkühlprozess ist besonders für die repetierende Laserbearbeitung mit geringen Pulsabständen interessant, bei denen das Material zwischen den Pulsen nicht vollständig abkühlen kann. Die Oberflächentemperatur eines Metalls unmittelbar nach Absorption von m + 1 Rechteckpulsen der Intensität E und Dauer  $\tau_{\rm H}$  im Abstand von  $T_{\rm p} = 1/f_{\rm p}$  beträgt z. B. [39, 163]:

$$T_{\rm s,met}(t = mT_{\rm p} + \tau_{\rm H}) \stackrel{\tau_{\rm H} << T_{\rm p}}{\approx} T_{\infty} + \frac{2AE}{\lambda_{\rm th}} \sqrt{\frac{\kappa_{\rm th}\tau_{\rm H}}{\pi}} \left(1 + \frac{1}{2}\sqrt{\frac{\tau_{\rm H}}{T_{\rm p}}} \sum_{n=1}^{m} \frac{1}{\sqrt{n}}\right).$$
(4.9)

Der zweite Term in der Klammer entspricht dabei der Erwärmung durch die vorhergehenden Pulse, die jedoch aufgrund des geringen Tastverhältnisses  $\tau_{\rm H}/T_{\rm p}$  (engl.: duty*cycle*) von typischerweise unter  $10^{-5}$  zunächst sehr gering ist. Nach Gleichung (4.9) würde aber nach entsprechend vielen Pulsen jede beliebig hohe Temperatur erreicht werden, da die Summe für  $m \to \infty$  langsam divergiert. Dies wird in der Realität natürlich durch Wärmeverluste an die Umgebung und vor allem durch das Einsetzen der Verdampfung verhindert. Für eine genauere Bestimmung der resultierenden Werkstücktemperatur müsste prinzipiell auch dessen endliche Abmessungen berücksichtigt werden. Aber selbst wenn die volle Energie von 10000 Laserpulsen mit je 1 mJ anschließend im Werkstück zurückbleibt, so würde sich eine  $10 \times 10 \times 1 \text{ mm}^3$  Probe aus Stahl insgesamt nur homogen um etwa 30 K erwärmen. Lediglich bei sehr dünnen Blechen oder hohen Repetitionsraten würde nach Bild 4.3 durch die dann zu langsame Energiediffusion aus der Wechselwirkungszone ein Wärmeleitungseinfluss auf den Abtragsprozess erwartet werden. Die Kurve für ein 1 mm dickes Eisenblech zeigt dabei wegen der gegenüber Aluminium schlechteren Wärmeleitfähigkeit bereits bei 100 kHz eine Temperaturerhöhung von rund 100 K, was etwa 3 % der maximalen Oberflächentemperatur eines Einzelpulses mit 2 µJ entspricht. Die Temperaturänderung gegenüber dem Einzelpuls bei repetierender, radial gaußförmiger Anregung wurde dabei analytisch durch Gleichung (4.2) unter Verwendung von Bildquellen zur Definition der thermisch isolierten Oberflächen berechnet. Während bei Metallen die Oberflächentemperatur eine Millisekunde nach einem einzelnen Puls nur noch um wenige Kelvin erwärmt ist, kann die Temperaturerhö-



Bild 4.3: Temperaturerhöhung an der Oberfläche nach 10 000 Pulsen gegenüber dem Einzelpuls bei repetierender Erwärmung verschieden dicker Aluminiumbleche mit unendlicher lateraler Ausdehnung. Bei hohen Repetitionsraten ist keine vollständige Abkühlung des Materials zwischen den Pulsen möglich. Dies erhöht sukzessive die Oberflächentemperatur, ebenso wie der Wärmestau an der Probenunterseite bei dünnen Blechen. Zum Vergleich ist außerdem eine entsprechende Kurve für Eisen bei einer Blechdicke von 1 mm punktiert eingezeichnet.

hung bei schlecht leitenden und vergleichsweise transparenten Keramiken jedoch lokal durchaus noch einige 100 K betragen [163].

Die Temperaturabhängigkeit der Materialeigenschaften kann zu gewissen quantitativen Unterschieden bei der Abtragseffizienz führen. Wie in Kapitel 2 gezeigt wurde, ändert sich allerdings z. B. die spezifische Wärmekapazität von Aluminium im Festkörper und in der Schmelze nur um 10–20 % mit steigender Temperatur. Deutlicher ist der Unterschied bei der Wärmeleitfähigkeit und vor allem bei den optischen Eigenschaften. Bei Keramiken, die sich unter Bildung einer Metallschmelze zersetzen, sind deren Änderungen mit der Temperatur besonders ausgeprägt [165, 166].

### 4.2 Zwei-Temperatur-Modell

Für Laserpulse unter etwa 100 ps kann die thermische Reaktion des Materials auf die optische Anregung nicht allein durch Gleichung (4.1) beschrieben werden. In diesem Fall muss zusätzlich der anfängliche Thermalisierungsvorgang zwischen den absorbierenden Elektronen und den Atomrümpfen berücksichtigt werden. In einfacher Näherung kann dies durch einen Relaxationsansatz erfolgen, der auf das so genannte Zwei-Temperatur-Modell (2-T-Modell) führt [18,38,70–74,167–170]. Hierbei werden jeweils für die Temperatur  $T_e$  der Elektronen und die des Kristallgitters  $T_i$  eigene Wärmeleitungsgleichungen gelöst, die durch einen Kopplungsterm proportional zur Temperaturdifferenz miteinander verbunden werden:

$$C_{e}(T_{e})\frac{\mathrm{d}T_{e}(\mathbf{x},t)}{\mathrm{d}t} = -\nabla \cdot \vec{j}_{\mathrm{th},e}(\mathbf{x},t) - G(T_{e} - T_{i}) + \dot{q}(\mathbf{x},t)$$

$$C_{i}(T_{i})\frac{\mathrm{d}T_{i}(\mathbf{x},t)}{\mathrm{d}t} = -\nabla \cdot \vec{j}_{\mathrm{th},i}(\mathbf{x},t) + G(T_{e} - T_{i}). \qquad (4.10)$$

In erster Näherung kann die Wärmeleitung im Kristallgitter, ausgedrückt durch den Wärmestrom  $\vec{j}_{th,i}$ , vernachlässigt werden. Die Wärmekapazität der Rümpfe ist außerdem nahezu konstant, während die der Elektronen etwa linear mit der Temperatur steigt (vgl. Kapitel 2.1). Für den Wärmestrom  $\vec{j}_{th,e}$  der Elektronen werden in der Literatur verschiedene Ansätze diskutiert. Häufig wird wie bei der klassischen Wärmeleitung ein diffusionsähnlicher Term

$$\vec{j}_{\text{th},e}(\mathbf{x},t) = -\lambda_{\text{th},e} \nabla T_e(\mathbf{x},t)$$
(4.11)

gewählt. Die daraus resultierenden Gleichungen werden als parabolisches Zwei-Temperatur-Modell bezeichnet. Dieser Ansatz ermöglicht prinzipiell eine physikalisch unmögliche, unendlich schnelle Wärmeausbreitung. Wird dagegen ein Relaxationsansatz der Form

$$\vec{j}_{\text{th,e}}(\mathbf{x},t) = -\frac{\lambda_{\text{th,e}}}{\tau_{\text{rel}}} \int_{t'=0}^{t} \exp\left(-\frac{t-t'}{\tau_{\text{rel}}}\right) \nabla T_{\text{e}}(\mathbf{x},t) dt'$$
(4.12)

verwendet, so verhindert die endliche Zeitkonstante  $\tau_{rel}$  ein zu schnelles Ausbreiten der Energie. Dieses so genannte hyperbolische 2-T-Modell führt auf eine Art Wellengleichung für die Elektronentemperatur. Ein derartiges Verhalten der Temperatur konnte bislang jedoch nicht zweifelsfrei nachgewiesen werden und auch die Frage nach der Größe der Relaxationszeit bleibt somit weitgehend offen [74]. Für die Simulation spielt jedoch die Wahl des Ansatzes meist keine große Rolle, da die Wärmeverteilung vor allem durch die Randbedingungen, also z. B. durch die Energieeinkopplung, bestimmt wird. Die berechneten Temperaturen der beiden Modelle unterscheiden sich daher oft nur geringfügig und entsprechen für lange Zeiten stets dem klassischen Grenzfall. Die Frage des Ansatzes ist also, zumindest im Hinblick auf die bislang insgesamt eher qualitative Art der Prozessmodellierung, eher von akademischer Natur, so dass im Folgenden die einfachere Diffusionsform verwendet wird. Als weitere Näherung wird, basierend auf den Ergebnissen von Kapitel 2, angenommen, dass sowohl die Wärmeleitfähigkeit  $\lambda_{th,e}$  der Elektronen als auch die Kopplungskonstante *G* im Festkörper temperaturunabhängig sind.

Die Gleichungen (4.10) lassen sich im Allgemeinen nicht analytisch lösen. Dies ist nur für stark vereinfachte Grenzfälle wie z. B. bei Vernachlässigung der Kopplung oder der

Bild 4.4: Zeitliche Entwicklung der Oberflächentemperatur von Aluminium bei Absorption eines Laserpulses von  $1 \, \text{ps}$  $(AH = 10 \,\text{mJ}/\text{cm}^2)$  bzw. 1 ns  $(AH = 100 \,\mathrm{mJ}/\mathrm{cm}^2)$ Dauer. Während die Elektronentemperatur (gepunktet) bei ultrakurzen Pulsen anfangs erheblich über der des Kristallgitters (durchgezogen) liegen kann, ist dieser Unterschied nach rund 100 ps vernachlässigbar.



Wärmeleitung möglich [18, 70, 167, 168, 171]. Einige charakteristische Eigenschaften können auch bei Annahme einer temperaturunabhängigen Wärmekapazität der Elektronen abgeleitet werden, was jedoch nach den Erkenntnissen von Kapitel 2.1 für prozessrelevante Temperaturen im Festkörper als keine gute Näherung erscheint. Die numerische Integration der Wärmeleitungsgleichung ist dagegen vergleichsweise einfach, so dass an dieser Stelle nur solche Ergebnisse diskutiert werden sollen. Bild 4.4 zeigt die derart berechneten Temperaturentwicklungen von Elektronen und Kristallgitter bei Absorption eines Laserpulses von 1 ps bzw. 1 ns Dauer. Die Intensität während der Pulse ist dabei zeitlich konstant und so gewählt, dass das Abdampfen vernachlässigt werden kann. Während bei der langen Pulsdauer Elektronen und Kristallgitter für alle prozessrelevanten Zeiten nahezu gleich sind, kann bei dem ultrakurzen Puls ein deutlicher Unterschied unterhalb von rund 100 ps (etwa entsprechend dem 20-fachen der Elektron-Phonon-Relaxationszeit  $\tau_{ep}$ ) beobachtet werden. Die Elektronentemperatur steigt zwar zunächst schnell an, aber die Energieübertragung an die Ionen erfolgt erst um etwa die Größenordnung von  $\tau_{ep}$  verzögert. Die Temperatur des Kristallgitters bleibt dabei aufgrund der höheren Wärmekapazität deutlich geringer als der Maximalwert der Elektronen. Die Elektronentemperatur fällt zwischenzeitlich sogar unter die der Phononen ab, da die Wärmeleitung infolge der großen Temperaturgradienten nicht ausreichend schnell durch die Kopplung kompensiert werden kann. Dieses Verhalten wird jedoch nur bei vergleichsweise geringen Energiedichten beobachtet. Die nach der klassischen Wärmeleitung berechnete Temperatur für die ultrakurze Pulsdauer in Bild 4.4 verdeutlicht, dass ein derartiges Modell für solche Zeitskalen nur eingeschränkt verwendet werden kann. Die grundsätzlichen Unterschiede der Piko- und Nanosekundenregime werden durch Bild 4.5 noch einmal hervorgehoben, wonach die charakteristischen Prozesszeiten bei Pulsdauern unterhalb von etwa 100 ps vor allem durch die Relaxationszeit  $\tau_{ep}$  des Materials und darüber durch den Puls selbst bestimmt werden.



**Bild 4.5:** Charakteristische Zeiten für die Verdampfung, das Erreichen der maximalen Einschmelztiefe und die Erstarrung in Abhängigkeit von der Pulsdauer ( $AH = 1 \text{ J}/\text{cm}^2$ ). Während der Prozess bei Pulsdauern  $\tau_H$  weit oberhalb der Elektronen-Phononen-Relaxationszeit  $\tau_{ep}$  im Wesentlichen von  $\tau_H$  beeinflusst wird, zeigt sich bei kürzeren Pulsen eine materialspezifische Sättigung.

#### 4.3 Geometrische Einflüsse

In den bisherigen analytischen Betrachtungen dieses Kapitels wurde stets eine eindimensionale Wärmeleitung angenommen. Dies ist jedoch nur dann eine gute Näherung, wenn die thermische Eindringtiefe  $l_{th}$  erheblich kleiner ist als die charakteristischen Längenskalen für die lateralen Temperaturunterschiede infolge des Strahlprofils oder der Oberflächenkontur. In Aluminium beträgt die thermische Eindringtiefe nach einer Nanosekunde rund 0.3 µm und ist damit zunächst deutlich kleiner als die in der Mikrobearbeitung typischen Strahldurchmesser im Bereich von 10–50 µm. Allerdings wurde in den vorherigen Abschnitten auch gezeigt, dass die Abkühlung des Materials auf Temperaturen unterhalb des Schmelzpunkts einige hundert Nanosekunden benötigen kann. Insbesondere für die damit verbundenen Prozesseinflüsse können geometrische Aspekte durchaus von Bedeutung sein, so dass sie im Folgenden kurz anhand einfacher Betrachtungen diskutiert werden sollen.

#### 4.3.1 Strahlprofil und -bewegung

Mit Hilfe von Gleichung (4.2) kann die Erwärmung einer Materialoberfläche bei beliebig vorgegebener räumlicher und zeitlicher Energieeinkopplung ermittelt werden. Die Oberflächentemperatur eines Metalles bei konstanter Absorption eines gauß- bzw. zylinderförmigen Laserstrahls mit konstanter Leistungsdichte  $A\hat{E}$  im Zentrum ist demnach durch

$$T_{\rm s,met}^{\rm Gauß} = T_{\infty} + \frac{A\hat{E}d_{\rm f}}{2\sqrt{2\pi}\lambda_{\rm th}} \arctan\left(\frac{4\sqrt{2\kappa_{\rm th}t}}{d_{\rm f}}\right)$$
(4.13)

$$T_{\rm s,met}^{\rm Top-Hat} = T_{\infty} + \frac{2A\hat{E}}{\lambda_{\rm th}} \sqrt{\frac{\kappa_{\rm th}t}{\pi}} \left\{ 1 - \sqrt{\pi} \operatorname{ierfc}\left(\frac{d_{\rm f}}{4\sqrt{\kappa_{\rm th}t}}\right) \right\}$$
(4.14)



**Bild 4.6:** Zeit bis zum Erreichen der Siedetemperatur als Funktion der absorbierten Leistungsdichte für gaußbzw. zylinderförmige Strahlprofile mit unterschiedlichem Fokusdurchmesser.

gegeben. Hierbei ist ierfc(x) das Integral der komplementären Fehlerfunktion. Beide Ausdrücke reduzieren sich für unendlich große Strahldurchmesser  $d_f$  auf den eindimensionalen Grenzfall in Gleichung (4.7). Bild 4.6 zeigt einen Vergleich der zur Erreichung der Siedetemperatur notwendigen Aufwärmzeiten für verschiedene Leistungsdichten und Strahldurchmesser. Während im eindimensionalen Fall nach einer gewissen Zeit stets die Verdampfung einsetzt, ist dies bei realen Strahlprofilen nur ab einer Schwellleistungsdichte möglich. Letztere hängt sowohl vom Fokusdurchmesser als auch von der räumlichen Energieverteilung ab. Im Fall von zylinderförmigen Profilen ist sie durch die geringeren lateralen Wärmeleitungsverluste infolge der kleineren Temperaturgradienten etwas niedriger als bei gaußförmigen mit gleicher Leistungsdichte im Zentrum.

Wird ein Laserstrahl mit gaußförmiger Energieverteilung über ein metallisches Werkstück bewegt, so lässt sich die transiente Temperatur durch

$$T_{\rm s}(\vec{x},t) = T_{\rm \infty} + \int_0^t \frac{A\hat{E}(t-\tau)d_{\rm f}^2}{\rho c_{\rm p}\sqrt{\pi\kappa_{\rm th}\tau}(d_{\rm f}^2 + 32\kappa_{\rm th}\tau)} \\ \times \exp\left\{-\frac{z^2}{4\kappa_{\rm th}\tau} - 8\frac{|x-x_0(t-\tau)|^2 + |y-y_0(t-\tau)|^2}{d_{\rm f}^2 + 32\kappa_{\rm th}\tau}\right\} \mathrm{d}\tau \quad (4.15)$$

ausdrücken, wenn  $x_0(t)$  und  $y_0(t)$  die Position des Lasers zum Zeitpunkt *t* kennzeichnen. Dieser Ausdruck kann numerisch integriert werden und führt z. B. zu der in Bild 4.7 gezeigten Abhängigkeit der maximalen Oberflächentemperatur von der Vorschubgeschwindigkeit, wenn der Laser linear über die Oberfläche bewegt wird. Diese Berechnung zeigt, dass die Strahlbewegung bei den in der Mikrobearbeitung üblichen Pulsdauern und Verfahrgeschwindigkeiten keinen nennenswerten Einfluss auf die Materialerwärmung selbst haben dürfte. Beim Wendelbohren eines Lochs mit einem Helixdurchmesser von 40 µm und einer Umlauffrequenz von 10 Hz wird z. B. der Laserstrahl nur



**Bild 4.7:** Analytisch berechnete Maximaltemperatur bei linearer Bewegung eines gaußförmigen Laserstrahls über eine Werkstückoberfläche aus Aluminium bzw. Eisen. Die Leistungsdichte wurde für jede Pulsdauer so gewählt, dass die Temperatur ohne Vorschub etwa 3000 K beträgt.

mit einer Geschwindigkeit von etwa 1 mm/s über das Werkstück bewegt. Die experimentell beobachteten Unterschiede zwischen dem Perkussionsbohren und dem Wendelbohren dürften daher eher auf die geometrische Veränderung der Abtragsfront und des Bohrlochs und der dadurch verursachten Beeinflussung der Energieeinkopplung, der Erwärmung und des Materialaustriebs zurückzuführen sein.

#### 4.3.2 Oberflächenrundung

Beim Laserbohren ist die Materialoberfläche nur anfangs eben. Mit zunehmender Lochtiefe führen lokale Krümmungen zu einem veränderten thermischen Verhalten. Während die konkave Krümmung an der Bohrungsspitze die Wärmeableitung verstärkt, bildet sich bei konvexen Radien wie am Einzug ein Wärmestau (vgl. Bild 4.8). Die Erwärmung solcher realer Oberflächengeometrien lässt sich zwar meist nur numerisch berechnen, dennoch können für stark vereinfachte Geometrien analytische Lösungen gefunden werden. Wird zum Beispiel die Bohrungsspitze durch einen kugelförmigen Hohlraum in einem unendlichen metallischen Werkstück angenähert, so beträgt die Oberflächentemperatur bei Absorption der Leistungsdichte *AE* in Abhängigkeit vom Krümmungsradius  $r_{\kappa}$  (vgl. Anhang D):

$$T_{\rm s,met} = T_{\infty} + \frac{AEr_{\kappa}}{\lambda_{\rm th}} \left[ 1 - \exp\left(\frac{\kappa_{\rm th}t}{r_{\kappa}^2}\right) \operatorname{erfc}\left(\frac{\sqrt{\kappa_{\rm th}t}}{r_{\kappa}}\right) \right].$$
(4.16)

Für große Radien nähert sich dieser Ausdruck wieder dem eindimensionalen Grenzfall nach Gleichung (4.7), während starke Krümmungen in der Größenordnung der thermischen Eindringtiefe zu erheblich niedrigeren Temperaturen führen. Gleichung (4.16) beschreibt zwar zunächst nur die Erwärmung von sphärischen Hohlräumen, kann aber





**Bild 4.8:** Prinzipskizze zur näherungsweisen Beschreibung der Erwärmung an der Bohrspitze durch jene an der Oberfläche eines kugelförmigen Hohlraums mit Radius  $r_{\kappa}$ . Die konvexe Krümmung am Einzug führt zu einem Wärmestau, die konkave im Zentrum zu einer gegenüber dem eindimensionalen Fall verbesserten Wärmeableitung.

**Bild 4.9:** Entwicklung der Oberflächentemperatur eines Aluminiumkörpers mit zylindrischem Hohlraum von unterschiedlichem Radius, der an der Innenseite eine konstante Leistungsdichte  $AE = 2 \times 10^7 \text{ W/cm}^2$  absorbiert. Die analytischen Kurven wurde mit der kugelförmigen Näherung nach Gleichung (4.16) und einem gemittelten Krümmungsradius berechnet.

näherungsweise auch für elliptische Geometrien verwendet werden, wenn der Mittelwert der Krümmungen entlang der beiden Hauptrichtungen zur Berechnung des Radius verwendet wird, d. h.  $r_{\kappa}^{-1} = \frac{1}{2}(r_{\kappa,1}^{-1} + r_{\kappa,2}^{-1})$ . Dies verdeutlicht Bild 4.9 am Beispiel eines zylinderförmigen Hohlraums ( $r_{\kappa,2} = \infty$ ), für den Gleichung (4.16) nur eine vergleichsweise grobe Näherung darstellen dürfte. Auch wenn bei sehr kleinen Radien oder langen Aufwärmzeiten Abweichungen zu den numerisch mit der FEM-Software FIDAP berechneten Kurven erkennbar sind, beschreibt der analytische Ausdruck den Verlauf insgesamt gut. Deutlich ist eine Abweichung vom eindimensionalen Grenzfall erkennbar, wenn die thermische Eindringtiefe, die nach 10 ns etwa 1 µm beträgt, größer als der Krümmungsradius ist. Die Spitze einer Bohrung ist demnach insbesondere bei längeren Pulsdauern erheblich schwieriger zu erwärmen als eine glatte Bohrungswand. Bei ultrakurzen Pulsen dürfte diese geometrische Abhängigkeit dagegen aufgrund der geringeren Wärmediffusion geringer sein.

# 5 Materialabtrag durch Verdampfung

Die bisherigen Ergebnisse bilden die Grundlage für die Modellierung des Laserabtragens. In diesem Kapitel soll nun zunächst erörtert werden, wie der mikroskopische Verdampfungsvorgang in einer einfachen makroskopischen Beschreibung berücksichtigt werden kann. Anschließend werden darauf aufbauend einige grundlegende Einflussfaktoren für die Abtragseffizienz diskutiert. Die Bedeutung des Schmelzaustriebs und der Dynamik des Materialdampfs bleibt dabei zunächst unberücksichtigt und ist Gegenstand von Kapitel 6.

#### 5.1 Makroskopisches Verdampfungsmodell

Von den in Kapitel 2.4 diskutierten Verdampfungsmechanismen dürften beim Laserbohren von Metallen vor allem die so genannte normale Verdampfung und die Phasenexplosion am kritischen Punkt von Bedeutung sein. Letztere lässt sich aufgrund der dabei zu erwartenden hohen Dichte im angrenzenden Dampf vermutlich nur unter gleichzeitiger Berücksichtigung der Austriebsdynamik modellieren und soll daher nur ansatzweise in diesem Kapitel diskutiert werden. Sie ist jedoch prinzipiell Bestandteil des in Kapitel 6.2 untersuchten, auf einer Zustandsgleichung basierenden, hydrodynamischen Modells.

#### 5.1.1 Makroskopische Abdampfrate

Unter normalen Bedingungen können sich praktisch ständig einige Atome von der Oberfläche ablösen, was sich in einem endlichen Dampfdruck äußert. Im Gleichgewicht werden jedoch ebenso viele Atome dort wieder kondensieren. Erst wenn der Dampfdruck  $p_v$  des Werkstücks, z. B. durch Erhöhung der Temperatur, den Partialdruck  $p_0$  der Atome in der Umgebungsatmosphäre überschreitet, kommt es zu einem Nettoabtrag. Die Abdampfrate ist dabei näherungsweise proportional zur Druckdifferenz [140, 172]:

$$j_{v}(T) = \rho u_{v} = \rho_{g} u_{v,g} = \frac{\alpha_{bs} \{ p_{v}(T) - p_{0} \}}{\sqrt{2\pi R_{s} T}}.$$
(5.1)

Zur Ableitung dieser Formel wird zunächst aus Kontinuitätsgründen der Massenstrom im kondensierten Zustand (ohne Index) dem im gasförmigen Zustand (Index g) gleichgesetzt und anschließend die Dichte  $\rho_g$  des Dampfs über die ideale Gasgleichung in Bezug zum Dampfdruck gebracht. Die Geschwindigkeit  $u_{v,g}$  der Gasmoleküle entspricht der thermischen Geschwindigkeit einer Maxwell-Verteilung im Gleichgewicht bei der Temperatur *T*. Der temperaturabhängige Dampfdruck wird nach Clausius-Clapeyron durch Gleichung (2.12) beschrieben.

Obwohl der Verdampfungsvorgang selbst inhärent ein Nichtgleichgewichtsprozess ist, wird dieser in Gleichung (5.1) ausschließlich durch Gleichgewichtsgrößen beschrieben. Diese Näherung ist notwendig, da das makroskopische Modell auf der thermodynamischen Annahme beruht, dass die Vielzahl der Teilchen durch wenige charakteristische Größen wie die Temperatur beschrieben werden kann. Eine genauere Analyse der Verdampfung wie sie z.B. zur Vorhersage der Größe der ablatierten Partikel notwendig ist, ist nur durch mikroskopische Ansätze wie die Molekulardynamik möglich [97–103]. Aus rechentechnischen Gründen ist dann jedoch eine Simulation von Verdampfungsvorgängen mit realen Abmessungen bislang nicht möglich. Ein makroskopisches Modell kann dagegen den Übergang von einzelnen statistisch ablatierten Molekülen in einen von der Oberfläche weggerichteten, thermalisierten Teilchenstrom nicht beschreiben. Diese Thermalisierung findet nahe der Oberfläche in einer dünnen Randschicht von wenigen freien Weglängen Ausdehnung durch Stöße zwischen den ablatierten Partikeln statt. Beim Durchqueren dieser so genannten Knudsen-Schicht werden auch einige der zunächst ablatierten Teilchen wieder auf die Oberfläche zurückgestreut, so dass sie dort rekondensieren. Zur Berücksichtigung dieses Anteils wurde in Gleichung (5.1) der Rückstreukoeffizient  $\alpha_{bs} \leq 1$  eingeführt. Zahlreiche Untersuchungen beschäftigen sich damit, die thermodynamischen Größen an der Materialoberfläche mit denen jenseits dieses Nichtgleichgewichtsbereiches in Verbindung zu bringen. Einfache analytische Abschätzungen versuchen dies durch Annahme einer Geschwindigkeitsverteilung an der Oberfläche in Verbindung mit den Kontinuitätsgleichungen für Masse, Impuls und Energie [173, 174]. Dazu wird jedoch eine zusätzliche Größe wie die Geschwindigkeit des Dampfes unmittelbar nach der Knudsen-Schicht benötigt, die auch durch das weitere Abströmverhalten beeinflusst wird. Aus Gründen der Einfachheit wird daher häufig dort ein Ausströmen mit lokaler Schallgeschwindigkeit angenommen, was nach einer analytischen Näherung einen Rückstreukoeffizienten  $\alpha_{bs} = 0.82$  ergibt [174]. Mikroskopische Monte-Carlo-Rechnungen unterstützen diese Abschätzungen prinzipiell [175], auch wenn aufgrund der starken Vereinfachungen sicherlich mit Abweichungen gerechnet werden muss. Insgesamt stellt die Abdampfrate nach Gleichung (5.1) sicher nur eine sehr grobe Näherung dar. Andere Modelle verwenden z. B. einen Arrhenius-Ansatz für
die Verdampfungsgeschwindigkeit [168]. Gemeinsam ist jedoch meist die exponentielle Abhängigkeit von der Oberflächentemperatur, welche die Abdampfrate dominiert und auch experimentell, zumindest für Temperaturen nahe des Siedepunktes, gefunden wird. Aus diesem Grund wird gelegentlich auch umgekehrt der Dampfdruck aus den Abdampfraten bestimmt [108]. Da die bisherigen theoretischen und experimentellen Erkenntnisse nicht ausreichen, um einen genaueren Ausdruck für die Verdampfungsrate zu bestimmen, soll im Folgenden Gleichung (5.1) mit  $\alpha_{bs} = 0.82$  und  $p_0 = 0$  verwendet werden. Dabei sollte jedoch stets daran gedacht werden, dass die derart bestimmten Abträge insbesondere bei hohen Temperaturen nur eine qualitative Näherung darstellen dürften.

#### 5.1.2 Modellbeschreibung und analytische Näherungen

Alle in diesem Kapitel vorgestellten analytischen und numerischen Abtragsmodelle basieren auf einer Kombination der Wärmeleitungsgleichung mit einer Oberflächenrandbedingung für den Wärmestrom  $\vec{j}_{th}$ , welche die Verdampfungskühlung berücksichtigt:

$$\vec{n} \cdot \vec{j}_{th} = -\vec{n} \cdot \lambda_{th} \nabla T|_{s} = AE - j_{v}(T_{s}) \left[ L_{v} + \int_{T_{\omega}}^{T_{s}} c_{p} dT \right] -h_{c}(T_{s} - T_{\omega}) - \varepsilon_{rad} \sigma_{rad}(T_{s}^{4} - T_{\omega}^{4}).$$
(5.2)

Der Normalenvektor  $\vec{n}$  wurde dabei so gewählt, dass er in das Innere des Werkstücks gerichtet ist. Die Terme auf der rechten Seite entsprechen der Reihe nach der Energieeinkopplung, der Verdampfungskühlung, dem Wärmeübergang zum Umgebungsgas und der Wärmestrahlung. Die Energieeinkopplung wird im allgemeinen Fall wie in Gleichung (4.1) durch eine Volumenquelle  $\dot{q}$  berücksichtigt. Bei den optisch dichten Metallen kann sie jedoch auch statt dessen in die Randbedingung einbezogen werden. Die Verdampfungskühlung entspricht dem Produkt aus dem ablatiertem Massenstrom nach Gleichung (5.1) und der spezifischen Enthalpiedifferenz zwischen dem Festkörper bei Umgebungstemperatur und dem Materialdampf. Letztere setzt sich in erster Linie aus der Summe der latenten Wärmen der Phasenübergänge und der zur Erwärmung auf die Oberflächentemperatur Ts notwendigen Wärmemenge zusammen. Da die latente Schmelzwärme und die spezifische kinetische Energie  $\frac{1}{2}u_{v,g}^2$  der ablatierten Moleküle meist um mindestens eine Größenordnung kleiner sind als z. B. die Verdampfungswärme L<sub>v</sub> werden sie üblicherweise nicht berücksichtigt. Gleiches gilt für die beiden letzten Terme in Gleichung (5.2), die normalerweise gegenüber der Laserleistungsdichte vernachlässigbar sind. Die an die angrenzende Atmosphäre abgegebene Leistungsdichte beträgt unter Annahme von  $h_c = 200 \text{ W m}^{-2} \text{K}^{-1}$  [67] bei einer Oberflächentemperatur von 10 000 K nur rund 200 W / cm<sup>2</sup>. Bei der gleichen Temperatur wird von einem idealen schwarzen Körper eine Leistungsdichte von rund  $6 \times 10^4$  W / cm<sup>2</sup> abgestrahlt.

Eine einfache Abschätzung der maximalen Abtragsrate kann durch Vernachlässigung der Wärmeleitung ( $\lambda_{th} = 0$ ) abgeleitet werden. In diesem Fall reduziert sich Gleichung (5.2) auf die Erhaltungsgleichung für die eingekoppelte und abgeführte Energie. Aus diesem impliziten Ausdruck kann mit einfachen iterativen Methoden die Oberflächentemperatur  $T_{s,max}$  und das stationäre Temperaturprofil

$$T(z) = T_{\infty} + (T_{s,\max} - T_{\infty}) \exp\left(-\frac{u_{v}z}{\kappa_{th}}\right)$$
(5.3)

bestimmt werden. Die daraus berechneten Abtragsgeschwindigkeiten  $u_v$  für Aluminium und Eisen sind in Bild 5.1 dargestellt. Es zeigt sich über einen weiten Bereich näherungsweise eine lineare Zunahme der Abtragsrate mit der absorbierten Leistungsdichte. Die gestrichelte Gerade in diesem Diagramm entspricht einer linearisierten Lösung bei der die Zunahme der Dampfenthalpie mit steigender Temperatur vernachlässigt wurde. Die Sättigung der Rate bei hohen Leistungsdichten ist in erster Linie auf diesen Anstieg zurückzuführen.

Die Abtragsraten in Bild 5.1 stellen bei Berücksichtigung der Wärmeleitung eine obere Grenze dar. In diesem Fall würde die gesamte absorbierte Leistungsdichte wieder mit dem Dampf abgeführt, so dass keine weitere Materialerwärmung möglich ist. Wie die numerischen Ergebnisse in Bild 5.2 zeigen, nähert sich die Oberflächentemperatur mit zunehmender Erwärmungsdauer asymptotisch dem stationären Grenzwert von  $T_{s,max} = 7190$  K an. Bei kürzeren Pulsen bleibt die Temperatur jedoch deutlich geringer, da dann ein erheblicher Anteil der Energie zur Materialerwärmung benötigt wird und damit letztendlich einen Wärmeleitungsverlust darstellt. Während der Aufwärmphase findet praktisch keine Verdampfung statt, so dass hier der Temperaturverlauf weitgehend

**Bild 5.1:** Maximale Abtragsgeschwindigkeiten für Aluminium und Eisen bei Vernachlässigung der Wärmeleitung. Die gestrichelte Gerade stellt eine linearisierte Näherung für Aluminium dar, bei der die Zunahme der Materialdampfenthalpie mit steigender Temperatur vernachlässigt wurde.





Bild 5.2: Numerisch berechnete Oberflächentemperatur von Aluminium bei Absorption eines Laserpulses unterschiedlicher Dauer und  $AE = 10^8 \,\mathrm{W/cm^2}$ . Die halbanalytische Lösung für 50 ns Pulsdauer (gepunktet) wurde durch Modifikation von (4.4)Gleichung berechnet (siehe Text). Die gestrichelte Kurve stellt den Grenzfall ohne Verdampfung dar, die strichpunktierte die Interpolation nach Gleichung (5.4).

mit der analytischen Kurve nach Gleichung (4.7) übereinstimmt. Die gepunktete Kurve entspricht einer halbanalytischen Verallgemeinerung der Lösung ohne Verdampfung nach Gleichung (4.4) für eine Pulsdauer von 50 ns. Hierbei wird im Faltungsintegral von der absorbierten Leistung zusätzlich diejenige der Verdampfungskühlung abgezogen, so dass nur über die tatsächlich zur Erwärmung zur Verfügung stehende Leistungsdichte integriert wird [84]. Auch wenn dadurch der Temperaturverlauf sehr gut wiedergegeben wird, so ist dieser Ansatz in der Praxis nicht wesentlich einfacher als eine direkte numerische Lösung der Differentialgleichung, da das Faltungsintegral ebenfalls numerisch ausgeführt werden muss.

Eine einfache analytische Näherung für die Erwärmung bei gleichzeitiger Verdampfung erhält man durch Interpolation der Temperatur zwischen den Grenzfällen ohne Verdampfung  $T_{s,u=0}$  und dem stationären Abtrag  $T_{s,max}$ . Bei der strichpunktierten Kurve in Bild 5.2 wurden diese beiden bekannten Lösungen durch eine Arkustangens-Funktion mit zunehmender Bestrahlungsdauer ineinander übergeführt [153]:

$$T_{\rm s}(t) = T_{\rm \infty} + (T_{\rm s,max} - T_{\rm \infty}) \left\{ \frac{2}{\pi} \arctan\left[ \frac{\pi}{2} \left( \frac{T_{\rm s,u=0} - T_{\rm \infty}}{T_{\rm s,max} - T_{\rm \infty}} \right)^{\frac{1}{m}} \right] \right\}^m.$$
(5.4)

Dieser Ansatz stellt sicher, dass für kurze Zeiten die Temperatur durch  $T_{s,u=0}$  gegeben ist und sie sich für lange Einwirkdauern asymptotisch und monoton steigend an  $T_{s,max}$ annähert. In dieser Form ist er allerdings nur für eine konstante Leistungsabsorption verwendbar und kann den Abkühlvorgang nicht beschreiben. Der Exponent *m* bestimmt die Zeitskala des Übergangs und muss durch eine zusätzliche Annahme festgelegt werden. Ein Vergleich mit numerischen Berechnungen zeigt, dass die Oberflächentemperaturen mit und ohne Verdampfung beim Erreichen der Siedetemperatur  $T_b$  nur etwa um 0.1 % voneinander abweichen. Wird diese Beobachtung zur Bestimmung von *m* verwendet, so ergibt sich näherungsweise

$$m \approx \frac{a}{4} \left( b + \sqrt{b^2 + 16} \right)$$
(5.5)  
mit  $a = \ln \left( \frac{T_{s,max} - T_{\infty}}{T_b - T_{\infty}} \right), \ b = 1 - \ln \left( \frac{125}{3} \pi^2 a \right).$ 

Auch wenn diese Annahme zunächst etwas willkürlich erscheint, so zeigt sich in der Praxis, dass der genaue Temperaturverlauf nur unwesentlich von *m* abhängt. Würde z. B. eine fünffach höhere Abweichung am Siedepunkt vorausgesetzt, so würde sich die aus der Oberflächentemperatur berechnete Abtragsrate für Nanosekundenpulse nur um etwa 20% ändern. Angesichts der starken Vereinfachungen dieser analytischen Näherung dürfte dies tolerierbar sein. Die prinzipielle Eignung dieses transienten analytischen Modells zur Beschreibung des Abtrags wird im nächsten Abschnitt demonstriert.

# 5.2 Einflussfaktoren für die Abtragseffizienz

Im Folgenden sollen einige wesentliche Einflussfaktoren des Abtragsprozesses anhand der vorgestellten Modelle untersucht werden. Da diese hauptsächlich auf Wärmeeinbringung und -leitung beruhen, kann kein Materialaustrieb durch Schmelze oder Dampf berücksichtigt werden. Damit können hieraus auch keine Abschätzungen für die zu erwartenden Absorptionsverluste in der Gasphase abgeleitet werden, so dass zunächst nur die tatsächlich im Material absorbierte Energie betrachtet wird. Experimente zeigen, dass der Laser bei hohen Leistungsdichten im Dampf durchaus um eine Größenordnung abgeschwächt werden kann [36, 55]. Nach Kapitel 2.3 kann bei Aluminium auch noch ein ähnlich großer Anteil an der Oberfläche reflektiert werden, so dass dann die eingekoppelte Leistung um einen Faktor 10–100 unter der des ursprünglichen Laserstrahls liegt. Auch wenn die Kenntnis dieser Einflüsse von entscheidender Bedeutung für den Vergleich mit Experimenten ist, so sollen zunächst anhand des vereinfachten Modells einige grundlegende Zusammenhänge zwischen den Prozessparametern und dem Bearbeitungsergebnis aufgezeigt werden. Diese bilden dann die Grundlage für die erweiterten Ansätze des nächsten Kapitels.

### 5.2.1 Intensität und Pulsdauer

Der Bohrprozess wird in der Praxis, abgesehen von der Bohrstrategie, vor allem durch die verwendete Pulsenergie und die Pulsdauer gesteuert. Erstere wird meist mit der Effizienz in Verbindung gebracht während eine Verkürzung des Pulses tendenziell zu höherer Präzision führt. Prinzipiell sind diese beiden Einflussfaktoren jedoch nur schwer zu trennen, da bei Veränderung der Pulsdauer in der Regel auch die Laserleistung angepasst werden muss. Durch zeitliche oder räumliche Integration von Gleichung (5.2) lässt sich bei Vernachlässigung der Wärmeleitung und geometrischer Einflüsse eine optimale Bilanz für den Abtragsprozess aufstellen

$$A \begin{cases} E \\ H \\ P \\ Q \end{cases} = \begin{cases} u_{v} \\ \Delta z \\ \dot{v} \\ V \end{cases} \rho \left[ L_{v} + \int_{T_{sc}}^{T_{s}} c_{p} dT \right], \qquad (5.6)$$

die den grundlegenden Zusammenhang zwischen den Laserparametern einerseits und dem Bearbeitungsergebnis andererseits verdeutlicht. Demnach korreliert die Laserleistungsdichte E mit der Verdampfungsgeschwindigkeit  $u_{\rm v}$ , die Energiedichte H mit der Abtragstiefe  $\Delta z$ , die Leistung P mit der Volumenabtragsrate  $\dot{V}$  und die Pulsenergie Q mit dem abgetragenen Volumen V. Als Proportionalitätsfaktor tritt in jedem Fall die spezifische Enthalpie  $H_{\rm T}$  des ablatierten Materials auf. Gleichung (5.6) stellt natürlich aufgrund der Vernachlässigungen nur eine erste Näherung dar und führt auf die bereits in Bild 5.1 diskutierten Ergebnisse. Experimentell werden meist die leichter zugänglichen Messgrößen wie Laserleistung oder Pulsenergie den Bohrungsabmessungen gegenübergestellt. Hierbei sollte jedoch nach Gleichung (5.6) stets die Energie mit dem Volumen und nicht z. B. der Abtragstiefe verglichen werden. In der eindimensionalen Theorie wird dagegen gerne der Zusammenhang zwischen der absorbierten Leistungsdichte und der Abtragsgeschwindigkeit verwendet, da dieser zunächst keine Annahmen zur räumlichen und zeitlichen Pulsform benötigt. Dies ändert sich jedoch, wenn die Wärmeleitung berücksichtigt wird, so dass, wie im vorherigen Abschnitt gezeigt wurde, die Materialerwärmung und -abkühlung für die erreichbare Oberflächentemperatur von Bedeutung sind.

Bild 5.3 zeigt die Abhängigkeit der gemittelten Abtragsgeschwindigkeit  $u_{Puls} = \Delta z/\tau_{H}$  von der absorbierten Leistungsdichte *AE* für verschiedene Pulsdauern im Nanosekunden-Bereich. Es zeigt sich, dass die Geschwindigkeiten bei hohen Leistungsdichten annähernd dem durch Gleichung (5.6) gegebenen Maximalwert (gestrichelte Kurve) entsprechen, während insbesondere bei kurzen Pulsdauern eine deutliche Verringerung der Abtragsrate für niedrigere Leistungsdichten zu beobachten ist. Letztere ist auf die Wärmeleitungsverluste beim anfänglichen Erwärmen des Werkstücks zurückzuführen, die bei hohen Leistungen durch den im Vergleich zur Pulsdauer schnellen Aufwärmvorgang weitgehend vernachlässigbar sind. Die gute Übereinstimmung der analytischen Ergebnisse nach Gleichung (5.4) mit den numerisch berechneten Raten verdeutlicht zudem die prinzipielle Eignung der Interpolationsnäherung. Damit wird andererseits aber auch gezeigt, dass der im analytischen Ansatz unberücksichtigte Abkühlungs-



**Bild 5.3:** Numerisch (Symbole) und analytisch (durchgezogen) berechnete mittlere Abtragsgeschwindigkeiten  $u_{Puls} = \Delta z / \tau_H$  für Laserpulse unterschiedlicher Dauer. Bei hohen Leistungsdichten wird der stationäre Grenzfall erreicht (gestrichelt), während bei niedrigen die Wärmeleitungsverluste zu einem Schwellverhalten führen.



**Bild 5.4:** Numerisch und analytisch berechnete Abtragstiefen in Abhängigkeit von der absorbierten Energiedichte bei Nanosekundenpulsen. Kürzere Laserpulse führen einerseits zu niedrigeren Abtragsschwellen und andererseits zu einer schnelleren Sättigung des Pulsabtrags infolge der schnell ansteigenden Verdampfungsenthalpie.

vorgang für den Abtrag eher unbedeutend ist. Dies ist eine Folge der sehr schnellen Verdampfungskühlung, die dazu führt, dass innerhalb weniger Nanosekunden nach Pulsende die Siedetemperatur unterschritten wird (vgl. Bild 5.2). Daher kann zumindest bei den hier betrachteten Pulsdauern diese kurze Abdampfphase vernachlässigt werden. Die Berücksichtigung der Wärmeleitungsverluste erklärt das Schwellverhalten des Abtragsprozesses wobei die Abtragsschwelle der Leistungsdichte umso niedriger ist, je länger der Puls ist. Bei Pulsen mit gleicher Energiedichte wie in Bild 5.4 ist die Schwelle jedoch bei kürzeren Pulsdauern geringer da dann die Erwärmung zunächst stärker an der Oberfläche lokalisiert bleibt. Allerdings sättigt der Pulsabtrag auch schneller mit zunehmender Energiedichte infolge der höheren Oberflächen- und Dampftemperaturen, die ein Ansteigen der mit dem Dampf abgeführten Enthalpie bewirken.

Bisher wurden nur Pulsdauern untersucht, für die die klassische Wärmeleitung verwendet werden kann. Wie Bild 5.5 zeigt, setzt sich zu ultrakurzen Pulsen hin zwar der Trend der Erniedrigung der Schwellenergiedichte fort, gleichzeitig ist dann jedoch auch eine Sättigung des Pulsabtrags zu erkennen. Der Abtrag infolge eines Laserpulses von 1 ps Dauer gleicht weitgehend dem eines 10 ps-Pulses, da die Reaktion des Materials erst auf einer längeren Zeitskala erfolgt. Für höhere Energiedichten erhält man näherungsweise einen logarithmischen Zusammenhang der Form  $\Delta z \propto \ln(AH/H_{th})$ , der auch experimentell beobachtet wird [19, 168]. Das Verhalten nahe der Schwelle ist bei Metallen nach diesen Rechnungen selbst bei ultrakurzen Pulsen hauptsächlich von den Wärmeleitungsverlusten bestimmt, da die Verdampfung um die Relaxationszeit  $\tau_{ep}$  verzögert



**Bild 5.5:** Mit dem Zwei-Temperatur-Modell berechnete Abträge für verschiedene Pulsdauern. Die Abtragsschwelle sinkt mit der Pulsdauer. Bei ultrakurzen Pulsen ist der Pulsabtrag weitgehend unabhängig von der Pulsdauer, so dass die Kurven für  $\tau_{\rm H} = 10$  ps und  $\tau_{\rm H} = 1$  ps praktisch zusammenfallen. Im Fall von hohen Energiedichten ergibt sich näherungsweise eine logarithmische Abhängigkeit des Abtrags von *H*.

erfolgt und zu diesem Zeitpunkt die thermische Diffusionslänge der Elektronen die optische Eindringtiefe bereits übertrifft. Nach 10 ps wäre z. B. bei Annahme einer Elektronentemperatur von 10 000 K die elektronische Diffusionslänge in Aluminium mit rund 60 nm deutlich größer als die Absorptionslänge von 8 nm. Allerdings stellt dies nur eine einfache Abschätzung dar, die auf einer Extrapolation der Materialeigenschaften zu höheren Temperaturen und der Annahme einer vom Dampfdruck bestimmten Abtragsrate beruht. Experimentelle Untersuchungen deuten dagegen auf eine Abhängigkeit der Abtragsrate von der Absorptionslänge nahe der Abtragsschwelle hin [19, 176].

Betrachtet man wie in Bild 5.6 die Abtragstiefe in Abhängigkeit von der Pulsdauer, so erkennt man wieder deutlich die Sättigung für ultrakurze Pulse. Für etwas längere Pulse ist dann zunächst ein leichter Anstieg des Pulsabtrags zu erkennen, bevor dieser auf-



**Bild 5.6:** Berechnete Abhängigkeit der Abtragstiefe von der Pulsdauer für verschiedene absorbierte Energiedichten. Die Sättigung bei ultrakurzen Pulsen ist auf die Energierelaxation zurückzuführen, der Abfall bei langen Pulsdauern ist eine Folge der zu geringen Leistungsdichten.



**Bild 5.7:** Einfluss der Pulsdauer auf die maximale Dicke der Schmelzschicht von Aluminium. Eine Verringerung der Pulsdauer kann zwar die Schmelzdicke reduzieren, führt aber durch die Sättigung bei ultrakurzen Pulsen nicht zu einer schmelzfreien Bearbeitung.

grund der zu geringen Leistungsdichte schließlich mit zunehmender Pulsdauer abfällt. Die Bereiche in denen der Prozess durch die Relaxationszeit  $\tau_{ep}$  bzw. die Pulsdauer  $\tau_{H}$  gekennzeichnet ist, lassen sich noch deutlicher anhand der maximalen Einschmelztiefe  $d_{m,max}$  in Bild 5.7 erkennen. Im Nanosekundenbereich nimmt die Schmelzdicke bei Verringerung der Pulsdauer kontinuierlich ab, um dann bei Pikosekundenpulsen gegen einen endlichen Grenzwert zu streben. Wie bereits in Bild 4.5 gezeigt wurde, werden diese Einschmelztiefen erst Nanosekunden nach Pulsende erreicht, was die vergleichsweise hohen Dicken erklärt. Im Fall von Metallen mit höheren Schmelztemperaturen wie z. B. Eisen sind die zu erwartenden Schmelzfilmdicken zwar deutlich geringer, aber eine schmelzfreie Bearbeitung ist auch hier nicht möglich solange der Abtragsmechanismus thermisch ist [74, 177]. Experimente mit Femtosekundenpulsen zeigen zum Teil ein erhebliches Schmelzaufkommen, das zwar durch eine geeignete Prozessstrategie vermieden werden kann, jedoch nicht alleine durch eine Verkürzung der Pulsdauer [20].

Um einen Prozess möglichst effizient zu gestalten, sollten die Energieverluste z. B. durch die Wärmeleitung gering gehalten werden. Zur Untersuchung dieser Problematik ist in Bild 5.8 die zeitliche Entwicklung der Energieanteile der Elektronen, des Kristallgitters sowie des ablatierten Dampfs während eines Pikosekundenpulses dargestellt. Anfangs wird die Laserstrahlung ausschließlich von den Elektronen aufgenommen und erst nach einigen Pikosekunden kann eine deutlich Relaxation zugunsten der Gitterenergie festgestellt werden. Gleichzeitig setzt dann die Verdampfung ein, die erst nach wenigen Na-





**Bild 5.8:** Zeitliche Entwicklung der Energieanteile von Elektronen, Kristallgitter und Dampf bei Absorption eines Laserpulses von 1 ps Dauer ( $AH = 1 \text{ J/cm}^2$ ). Die Verdampfung setzt entsprechend der Elektron-Phonon-Relaxation nach einigen Pikosekunden ein und ist erst nach Nanosekunden abgeschlossen.

**Bild 5.9:** Energieanteile im Dampf und Festkörper nach dem Verdampfungsvorgang für verschiedene Pulsdauern und Energiedichten. Der Energieanteil des Dampfes steigt mit abnehmender Pulsdauer und zunehmender Energiedichte.

nosekunden abgeschlossen ist. Zu dieser Zeit befinden sich Elektronen und Phononen bereits im thermischen Gleichgewicht, in dem die Energie vor allem im Kristallgitter gespeichert ist, da durch den Massenunterschied die Wärmekapazität der Atomrümpfe erheblich höher ist als die der Elektronen. Wenn die Verdampfung beendet ist, stellt die Summe aus den Energieanteilen der Elektronen und des Kristallgitters den Wärmeleitungsverlust im Festkörper dar. Eine genauere Untersuchung dieser Verluste für verschiedene Pulsdauern und Energiedichten ist in Bild 5.9 dargestellt. Es ist deutlich zu erkennen, dass die Wärmeleitungsverluste im Metall bei ultrakurzen Pulsen erheblich geringer sind als die von Nanosekundenpulsen. Eine Erhöhung der Pulsenergie steigert dagegen vor allem die mit dem Dampf abgeführte Energie. Wenn man die Energieanteile mit den Abtragsraten nach Bild 5.6 vergleicht, so fällt zudem auf, dass der Anstieg der Dampfenergie nur zum Teil auf einen höheren Abtrag zurückzuführen ist und sich vielmehr ein erheblicher Anteil in einer höheren Temperatur des Dampfes äußert. Im Hinblick auf die Prozesseffizienz muss diese Temperaturüberhöhung des Dampfes nicht zwangsläufig einen Verlust bedeuten, da diese beim Abströmen aus dem Bohrloch den Abtrag der Bohrungswände fördern kann [31]. Allerdings ist dieses sekundäre Bohrwerkzeug prozesstechnisch mit Sicherheit erheblich schwerer zu kontrollieren als das primäre, der Laserstrahl selbst.

### 5.2.2 Pulszahl

Mit zunehmender Abtragstiefe verändern sich die Energieeinkopplung, die Wärmeleitung und der Materialaustrieb erheblich. In Kapitel 3.2 wurde gezeigt, dass die Vergrößerung der Oberfläche besonders an den Bohrungswänden zu einer starken Abnahme der Leistungsdichte führt. Dies dürfte sich ebenso auf die Abtragsrate auswirken wie die in Kapitel 4.3.2 diskutierte Temperaturabsenkung an der Bohrspitze bei kleinen Krümmungsradien. In diesem Abschnitt soll untersucht werden, inwieweit diese beiden Mechanismen den in Bild 1.5 gezeigten starken Abfall der Bohrgeschwindigkeit mit zunehmender Lochtiefe erklären können.

Bild 5.10 zeigt einen Vergleich von verschiedenen Rechnungen zur Entwicklung des Abtrags pro Puls mit steigender Pulszahl. Die einzelnen Modelle unterscheiden sich dabei in den Annahmen zur Energieeinkopplung und zur Wärmeleitung. Der eindimensionale Ansatz berücksichtigt keinerlei Geometrieinformation, so dass die Abtragsrate konstant auf dem Wert für planare Ablation nach Gleichung (5.4) bleibt. Die Abtragsgeschwindigkeit an der Bohrspitze verringert sich auch dann nicht, wenn die Projektion der Leistungsdichte auf die Oberfläche, also die lokale Steigung der Bohrungswände,



**Bild 5.10:** Analytisch und numerisch berechnete Abhängigkeit der Abtragsrate von der Anzahl der verwendeten Pulse. Die analytischen Modelle unterscheiden sich in der Art wie die Oberflächengeometrie zur Bestimmung der Energieeinkopplung und der Wärmeleitung berücksichtigt wurde (Erklärung siehe Text).



**Bild 5.11:** Numerisch berechnete Entwicklung der Lochtiefe mit zunehmender Pulszahl beim Perkussionsbohren von Aluminium mit unterschiedlichen mittleren Energiedichten. Anhand der Steigung *m* lassen sich in dieser Auftragung die Regime der planaren Ablation (m = 1) und des Abtrags nahe der Schwelle ( $m \approx 0.14$ ) unterscheiden.

einbezogen wird. Dies liegt daran, dass die Strahlung aufgrund der Rotationssymmetrie an der tiefsten Stelle stets senkrecht auftrifft. Der geringe Abfall der gestrichelten Kurve in Bild 5.10 ist auf die numerische Diskretisierung zurückzuführen, da bei der Berechnung der lokalen Absorption über einen endlichen Oberflächenabschnitt gemittelt wurde. Auch wenn die Änderung der Energieeinkopplung nach diesem einfachen Modell keinen Einfluss auf die Bohrspitze haben kann, so wurde in Kapitel 3.2 gezeigt, dass sie die Geometrie der Bohrungswände zu einem erheblichen Teil mitbestimmt und dass eine genauere Analyse der Strahlpropagation auch zu Veränderungen der Einkopplung und damit der Abtragsrate im Bohrgrund führt. Erst wenn, wie bei der gepunkteten Kurve in Bild 5.10, zusätzlich die laterale Wärmeleitung infolge der Oberflächenkrümmung berücksichtigt wird, nimmt die Bohrgeschwindigkeit im Zentrum schnell ab. Das hierbei verwendete analytische Modell ist eine Verallgemeinerung des Ansatzes in Gleichung (5.4) bei dem die Aufwärmung an konkav gekrümmten Stellen durch die Erwärmung eines elliptischen Hohlraums angenähert wurde (vgl. Kapitel 4.3.2 und Ref. [153, 178]). Dadurch fällt der Pulsabtrag ähnlich schnell ab, wie im Fall der numerischen Rechnung, die sowohl die Leistungsdichteprojektion als auch die dreidimensionale Wärmeleitung beinhaltet. Die Simulation zeigt prinzipiell wie das Experiment in Bild 1.5 anfangs einen schnellen Abfall der Bohrgeschwindigkeit um eine Größenordnung, gefolgt von einem Bereich, in dem sie nur langsam abnimmt.

Betrachtet man wie in Bild 5.11 die Abtragstiefe in Abhängigkeit von der Pulszahl im doppelt-logarithmischen Maßstab, so lassen sich deutlich zwei Regime unterscheiden. Während bei geringer Vertiefung die Abtragstiefe näherungsweise proportional zur Pulszahl ist, findet anschließend ein schneller Übergang zu einem Bereich mit nur langsamer Zunahme der Bohrtiefe statt. Näherungsweise lassen sich beide Abschnitte durch eine Beziehung der Form  $z \propto N^m$  mit m = 1 bzw. m = 0.14 beschreiben und stehen unmittelbar in Zusammenhang mit der Lochgeometrie. Zu Beginn besitzt die Bohrung eine vergleichsweise runde Form, dann entsteht durch die starken lokalen Unterschiede in den Abtragsraten nach und nach eine ausgeprägte Bohrspitze (vgl. Bild 3.7). Wie Bild 5.12 zeigt, ist für die prinzipielle Abhängigkeit der Abtragstiefe von der Pulszahl nicht besonders entscheidend, ob die Winkelabhängigkeit der Absorption berücksichtigt wird oder welches Strahlprofil verwendet wird. Durch die im Mittel etwas höhere Energieeinkopplung bei Beachtung der Fresnel-Gleichungen ist lediglich die Lochtiefe insgesamt etwas höher. Einen deutlicheren Einfluss dürften dagegen die Vielfachreflexionen in der Kapillare haben. Bei einem Schachtverhältnis von etwa 0.5 nimmt die Abtragsrate nahe der Bohrspitze derart stark zu, dass die Numerik durch die starken lokalen Oberflächenunebenheiten instabil wird und die Rechnung abgebrochen werden muss. Allerdings muss beachtet werden, dass das hierbei verwendete TRANS3D-Programm von stark gerichteter Reflexion, beschrieben durch geometrisches Ray-Tracing, ausgeht. Die numerischen Berechnungen der Energieeinkopplung in Kapitel 3.2 haben jedoch ein weitaus differenzierteres Bild ergeben, so dass eine genauere Diskussion des Einflusses der Geometrie auf die Bohrgeschwindigkeit erst bei Verwendung solcher elektromagnetischer Simulationen sinnvoll wird.

Eine ähnliche Korrelation von Pulsabtrag und Bohrungsgeometrie zeigen auch experimentelle Untersuchungen. Wie Bild 5.13 zeigt, ergibt sich dabei allerdings ein etwas



**Bild 5.12:** Vergleich der zeitlichen Entwicklung der Abtragstiefe von Berechnungen mit konstanter Absorptivität und gauß- bzw. zylinderförmigen Strahlprofilen mit der einer gaußförmigen Energieverteilung unter Berücksichtigung der Fresnel-Gleichungen.



**Bild 5.13:** Experimentell bestimmte Abhängigkeit der Bohrtiefe von der Pulszahl beim Perkussionsbohren von PMMA. In der doppelt-logarithmischen Auftragung sind drei Regime zu erkennen, die jeweils einer typischen Lochgeometrie zuzuordnen sind. Ref. [24,25]

komplizierterer Verlauf, der oft drei unterschiedliche Bereiche erkennen lässt [24, 25]. Häufig kann, vermutlich aufgrund der hohen Abtragsraten, die anfänglich planare Ablation nicht deutlich aufgelöst werden. Nur Experimente mit Leistungsdichten nahe der Abtragsschwelle zeigen diesen Bereich [26, 179]. Die Regime mit der anfänglich starken (Steigung m = 0.32) und dann mäßiger Abnahme (m = 0.82) der Bohrgeschwindigkeit in Bild 5.13 werden von dem einfachen Ablationsmodell nicht wiedergegeben und sind möglicherweise auf den mit der Lochtiefe variierenden Plasmaeinfluss zurückzuführen. Nach dem Hirschegg-Modell führt die eingeschränkte Dampfausbreitung in der Bohrkapillare eher zu Plasmabildung und damit zu stärkerer Abschirmung der Spitze und einem zusätzlichen Abtrag der Bohrungswände [31,60]. Die puffernde Wirkung des Plasmas kommt erst nahe dem Bohrstopp zum Erliegen, so dass in diesem letzten Bereich wieder ein starker Abfall der Abtragsrate zu erkennen ist. Die Experimente verdeutlichen, dass sich in dieser Phase der Prozess wenig deterministisch verhält, da bereits geringe Schwankungen der Leistungsdichte, Polarisation oder der Materialzusammensetzung und Oberflächengeometrie zu starken Beeinträchtigungen des Bohrverlaufs führen. Häufig kann dann sogar ein Abknicken der Bohrung senkrecht zur Polarisationsrichtung beobachtet werden [24, 26, 59]. In den numerischen Berechnungen wurden ausschließlich geringe Leistungsdichten nahe der Abtragsschwelle verwendet, so dass ein schneller Übergang von der planaren Ablation zu dieser letzten Phase stattfindet.

Insgesamt verdeutlichen diese Rechnungen die hohe Bedeutung der Oberflächengeometrie für das Abtragsverhalten. Vor allem nahe der Schwelle können alleine die Veränderungen bei der Energieeinkopplung und der Wärmeleitung zu einer Reduktion der Bohrgeschwindigkeit um Größenordnungen führen. Gleichzeitig zeigen jedoch Experimente, dass das Verhalten bei höheren Leistungsdichten durch den Plasmaeinfluss erheblich komplizierter ist, wenngleich auch hier verschiedene Bohrregime identifiziert werden können. Da bei einfachen Versuchen die Abtragsrate häufig aus der zur Durchbohrung einer bestimmten Probendicke notwendigen Zeit bestimmt wird, können diese Experimente nur Aussagen über die mittlere Abtragsrate geben. Durch die Abhängigkeit der Tiefe in welcher der starke Abfall der Bohrgeschwindigkeit beobachtet wird von der Leistungsdichte [55] könnte dann unter Umständen der sprunghafte Anstieg der Abtragsrate bei höheren Pulsenergien fälschlicherweise als Veränderung des Abtragsmechanismus interpretiert werden [142, 180, 181].

### 5.2.3 Abtragsmechanismus

Die bisherigen Ergebnisse beruhen auf der Annahme eines thermischen Prozesses, bei dem die Abtragsrate nur von der Oberflächentemperatur abhängt. Die exponentielle Temperaturabhängigkeit des Dampfdrucks und damit der Abtragsrate ist zwar experimentell für niedrige Temperaturen gesichert und nach Kapitel 2.4 auch bis zum kritischen Punkt weitgehend gültig, ist aber mit Sicherheit nicht zu beliebig hohen Temperaturen extrapolierbar. Nach zahlreichen theoretischen und experimentellen Untersuchungen liegt vielmehr die Vermutung nahe, dass mit Annäherung an die kritische Temperatur in zunehmendem Maß eine Art spontaner Zerfall einsetzt, die so genannte Phasenexplosion (vgl. Kapitel 2.4 und Ref. [139–141, 172]). Für diesen Phasenübergang wird praktisch keine latente Wärme benötigt, so dass die Abtragsrate vor allem von der Gasdynamik des zerfallenen Materials abhängen dürfte. Dieser Vorgang ist aufgrund der nur unzureichend bekannten thermophysikalischen Einflussgrößen bislang nur schwer modellhaft zu erfassen. Dennoch soll auch an dieser Stelle mit einfacheren Mitteln eine Abschätzung des Einflusses eines solchen Zerfallsmechanismus versucht werden.

In Bild 5.14 sind neben der Abtragstiefe des bisherigen Modells auch noch diejenigen zweier dynamischer Extremfälle dargestellt. Bei der instantanen Phasenexplosion wurde angenommen, dass alles Material oberhalb der kritischen Temperatur von 8500 K sofort ablatiert und aus der Wechselwirkungszone entfernt wird. Dadurch steigt bei Pulsdauern im Bereich von 100 ps der Abtrag zwar erheblich an, fällt bei kürzeren Pulsen dafür aber umso schneller ab. Diese starke Abnahme ist darauf zurückzuführen, dass in diesen kurzen Zeiten die Energie nicht in tiefere Schichten diffundieren kann und somit nahezu vollständig mit dem Dampf entfernt wird. Dies führt daher auch zu einer erheblichen Reduktion der maximalen Schmelzdicken (vgl. Bild 5.15). Der andere Extremfall



**Bild 5.14:** Vergleich der Abtragsraten verschiedener thermischer Ablationsmechanismen für Aluminium. Neben der vom Dampfdruck bestimmten normalen Verdampfung wurden die Extremfälle der instantanen und der unendlich verzögerten Phasenexplosion (PE) untersucht.



**Bild 5.15:** Einfluss des Abtragsmechanismus auf die maximalen Schmelzfilmdicken bei verschiedenen Pulsdauern. Je länger die Verzögerung der Ablation ist, umso mehr Wärme diffundiert ins Material und erhöht somit das Schmelzaufkommen.

(verzögerte Phasenexplosion) geht davon aus, dass das Material oberhalb der kritischen Temperatur zwar ablatiert wird, jedoch erst nach einer Zeit, in der praktisch die gesamte dort absorbierte Energie an den darunter liegenden Festkörper weitergegeben wurde. Auch dies führt zu einer höheren Abtragsrate, die allerdings eine kaum erkennbare Abnahme bei Verkürzung der Pulsdauer aufweist. In diesem Fall könnte, nahezu unabhängig von der Pulsdauer, praktisch die gesamte eingebrachte Energie für den Abtrag genutzt werden. Durch die längere Energiediffusion steigt jedoch auch die Schmelzfilmdicke erheblich an. In Wirklichkeit wird der Abtrag auch für Temperaturen oberhalb des kritischen Punktes mit gewisser zeitlicher Verzögerung erfolgen, so dass die zu erwartenden Raten zwischen diesen beiden Extremfällen liegen dürften. Bemerkenswert ist jedoch, dass insbesondere im Hinblick auf das Schmelzaufkommen stets eine Sättigung zu ultrakurzen Pulsen hin zu erkennen ist, auch wenn diese bei unterschiedlich kurzen Pulsdauern auftreten kann. Dies bringt zum Ausdruck, dass der Prozess auf jeden Fall durch den Relaxationsmechanismus begrenzt wird, wobei dieser von dem Einfluss der Austriebsdynamik überdeckt sein kann. Da der genaue Ablauf der Ablation unter solchen extremen thermischen Bedingungen bislang nicht bekannt ist, soll im Folgenden als Ansatz zwischen den Extremfällen auch weiterhin die Abtragsrate ausschließlich aus dem Dampfdruck berechnet werden. Lediglich das Modell in Kapitel 6.2 kann durch Verwendung der QEOS-Zustandsgleichung den Übergang von normaler Verdampfung in explosionsartigen Zerfall beschreiben. Allerdings ist dann eine Trennung der Mechanismen aufgrund der Komplexität des Problems praktisch nicht mehr möglich.

# 6 Materialaustrieb

Nachdem im letzten Kapitel einige Grundlagen der Materialverdampfung erörtert wurden, werden sich die folgenden Abschnitte vor allem auf die Bedeutung des Materialaustriebs für den Bohrprozess mit kurzen Laserpulsen konzentrieren. Prinzipiell kann dabei zwischen der Dynamik des Materialdampfs sowie der dadurch angetriebenen Metallschmelze unterschieden werden.

# 6.1 Schmelzdynamik

Die Schmelzdynamik bei kurzen und ultrakurzen Pulsen wurde bislang theoretisch kaum untersucht. Durch die kurzen Wechselwirkungszeiten wird meist von einer erheblichen Reduktion der Schmelzentstehung ausgegangen, so dass der Schmelzaustrieb, im Gegensatz zu langen Millisekundenpulsen, bei solchen Pulsdauern kaum Einfluss auf die Prozesseffizienz hat. Dennoch haben die bisherigen Untersuchungen gezeigt, dass selbst bei Femtosekundenpulsen noch Schmelze entstehen kann [20]. Dies ist hier insofern besonders störend, da gerade durch die Verkürzung der Pulsdauer eine höhere Präzision erhofft wird, die durch Schmelzablagerungen an den Bohrungswänden oder als Grat nachhaltig vermindert wird. Im Hinblick auf die Entwicklung geeigneter Prozessstrategien zur Steigerung der Präzision ist also ein gewisses Verständnis der Schmelzdynamik notwendig, das durch die schlechte räumliche und zeitliche Zugänglichkeit experimentell nur schwer zu erlangen ist. Numerisch ist dies zwar möglich, stellt jedoch durch die hohe Prozessdynamik in Verbindung mit den stark nichtlinear gekoppelten Bewegungsgleichungen ungleich höhere Anforderungen an die Berechnungsalgorithmen als die Berechnung der Wärmeleitung selbst. Analytisch sind solche Fragestellungen nur noch durch starke Vereinfachungen erfassbar. Dennoch soll im Folgenden versucht werden, durch eine Kombination solcher einfacher und anschaulicher Modelle mit aufwändigeren numerischen Simulationen, einige grundlegende Besonderheiten der Schmelzdynamik beim Laserbohren zu verdeutlichen. Die Verbindung von Analytik und Numerik erlaubt dabei eine gewisse Bewertung der Aussagekraft der einfacheren Modelle bezüglich des Prozessablaufs.

### 6.1.1 Stationärer Schmelzfluss

Wie bei der Verdampfung kann auch die Berechnung des Schmelzaustriebs im einfachsten Fall durch eine Betrachtung der Leistungsbilanz erfolgen [77, 182]. Dazu wird die Erhaltung der Leistungsdichte in Gleichung (5.6) um einen weiteren Term ergänzt, der den Anteil des in Form von Schmelze abgetragenen Materials beschreibt:

$$AE = \rho u_{\rm m} \left\{ L_{\rm m} + c_{\rm p} \left[ \frac{1}{2} (T_{\rm s} + T_{\rm m}) - T_{\infty} \right] \right\} + \rho u_{\rm v} \left\{ L_{\rm m} + L_{\rm v} + c_{\rm p} (T_{\rm s} - T_{\infty}) \right\}.$$
(6.1)



**Bild 6.1:** Schematische Darstellung der geometrischen Annahmen des Kolbenmodells.

Als Temperatur der Schmelze wurde hierbei ein Mittelwert aus der Oberflächentemperatur  $T_s$  und der Schmelz-

temperatur  $T_m$  angenommen. Die Geschwindigkeit  $u_m$ , mit welcher der Bohrgrund durch den Schmelzaustrieb fortschreitet, lässt sich zunächst nur durch Lösen der Bewegungsgleichungen ermitteln. Aus vereinfachenden Annahmen bezüglich der Geometrie der Strömung, wie bei dem in Bild 6.1 skizzierten Kolbenmodell, kann jedoch über die Massenkontinuität ein Zusammenhang zwischen  $u_m$ , dem Lochdurchmesser  $d_h$ , der Schmelzfilmdicke  $d_m$  und der Fließgeschwindigkeit  $u'_m$  am Bohrungsrand gefunden werden:

$$u_{\rm m} = \frac{4d_{\rm m}(d_{\rm h} + d_{\rm m})}{d_{\rm h}^2} u_{\rm m}'.$$
 (6.2)

Als Lochdurchmesser kann dabei in erster Näherung der Fokusdurchmesser  $d_f$  verwendet werden. Die Dicke der Schmelze wird aus einer eindimensionalen Abschätzung nach Gleichung (5.3) mit der Ablationsgeschwindigkeit  $u = u_v + u_m$  ermittelt. Dies ist sicher eine sehr grobe Annahme, da die Schmelzfilmdicke lokal stark variieren wird und nicht nur durch die Temperaturverteilung sondern auch durch die Schmelzströmung beeinflusst wird. Die Austriebsgeschwindigkeit  $u'_m$  wird schließlich aus der Energieerhaltung für eine inkompressible Strömung abgeleitet

$$u'_{\rm m} = \sqrt{\frac{2\Delta p}{\rho}} \,, \tag{6.3}$$

wobei als antreibender Druckunterschied  $\Delta p$  die Hälfte des Dampfdrucks angenommen wird. Letztere Annahme kann dadurch gerechtfertigt werden, dass der Dampfdruck normalerweise in einem Bereich bestimmt wird, in dem die Anzahl der in positiver bzw. negativer Raumrichtung bewegten Moleküle gleich ist, so dass der Impulsübertrag in einer dieser Richtungen nur dem halben Druck entspricht. Im Nichtgleichgewichtszustand an der Verdampfungsoberfläche existiert dagegen im Idealfall nur die von der Oberfläche weg gerichtete Komponente, der somit der Impuls des halben Dampfdrucks zugeordnet wird. Eine etwas rigorosere Behandlung der Knudsen-Randschicht unter Berücksichtigung von zurückgestreuten Teilchen ergibt einen Rückstoßimpuls von etwa 56% des Dampfdrucks wenn die Teilchen jenseits dieser Nichtgleichgewichtszone mit Schallgeschwindigkeit abströmen [174, 183]. Diese Annahmen verdeutlichen die starken Vereinfachungen, die notwendig sind, um ein solches Stömungsproblem überhaupt noch halbanalytisch beschreiben zu können.

Aus den Gleichungen (6.1) bis (6.3) und Gleichung (5.3) können die Abtragsgeschwindigkeiten durch Verdampfung  $u_v$  und Schmelzaustrieb  $u_m$  bestimmt werden. Um diese Geschwindigkeiten mit experimentellen Ergebnissen vergleichen zu können, wurde in Bild 6.2 angenommen, dass die Abtragsdauer der Pulsdauer und die Absorptivität mit A = 0.15 dem Wert für Aluminium nahe der Verdampfungstemperatur entsprechen. Trotz der starken Vereinfachungen des Modells wird in diesem Fall die experimentelle Abhängigkeit der Lochtiefe von der Energiedichte vergleichsweise gut wiedergegeben. Allerdings kann das Modell die scharfe Abtragsschwelle der Messung bei rund  $5 \text{ J/cm}^2$  nicht erklären. Der geringere Schmelzaustrieb bei höheren Leistungsdichten ist nach Bild 6.3 in erster Linie eine Folge der Abnahme der Schmelzdicke durch die starke Verdampfungskühlung der Oberfläche. Nach den Berechnungen müsste der Abtrag oberhalb von etwa  $10 \text{ J/cm}^2$  verdampfungsdominiert sein während sich im Experiment noch bis zu Energiedichten von  $30 \text{ J/cm}^2$  praktisch das gesamte aus dem Loch ver-



**Bild 6.2:** Vergleich des Pulsabtrags nach dem stationären Kolbenmodell (oben) mit experimentellen Messungen für Aluminium ( $\tau_{\rm H} = 13$  ns,  $d_{\rm f} = 90\,\mu{\rm m}$ ). Die gemessenen Volumina des Abtrags und des Grats (unten) verdeutlichen eine stärkere Gratbildung infolge der Schmelzdynamik bei niedrigen Energiedichten. Laut Theorie müsste jedoch bereits ab etwa 10J/cm<sup>2</sup> die Verdampfung (gestrichelte Kurve) gegenüber dem Schmelzaustrieb (gepunktet) dominieren.





**Bild 6.3:** Schmelzdicke beim Abtragen von Aluminium und Eisen im stationären Grenzfall. Mit zunehmender Leistungsdichte verringert sich die Dicke, da die Verdampfungskühlung an der Oberfläche zunimmt. Insgesamt ist die Aufschmelzung bei Eisen durch den höheren Schmelzpunkt erheblich geringer als bei Aluminium.

**Bild 6.4:** Maximale Fließgeschwindigkeit der Schmelze nach dem stationären Kolbenmodell. Die gestrichelten Linien zeigen eine Abschätzung nach Gleichung (6.4) für die Mindestgeschwindigkeit, die zur Tropfenablösung notwendig ist. Aufgrund der dünneren Schmelzfilme wird diese bei Eisen erst bei höheren Leistungsdichten erreicht als bei Aluminium.

drängte Material als Grat ablagert. Selbst bei höheren Energiedichten könnte der Abtrag noch schmelzdominiert sein, wenn angenommen wird, dass sich die Schmelze als Tropfen ablöst. Letzteres könnte nachträglich nicht von einem Abtrag durch Verdampfung unterschieden werden. Eine einfache Abschätzung für die Fließgeschwindigkeit  $u'_{m,min}$ , die notwendig ist, um entgegen der Oberflächenspannung  $\sigma$  einen Tropfen bilden zu können, erhält man aus einer Bilanz von kinetischer Energie der Schmelze und Oberflächenenergie des Tropfens:

$$u'_{\rm m,min} = \sqrt{\frac{12\sigma}{\rho d_{\rm m}}}.\tag{6.4}$$

Die Berechnungen in Bild 6.4 zeigen, dass bei Aluminium absorbierte Leistungsdichten über rund 10<sup>7</sup> W/cm<sup>2</sup> zu einer Tropfenablösung führen könnten. Umgerechnet auf das Experiment mit einer Pulsdauer von 13 ns würde dies eine Energiedichte von etwa 0.9 J/cm<sup>2</sup> bedeuten, was erheblich unter den experimentell verwendeten Werten läge. Ein solcher Tropfen hätte eine Mindestgeschwindigkeit von ca. 20 m/s und liegt damit zwar etwas über den fotografisch bestimmten Geschwindigkeiten langsamer Tropfen aber zumindest in einer ähnlicher Größenordnung [41–45]. Es fällt auf, dass die Schmelze nach diesem Modell sehr hohe Fließgeschwindigkeiten von einigen 100 m/s erreichen könnte. Insgesamt scheint dieses einfache Modell einen ersten Anhaltspunkt für die zu erwartenden Größenordnungen zu geben, es kann aber z. B. die Abtragsschwelle oder den Übergang in einen durch die Verdampfung dominierten Abtrag nur mäßig beschreiben. Ursache hierfür könnte die Vernachlässigung von Erwärmung und Abkühlung sowie der Schmelzbeschleunigung sein.

#### 6.1.2 Schmelzbeschleunigung

Das stationäre Kolbenmodell kann vergleichsweise einfach zu einem transienten verallgemeinert werden, wenn anstelle von Gleichung (5.3) ein zeitabhängiges Wärmeleitungsmodell zur Bestimmung der Oberflächentemperatur und der Schmelzdicke verwendet wird. Im Folgenden wird dazu die numerische Lösung des Zwei-Temperatur-Modells verwendet, das gleichzeitig Abschätzungen für ultrakurze Pulsdauern erlaubt. Zusätzlich soll die Schmelzbeschleunigung in vereinfachter Form berücksichtigt werden. Bei Vernachlässigung von Reibung und Geschwindigkeitsgradienten ist die Beschleunigung proportional zum Druckgradienten

$$\frac{\partial u'_{\rm m}}{\partial t} = \frac{\partial p}{\rho \partial z} \approx \frac{\Delta p}{\rho \Delta h} \,, \tag{6.5}$$

wobei dieser als Quotient aus der Druckdifferenz  $\Delta p$  und einer charakteristischen Länge  $\Delta h$ , auf der dieser Abfall auftritt, abgeschätzt wurde. Numerische und analytische Rechnungen zeigen, dass die Viskosität tatsächlich kaum einen Einfluss auf den Schmelzfluss beim Laserbohren haben dürfte und auch die Oberflächenspannung meist erheblich geringer als der Ablationsdruck ist, der durchaus Werte von einem Kilobar erreichen und übertreffen kann [184]. Die Annahme einer inkompressiblen, durch einen konstanten Druckgradienten beschleunigten Strömung lässt sich dagegen prinzipiell nicht mit den strengen Geometrievorgaben verbinden. Dennoch dürfte Gleichung (6.5) zumindest die Größenordnung der Beschleunigung wiedergeben. Die zeitliche Entwicklung der Fließgeschwindigkeit bei konstanter Absorption einer Leistungsdichte von  $10^8 \text{ W/cm}^2$  ist in Bild 6.5 dargestellt. Deutlich ist eine ausgedehnte Beschleunigungsphase zu erken-



**Bild 6.5:** Transiente Entwicklung der Fließgeschwindigkeit der Aluminiumschmelze nach dem transienten Kolbenmodell. Eine Verringerung des beschleunigenden Druckgradienten bei größeren charakteristischen Fließstrecken  $\Delta h$  führt zu einer längeren Beschleunigungsphase. Der Vergleich mit den FEM-Rechnungen (Symbole) zeigt eine gute Übereinstimmung, wenn für  $\Delta h$  etwa der halbe Fokusradius angenommen wird. nen, die umso länger ausfällt, je geringer der Druckgradient bzw. je größer die charakteristische Länge  $\Delta h$  ist. Der Vergleich mit den im nächsten Abschnitt vorgestellten Finite-Element-Rechnungen zeigt eine gute Übereinstimmung der maximalen Geschwindigkeiten, falls  $\Delta h$  in der Größenordnung des halben Strahlradius gewählt wird. Da in Gleichung (6.5) der Lochdurchmesser nicht unmittelbar eingeht, unterscheiden sich anfangs die Fließgeschwindigkeiten  $u'_m$  bei verschiedenen Durchmessern aber gleicher charakteristischer Länge  $\Delta h$  kaum. Das Beschleunigungsverhalten würde z. B. bei Lochdurchmessern von 40 bzw. 100 µm erst bei Schmelzgeschwindigkeiten von über 100 m/s voneinander abweichen. Diese Differenz ist auf die dann unterschiedlich starke Kühlung der Oberfläche infolge der verschiedenen Vorschubgeschwindigkeiten um des Bohrgrunds zurückzuführen. Mit zunehmender Pulszahl bzw. Lochtiefe wird der Druckgradient bei nahezu konstantem Dampfdruck immer geringer und damit auch die Beschleunigung. Erst nach vergleichsweise langen Beschleunigungszeiten von teilweise einigen 100 ns würden demnach Geschwindigkeiten in der Größenordnung des stationären Austriebs erreicht. Da die Verdampfung gemäß Bild 4.5 aber bereits wenige Nanosekunden nach Ende des Laserpulses abklingt und dann der beschleunigende Rückstoßdruck fehlt, könnten diese hohen Werte für kürzere Pulse gar nicht erreicht werden. In diesem Fall erlangt die Schmelze kurz nach Pulsende ihre Maximalgeschwindigkeit, die sie anschließend durch die geringen Reibungsverluste nahezu bis zum Zeitpunkt der Erstarrung beibehalten würde. Die so maximal erzielbaren Geschwindigkeiten liegen wie in Bild 6.6 erheblich unter den stationären Werten. Auch wenn der Schmelzfluss bis zum Erstarrungszeitpunkt anhält, so beträgt die während eines Pulses zurückgelegte



0.6 AI 1 J/cm<sup>2</sup> 0.5 Fließstrecke / in µm d, = 100 µm 0.4 ⊿h = 25 um 0.3 0.2 0.1 A H = 0.5 J / cm0.0 10<sup>-11</sup> 10<sup>-10</sup> 10<sup>-12</sup> 10<sup>-9</sup> 10<sup>-8</sup> 10<sup>-7</sup> Pulsdauer  $\tau_{H}$  in s

**Bild 6.6:** Maximale Fließgeschwindigkeit der Schmelze in Abhängigkeit von der Pulsdauer nach dem transienten Kolbenmodell. Insgesamt sind die erreichten Werte infolge der langsamen Schmelzbeschleunigung erheblich geringer als bei der stationären Abschätzung in Bild 6.4.

**Bild 6.7:** Berechnete Fließstrecke der Schmelze je Laserpuls als Funktion der Pulsdauer. Die Strecken sind derart gering, dass die Schmelze im Bohrgrund nicht innerhalb eines einzelnen Pulses vollständig ausgetrieben werden kann.

Fließstrecke je nach Energiedichte bestenfalls wenige Mikrometer (vgl. Bild 6.7). Der Schmelzaustrieb bei ultrakurzen Pulsen ist daher wohl eher kumulativer Natur, so dass die Schmelze nur im Laufe von vielen aufeinander folgenden Pulsen makroskopische Strecken zurücklegen kann. Der Schmelzfluss ist dabei umso geringer je kleiner die Beschleunigung ist, also je niedriger die Energiedichte und je tiefer das Loch ist. Der Grat am Bohrungseintritt dürfte vor allem während der ersten Pulse entstehen, was auch mit experimentellen Beobachtungen übereinstimmt [179, 185].

Aus dem Vergleich der stationären Abtragssimulation in Bild 6.2 mit dem Ergebnis des transienten Kolbenmodells in Bild 6.8 können einige wichtige Konsequenzen der Materialerwärmung und der Schmelzbeschleunigung für den Prozess abgeleitet werden. Während sich bei hohen Leistungsdichten prinzipiell ein ähnlicher Verlauf der Abtragsraten ergibt, sind die Abweichungen nahe der Schwelle deutlicher. Im Gegensatz zum stationären Fall zeigt die transiente Berechnung der Aufwärmung ein deutliches Schwellverhalten vergleichbar mit dem in Bild 5.4 für den Fall ohne Schmelzaustrieb. Ursache hierfür sind wieder die relativ hohen Wärmeleitungsverluste beim Erwärmen mit kurzen Laserpulsen und geringer Leistungsdichte. Auch wenn die nach dem transienten Kolbenmodell berechnete Abtragsschwelle nun etwa dem experimentellen Wert entspricht, so zeigt das Experiment in diesem Bereich bereits einen deutlich höheren Schmelzaustrieb, der sich vor allem in der Gratbildung äußert. Dennoch ist der berechnete Schmelzaustrieb immerhin erheblich höher als beim stationären Fall, hauptsächlich deswegen weil die transiente Simulation auch den Austrieb nach Pulsende bis zur voll-



**Bild 6.8:** Mit dem transienten Kolbenmodell berechnete Abtragstiefen je Puls (oben) im Vergleich zum Experiment ( $\tau_{\rm H} = 13$  ns,  $d_{\rm h} = 90 \,\mu$ m,  $\Delta h = 25 \,\mu$ m). Die gemessenen Volumina von Abtrag und Grat (unten) lassen im Einklang mit der Simulation einen Übergang von schmelz- zu verdampfungsdominiertem Abtrag oberhalb von rund  $30 \,\text{J/cm}^2$  vermuten.

ständigen Erstarrung berücksichtigt. Dadurch verschiebt sich auch die Leistungsdichte, ab welcher der Abtrag verdampfungsdominiert ist, zu höheren Werten und liegt nun etwa dort, wo experimentell eine Sättigung des Gratvolumens bei gleichzeitiger Zunahme des Abtrags zu erkennen ist. Außerdem entsteht nach dem transienten Modell der Abtrag unmittelbar oberhalb der Schwelle vor allem durch Verdampfung, da hier der Dampfdruck nicht ausreicht, um die Schmelze während des Pulses zu beschleunigen. Diese Phase erstreckt sich jedoch nur über einen kleinen Leistungsdichtebereich und ist aufgrund der linearen Skalierung in Bild 6.8 nicht zu erkennen. Auch wenn insgesamt das stationäre Modell die Absolutwerte der Ablation besser beschreibt, so zeigt die transiente Berechnung eine bessere Übereinstimmung bei der Abtragsschwelle und dem Übergang vom schmelz- zum verdampfungsdominierten Abtrag. Aufgrund der starken Vereinfachungen in den Modellen können beide ohnehin nur Abschätzungen für die Bohrgeschwindigkeiten geben, so dass die Absolutwerte nicht überbewertet werden sollten. Das Experiment verdeutlicht allerdings, dass beide Ansätze, besonders jedoch das stationäre Modell, den Schmelzaustrieb an der Schwelle immer noch stark unterschätzen. Vermutlich sind hierfür geometrische Einflüsse verantwortlich, die von den analytischen Modellen nicht erfasst werden. So dürfte z.B. in den Randbereichen des radial nach außen abnehmenden Leistungsdichteprofils eines gaußförmigen Laserstrahls erheblich mehr Schmelze entstehen als dies bei räumlicher Mittelung der Energieverteilung der Fall ist.

### 6.1.3 Geometrische Einflüsse

In diesem Abschnitt soll geklärt werden, inwieweit die räumlichen Unterschiede bei der Leistungsdichte und der Schmelzdicke den experimentell beobachteten, gegenüber den analytischen Modellen höheren Schmelzaustrieb nahe der Abtragsschwelle erklären können. Obwohl das kommerzielle Fluiddynamik-Programm FIDAP von sich aus eigentlich nur bedingt für die Simulation des Laserbohrens geeignet ist, wurde es dennoch hierfür verwendet, da es bereits am IFSW vorhanden war und zudem auch die meisten Konkurrenzprodukte keine wesentlichen Vorteile versprachen. Die Beschreibung der Energieeinkopplung, des Abdampfvorgangs und des beschleunigenden Dampfdrucks erforderte allerdings die Einbettung von teilweise direkt in die Matrixgleichungen der finiten Elemente eingreifenden Unterprogrammen [184]. Da die Software jedoch nicht in der Lage ist, gleichzeitig die Strömung der inkompressiblen Schmelze und die des sich ausbreitenden kompressiblen Metalldampfs zu beschreiben, musste auf letztere verzichtet werden. Die Materialeigenschaften der kondensierten Phasen wurden durch stark temperaturabhängige Funktionen für die Enthalpie, die Wärmeleitfähigkeit und die Vis-

kosität berücksichtigt. Die kontinuierliche Beschreibung von Festkörper und Schmelze erforderte dabei eine vergleichsweise sprunghafte Änderung dieser Werte um mehrere Größenordnungen beim Aufschmelzen. Dies führte zu erheblichen numerischen Konvergenzproblemen, so dass nur der Austrieb bei mäßiger Prozessdynamik nahe der Abtragsschwelle untersucht werden konnte. Aus ähnlichem Grund musste auch ein konstanter Wert für die Oberflächenspannung verwendet werden. Dennoch können mit diesem Ansatz einige ergänzende Aspekte zum Einfluss der räumlichen Verteilung von Energieeinkopplung und Schmelze auf das Austriebsverhalten abgeleitet werden, die im Folgenden diskutiert werden sollen.

Bild 6.9 zeigt die zeitliche Veränderung der Oberfläche bei Absorption eines radial gaußförmigen Laserpulses von 13 ns Dauer, 40 µm Durchmesser und  $Q = 17 \mu$ J Pulsenergie. Dabei wurde in Anlehnung an experimentelle Ergebnisse die zeitliche Pulsform durch



**Bild 6.9:** Zeitliche Entwicklung der Oberflächengeometrie bei Absorption eines radial gaußförmigen Laserpulses ( $\tau_{\rm H} = 13$  ns,  $d_{\rm f} = 40$  µm, Q = 17 µJ) nach dem FEM-Modell. Die Konturlinien markieren die Isothermen für die Siedetemperatur  $T_{\rm b}$  und die Schmelztemperatur  $T_{\rm m}$ . Die Vektoren geben Richtung und Betrag der Fließgeschwindigkeit im schmelzflüssigen Bereich an.

den Ausdruck

$$E(r,t) = 2.45\hat{E}\exp\left(-8\frac{r^2}{d_{\rm f}^2}\right)\frac{t}{\tau_{\rm H}}\exp\left(1-2.45\frac{t}{\tau_{\rm H}}\right)$$
(6.6)

angenähert [179, 184]. Nach 15 ns liegt die maximale Oberflächentemperatur zwar deutlich über der Siedetemperatur, der Abtrag ist jedoch aufgrund der in diesem Fall verwendeten niedrigen Energiedichte sehr gering. Obwohl die Schmelze zu diesem Zeitpunkt bereits mit einer Geschwindigkeit von bis zu einigen 10 m/s fließt, ist noch kaum ein Austrieb zu erkennen. Die größte Beschleunigung entsteht an den Stellen mit dem höchsten Druck- bzw. Temperaturgradienten also etwa beim halben Strahlradius. Da die Schmelze in weiter außen gelegenen Bereichen langsamer abfließt, beginnt dort aus Kontinuitätsgründen eine Aufwölbung der Oberfläche. Im weiteren Verlauf kühlt die Oberfläche bereits ab, so dass die Verdampfung schnell abklingt und damit auch die Schmelzbeschleunigung. Nach Bild 6.10 steigt allerdings die Schmelzfilmdicke durch die verzögerte Wärmeleitung noch weiter an. Sie erreicht im Kraterzentrum nach rund 100 ns ein Maximum und fällt dann bis zur Erstarrung nach etwa 200 ns kontinuierlich ab. Bild 6.11 verdeutlicht, dass die Schmelze während dieser gesamten Zeit weiter ausgetrieben wird. Dabei bleibt ihre Maximalgeschwindigkeit vergleichsweise lange relativ konstant auf dem kurz nach Pulsende erreichten Wert von rund 60 m/s. Die Schmelze wird auf dieser Zeitskala weder von der Oberflächenspannung noch von der Viskosität deutlich verlangsamt [184]. Erst mit einsetzender Erstarrung und damit ansteigender Viskosität kommt der Schmelzfluss zum Erliegen. In dem hier gezeigten Fall erstarrt dabei der zentrale Bereich etwas früher als der am Rand entstandene Grat. Letzterer führt einerseits aufgrund seiner Geometrie zu einem Wärmestau und gleichzeitig strömt hier immer wieder warme Schmelze aus dem Inneren des Lochs nach. In Bild 6.11 ist auch die zeitliche Entwicklung des verdampften Volumens bzw. des Gratvolumens dargestellt. Deutlich ist zu erkennen, dass die Verdampfung bereits nach etwa 20 ns beendet



**Bild 6.10:** Transienter Verlauf der maximalen Temperatur und der Schmelzfilmdicke im Zentrum der Vertiefung für den in Bild 6.9 gezeigten Prozess.



**Bild 6.11:** Zeitliche Entwicklung der maximalen Fließgeschwindigkeit und der verdampften bzw. verdrängten Volumina des in Bild 6.9 dargestellten Abtragsprozesses.

ist während der Schmelzaustrieb noch fast 200 ns länger andauert, so dass bei dieser geringen Pulsenergie der größte Teil des Volumenaustrags durch die Schmelzdynamik erbracht wird.

Insgesamt ist der Lochdurchmesser bei Leistungsdichten nahe der Abtragsschwelle deutlich geringer als der Strahldurchmesser. Wie Bild 6.12 jedoch zeigt, steigen erwartungsgemäß sowohl der Durchmesser als auch das Gratvolumen mit zunehmender Pulsenergie an. Letzteres sollte dabei nur als Obergrenze angesehen werden da es prinzipiell möglich ist, dass sich auch ein Teil der Schmelze in Form von kleinen Tröpfchen ablöst. Leider ist die FIDAP Software nicht in der Lage, eine solche Tropfenbildung zu simulieren. Hierfür müsste vor allem die Entstehung von Oberflächeninstabilitäten nachgebildet werden [186]. Trotzdem wurde versucht, den Einfluss der Tropfenablösung durch eine einfache Abschätzung zu bestimmen. Dabei wurde angenommen, dass die Schmelze die Oberfläche verlässt, wenn ihre Normalgeschwindigkeit 10 m/s überschreitet, was etwa der Größenordnung des Werts der analytischen Betrachtung in Bild 6.4 entspricht. Wie die gestrichelte Kurve in Bild 6.12 zeigt, führt diese Annahme lediglich zu einer Abnahme des Gratvolumens, während im Inneren der Vertiefung keine wesentliche Veränderung zu erkennen ist. Dies liegt daran, dass nur am Grat durch die Richtungsänderung des Schmelzflusses die Normalkomponente der dort vergleichsweise hohen Geschwindigkeit den definierten Grenzwert überschreitet. Die Oberflächenspannung hat zwar prinzipiell einen Einfluss auf die Kontur des Grats, beeinflusst nach diesen Berechnungen jedoch den Austrieb selbst nur geringfügig [184]. Wegen numerischer Konvergenzprobleme konnte dabei allerdings die Temperaturabhängigkeit der Oberflächenspannung nicht berücksichtigt werden. Andere Autoren betonen für deutlich geringere Pulsenergien von wenigen uJ die Bedeutung des Marangoni-Effekts infolge der Temperaturabhängigkeit der Oberflächenspannung [40]. In diesem Fall wäre der dann sehr geringe Ablationsdruck gegenüber der Oberflächenspannung beim Schmelzaustrieb vernachlässigbar.



**Bild 6.12:** Simulierte Bohrlochprofile für zwei unterschiedliche Pulsenergien. Sowohl der Durchmesser der Vertiefung als auch das Gratvolumen steigen mit zunehmender Laserenergie an. Für Q = 0.2 mJ wurde zusätzlich der Fall von Verdampfung ohne Schmelzaustrieb (gepunktet) und eine Abschätzung des Einflusses von Tropfenablösung (gestrichelt; Erklärung siehe Text) eingezeichnet.

		FEM			Kolbenmodell		
Pulsdauer $ au_{ m H}$	ns	12	25	50	12	25	50
Max. Oberflächentemp. <i>T</i> <sub>s,max</sub>	Κ	7270	5920	4780	7400	6090	5060
Max. Schmelzdicke $d_{m,max}$	μm	2.3	2.6	3.0	2.8	3.6	4.6
Max. Fließgeschwindigkeit $u'_{m,max}$	m/s	61	41	20	52	35	18
Erstarrungszeitpunkt	ns	290	350	425	160	260	470
Abtragstiefe $\Delta z$	μm	1.4	1.8	2.0	2.2	2.7	2.9
Verdampfter Anteil $V_{\rm v}/V_{\rm m}$		6%	3%	1.5%	16%	9%	5%

**Tabelle 6.1:** Vergleich charakteristischer Prozessgrößen der FEM-Simulation mit den Ergebnissen des transienten Kolbenmodells für  $AH = 2.7 \text{ J/cm}^2$ . Nach den experimentellen Ergebnissen von Ref. [179] wird für  $\tau_{\rm H} = 13$  ns eine Lochtiefe von 1.8 µm erwartet.

Die Bedeutung der Schmelzfilmgeometrie und des Strahlprofils für die Austriebsdynamik soll anhand eines Vergleichs der analytischen Abschätzungen mit der numerischen Simulation untersucht werden. In Bild 6.5 wurde bereits gezeigt, dass die Maximalwerte der Fließgeschwindigkeiten beider Ansätze vergleichbar sind, wenn im analytischen Modell als charakteristische Länge für den Druckabfall der halbe Strahlradius angenommen wird. In Tabelle 6.1 sind einige charakteristische Ergebniswerte des transienten Kolbenmodells den FEM-Berechnungen gegenübergestellt. Es zeigt sich, dass vor allem die maximalen Oberflächentemperaturen und Fließgeschwindigkeiten durchaus vergleichbar sind. Die Geometrie wirkt sich dagegen deutlicher auf die Schmelzfilmdicken und den Erstarrungsvorgang aus. Dadurch enstehen letztendlich auch größere Unterschiede im Gesamtabtrag, der nach dem FEM-Modell eher geringer ist. Dies ist dadurch zu begründen, dass die Näherung eines idealen zylindrischen Lochs mit radial konstanter Abtragsrate am Bohrgrund beim analytischen Ansatz nicht mit der tatsächlichen ungleichmäßigen Lochgeometrie übereinstimmt. Durch die räumliche Mittelung der Leistungsdichte überschätzt das Kolbenmodell vor allem den verdampften Anteil erheblich im Vergleich zur numerischen Simulation. Nach diesen Ergebnissen ist also der relative Anteil des in schmelzflüssiger Form abgetragenen Volumens deutlich höher, wenn die geometrischen Einflüsse berücksichtigt werden. Eine genauere Analyse der Schmelzdynamik ist jedoch auch mit diesem Modell wegen der numerischen Instabilitäten bei höheren Leistungsdichten und dem Fehlen der dampfförmigen Phase nicht möglich. Die Vernachlässigung von letzterer erwies sich als besonders hinderlich bei der Berechnung des Austriebs aus tieferen Löchern mit repetierenden Pulsen. Da der Dampfdruck durch die schnelle Abkühlung kurz nach Pulsende abklingt, fehlt ohne Berücksichtigung der Dampfausbreitung von da an der Gegendruck auf die Schmelze an den Wänden. Dieser ist aber notwendig, um ein nachträgliches Zufließen der Bohrung zu verhindern [184]. Zumindest für die Modellierung des Schmelzaustriebs beim Laserbohren muss also ein Ansatz gefunden werden, der gleichzeitig auch die Gasdynamik beschreiben kann.

# 6.2 Einfluss der Gasdynamik und des Plasmas

In den abschließenden Abschnitten dieser Arbeit werden einige erste Ergebnisse eines ganzheitlichen Abtragsmodells diskutiert. Es basiert auf der Software PARCIPHAL, das den so genannten CIP-Algorithmus in Verbindung mit einer Zustandsgleichung verwendet, um hochdynamische Strömungsprobleme vergleichsweise stabil erfassen zu können [27, 28, 187]. Auch wenn dieses Programm inzwischen kommerziell erhältlich ist, so befindet es sich trotzdem noch weitgehend im Entwicklungsstadium und ist nicht mit professionellen Simulationswerkzeugen zu vergleichen. Daher steht im Folgenden nicht nur die Berechnung der Laserablation selbst, sondern auch die Bewertung dieses Ansatzes im Hinblick auf zukünftige Potenziale und mögliche Grenzen im Vordergrund. Als einziges der in dieser Arbeit verwendeten Modelle ist es prinzipiell in der Lage, auch die Gasdynamik und damit den Plasmaeinfluss beschreiben zu können.

Die PARCIPHAL-Software verwendet den gleichen hydrodynamischen Ansatz für alle auftretenden Materialphasen. Um trotz der großen physikalischen Unterschiede zwischen den kondensierten Zuständen und dem inkompressiblen Dampf eine stabile Konvergenz zu erreichen, werden in diesem Ansatz die Erhaltungsgleichungen für Masse, Impuls und Energie jeweils in einen Advektions- und einen Nichtadvektionsteil aufgespalten, die nacheinander getrennt gelöst werden [27, 28]. Dies ermöglicht den Einsatz von numerischen Algorithmen, die auf die jeweilige Differentialgleichungsart der beiden unterschiedlichen Teile optimiert sind. Die Advektionsphase konzentriert sich auf die Diffusion, während in den anderen Gleichungen die Quellterme erfasst werden. Die Numerik ist dadurch sowohl für die relativ inkompressible Schmelze bzw. den Festkörper als auch für die hochkompressible Gasphase numerisch stabil. Nachteilig ist jedoch vor allem, dass dieses Verfahren streng genommen nicht konservativ ist, d. h. dass numerische Diskretisierungsfehler zu einem Verlust von Masse oder Energie führen können. Die ganzheitliche Beschreibung aller Materialzustände ist einerseits sehr günstig zur Beschreibung von stark temperatur- oder dichteabhängigen Werkstoffeigenschaften und Phasenübergängen, erfordert gleichzeitig jedoch auch eine kontinuierliche Modellierung aller thermophysikalischen Größen und Einflussfaktoren über mehrere Größenordnungen der Dichte und Temperatur. Während dies für die meisten thermophysikalischen Materialeigenschaften durch das in Kapitel 2 vorgestellte QEOS-Modell

ermöglicht wird, muss zunächst z. B. auf die Einbeziehung der Oberflächenspannung verzichtet werden, da für diese keine Werkstoffdaten vorlagen, die den notwendigen Bereich der Temperatur, Dichte und Zusammensetzung umfasst hätten. Das Zustandsgleichungsmodul von PARCIPHAL verwendet eine analytische Näherung der OEOS-Zustandsgleichung [188]. Die Transporteigenschaften werden dabei zunächst nur stark vereinfacht erfasst. Aus diesem Grund wurden in dieser Arbeit die in Kapitel 2.2 vorgestellten Abhängigkeiten für die Wärmeleitfähigkeit, die Viskosität und die optischen Eigenschaften gesondert über Unterprogramme integriert. Da in einigen Untersuchungen festgestellt wurde, dass die elastisch-plastische Verformung des Festkörpers einen hohen Einfluss auf das Abtragsverhalten haben kann [28], wurde ein entsprechendes Zusatzmodul für die Software erworben und verwendet. Die Strahlpropagation und Absorption ist dagegen nur in stark vereinfachter Weise einbezogen worden. Da aufgrund der kontinuierlichen Beschreibung eine genaue Festlegung der Werkstoffoberfläche nicht möglich ist, führt eine näherungsweise Berücksichtigung der Fresnel-Gleichungen meist auf eine sehr unregelmäßige und instabile Energieeinkopplung, so dass darauf verzichtet wurde. Statt dessen wurde die einfallende Laserstrahlung nur senkrecht zur anfänglichen Oberfläche von Zelle zu Zelle propagiert, wobei zwar die zurück reflektierten Anteile nach Gleichung (3.9) berechnet, jedoch anschließend nicht weiter verfolgt wurden. Eine verbesserte Beschreibung der Energieeinkopplung wäre durch ein kontinuierliches Modell möglich, wie z. B. durch das FDTD-Verfahren aus Kapitel 3.2. Dieses wurde bislang jedoch noch nicht in das PARCIPHAL-Modell integriert. Außerdem müsste zur Beschreibung von tieferen Bohrlöchern ein adaptives Rechennetz verwendet werden, das als Modul zusätzlich erworben werden kann. In dieser Arbeit wurde jedoch darauf verzichtet, da zunächst erst einmal die Überprüfung der prinzipiellen Eignung des Verfahrens im Vordergrund stand, so dass nur der Abtrag einer ebenen Oberfläche durch den ersten Laserpuls untersucht wurde. Aufgrund numerischer Konvergenzprobleme bei Pulsdauern unter 1 ns wurde zusätzlich die Zwei-Temperatur-Wärmeleitung nicht implementiert.

In Bild 6.13 ist die mit PARCIPHAL berechnete zeitliche Entwicklung des Bohrlochs und der Dampfausbreitung am Beispiel eines Pulses von 17 ns Dauer dargestellt. Die einzelnen Momentaufnahmen zeigen dabei auf der linken Seite die lokale Temperatur zusammen mit den Konturen der Oberfläche und der Materialdampfgrenze und auf der rechten Seite den Druck. Als Grenze zwischen kondensierter Phase und Dampf wurde vereinfachend die Bedingung  $\rho = 1 \text{ g/cm}^2$  verwendet. Der Dampf breitet sich näherungsweise hemisphärisch mit einer Spitzengeschwindigkeit von ca. 6750 m/s aus. Die Maximaltemperatur an der sich in die ungestörte Umgebungsatmosphäre ausbreitenden Schockwelle beträgt etwa 15500 K. Die Druckdarstellung verdeutlicht zudem die Aus-



**Bild 6.13:** Zeitliche Entwicklung des Abtrags und der Dampfexpansion beim Bohren von Aluminium nach dem PARCIPHAL-Modell (Q = 0.2 mJ,  $\tau_{\text{H}} = 17 \text{ ns}$ ,  $d_{\text{f}} = 40 \,\mu\text{m}$ ). Auf der linken Seite jeder Momentaufnahme ist die Temperatur zusammen mit den Konturen der Werkstückoberfläche und der Kontaktfront dargestellt. Die rechte Hälfte zeigt den Druck, anhand dessen die Schockwellen in Dampf und Festkörper deutlich identifiziert werden können.

breitung einer Druckwelle im Festkörper mit einer Amplitude von bis zu 20 kbar und einer Anfangsgeschwindigkeit von 2000 m/s. Dies ist erheblich niedriger als die Schallgeschwindigkeit in Aluminium bei Raumtemperatur von etwa 5100 m/s. Eine Vergleichsrechnung mit der QEOS-Zustandsgleichung ergibt eine Geschwindigkeit von 7200 m/s, was etwa der Größenordnung molekulardynamischer Simulationen für ultrakurze Laserpulse entspricht [99]. Das Loch wird auch lange nach Pulsende noch tiefer. Eine Ursache hierfür ist der bereits diskutierte verzögerte Schmelzaustrieb, der an der Gratbildung erkennbar ist. In Bild 6.14 ist aber auch zu erkennen, dass die Lochtiefe selbst dann noch zunimmt, wenn die Materialoberfläche bereits wieder erstarrt ist. Prinzipiell könnte hierfür die Trägheit der elastisch-plastischen Verformung aufgrund des hohen Drucks verantwortlich sein. Eine genauere Betrachtung der standardmäßig von der Soft-



**Bild 6.14:** Zeitliche Entwicklung der Grathöhe, der Lochtiefe und der Schmelzisotherme im Zentrum des Kraters nach dem PARCIPHAL-Modell (Q = 0.2 mJ,  $\tau_{\rm H} = 17$  ns,  $d_{\rm f} = 40\,\mu$ m). Obwohl der Maximalwert der Leistungsdichte schon nach etwa 20 ns erreicht wird, findet der Abtrag und Schmelzaustrieb vor allem nach diesem Zeitpunkt statt. Die gepunkteten Kurven zeigen zu späteren Zeiten einen Vergleich mit einer Simulation, bei der die QEOS-Zustandsgleichung verwendet wurde. ware verwendeten Zustandsgleichung zeigt außerdem, dass diese den Dampfdruck bei Raumtemperatur mit 0.1 bar um Größenordnungen überschätzt. Dadurch findet selbst bei niedrigen Temperaturen noch ein geringes Abdampfen statt, falls der Umgebungsdruck diesen Wert unterschreitet, was im Zuge der Dampfexpansion und -abkühlung zu späteren Zeiten tatsächlich der Fall ist. Die gepunkteten Kurven in Bild 6.14 zeigen, dass bei Verwendung der QEOS-Zustandsgleichung der Abtrag infolge des geringeren Dampfdrucks bei niedrigen Temperaturen erheblich geringer ist. Allerdings führt die Verwendung dieser Beziehung, vermutlich bedingt durch die höheren Druckgradienten, zu zusätzlichen Konvergenzproblemen im Festkörper, so dass die weiteren Rechnungen mit der im Programm mitgelieferten Zustandsgleichung durchgeführt wurden.

Eine Verdopplung der Pulsenergie wie in Bild 6.15 führt zunächst auf ein ähnliches Ergebnis, wenngleich mit höherer Prozessdynamik. Allerdings steigt die Temperatur des Dampfs dabei so stark an, dass die Laserstrahlung nach einigen Nanosekunden durch inverse Bremsstrahlung vor allem an der Spitze der Materialdampfwolke absorbiert wird. Daraus resultiert eine weitere Temperaturerhöhung bis auf Werte von über 100000 K. die zwar zunächst sehr hoch erscheinen, aber nach experimentellen Befunden durchaus möglich sind [37,49,51–53]. Bei derart hohen Temperaturen müsste neben der berücksichtigten Wärmeleitfähigkeit des Plasmas wahrscheinlich auch der Einfluss der Wärmestrahlung auf den Ablationsprozess einbezogen werden. In der Darstellung der maximalen Oberflächen- bzw. Gastemperatur in Bild 6.16 ist deutlich der sprunghafte Anstieg von letzterer oberhalb einer Pulsenergie von ca. 0.2 mJ zu erkennen. Die Oberflächentemperatur bleibt dagegen stets unter der kritischen Temperatur. Durch die Verwendung der Zustandsgleichung wird das Material bei Erreichen dieser Temperaturschwelle explosionsartig zersetzt, so dass die Dichte schnell unter den für die Oberflächendefinition verwendeten Wert von 1 g/cm<sup>2</sup> fällt. Bei geringeren Pulsenergien wird dagegen auch in diesem Modell das Material vor allem durch normale Verdampfung abgetragen.

Bild 6.15: Momentaufnahmen beim Bohren von Aluminium (O = 0.4 mJ, $\tau_{\rm H} = 17 \, \rm ns, \ d_f = 40 \, \mu m$ ). Die einzelnen Bilder zeigen Kombination eine aus Temperatur- (linke Hälfte) und Druckdarstellung (rechte Hälfte). Im Vergleich zu Bild 6.13 ist bei dieser Pulsenergie eine deutliche Temperaturerhöhung des Dampfs an der Kontaktfront zu erkennen.





**Bild 6.16:** Abhängigkeit der maximalen Oberflächen- bzw. Dampftemperatur von der Pulsenergie beim Abtragen von Aluminium ( $\tau_{\rm H} = 17 \text{ ns}, d_{\rm f} = 40 \,\mu\text{m}$ ). Während die Oberfläche stets unterhalb der kritischen Temperatur von knapp 10 000 K bleibt, führt die starke Plasmaentstehung bei Pulsenergien über 0.2 mJ zu einem sprunghaften Anstieg der Dampftemperatur.



**Bild 6.17:** Zeitliche Entwicklung der Absorption im Dampf und in der kondensierten Phase bei Verwendung eines Laserpulses mit 30 ns Dauer und einer zeitlich konstanten Leistung von 20 kW. Die gegenläufigen Leistungskurven verdeutlichen die regulierende Wirkung der Dampftransmission auf die Einkopplung im Werkstück.

Wie Bild 6.17 zeigt, wirkt die Absorption im heißen Materialdampf regulierend auf die Energieeinkopplung im Werkstück. Zu Beginn des Laserpulses absorbiert vor allem der Festkörper die einfallende Energie. Die Erwärmung lässt den Absorptionsgrad von dem Raumtemperaturwert von etwa 4 % auf bis zu 45 % anwachsen. Dadurch steigt die Verdampfung und damit die Absorption im Dampf schnell an, so dass infolge der geringeren Transmission wieder weniger Leistung das Werkstück erreicht. Diese gegenseitige Beeinflussung führt zu einer regulierenden Wirkung auf die Energieeinkopplung, die nach einer gewissen Einschwingzeit vergleichsweise konstant bleibt. Eine solche Art von Plasmapuffer wird im Hirschegg-Modell für die in einem gewissen Tiefenregime beobachtete konstante Bohrrate trotz zunehmender Lochtiefe verantwortlich gemacht [31]. Auch wenn die Absolutwerte der Absorption aufgrund der oben beschriebenen starken Vereinfachungen beim Einkopplungsmodell nur als erste Anhaltspunkte gewertet werden sollten, so verdeutlicht diese Simulation dennoch die hohe Bedeutung einer gleichzeitigen Berechnung von Materialabtrag, Dampfexpansion und Energieeinbringung für das Laserbohren.

In der Gasphase sind prinzipiell zwei Phasengrenzen unterscheidbar, die dem Übergang von Metalldampf zu komprimierter Umgebungsluft (Kontaktfront) und demjenigen von der komprimierten Luft zur ungestörten Atmosphäre (Schockfront) entsprechen. In Bild 6.18 ist die zeitliche Entwicklung der maximalen Ausdehnung dieser beiden Grenzen für eine Pulsenergie von 0.5 mJ bei 17 ns Pulsdauer dargestellt. Die Ausbreitungsgeschwindigkeit der Schockwelle ist etwas höher als die der Materialdampfwol-



**Bild 6.18:** Berechnete Ausbreitung der Schockfront und der Kontaktfront ( $Q = 0.5 \text{ mJ}, \tau_{\text{H}} = 17 \text{ ns}, d_{\text{f}} = 40 \,\mu\text{m}$ ) im Vergleich zu experimentell mittels Schattenfotografie bestimmten Werten für die Schockwelle ( $Q = 0.5 \text{ mJ}, \tau_{\text{H}} = 500 \text{ fs}, d_{\text{f}} = 18 \,\mu\text{m}$ ) [22]. Die gepunktete Kurve zeigt eine Annäherung nach der Sedov-Theorie mit  $Q_0 = 0.3 \,\text{mJ}$ .



**Bild 6.19:** Zeitliche Entwicklung der einfallenden und der im Dampf bzw. Werkstück absorbierten Laserleistung. Die direkt in den Dampf eingekoppelte Energie beträgt demnach  $Q_0 = 290 \,\mu$ J, die an die kondensierte Phase transferierte nur 90  $\mu$ J.

ke. Beide Werte liegen in der Größenordnung von 10 km/s und damit annähernd in dem experimentell beobachteten Bereich. Die gemessenen Werte in Bild 6.18 wurden zwar für erheblich kürzere Pulsdauern bei stärkerer Fokussierung bestimmt, zeigen aber dennoch zu späteren Zeiten einen ähnlichen Verlauf. Möglicherweise ist hierfür vor allem die ursprünglich gleiche Pulsenergie entscheidend. Während die Dampfausbreitung anfangs stark durch die Energieabsorption beeinflusst wird, so findet zu späteren Zeitpunkten eine gleichmäßige Expansion statt. Nach der Sedov-Theorie für die Ausbreitung von Schockwellen ist bei explosionsartiger Energiefreisetzung eine Proportionalität der Form  $z \propto t^{0.4}$  zwischen der Schockfrontposition und der Zeit zu erwarten [86]. Die gepunktete Kurve in Bild 6.18 zeigt die theoretische Expansion einer idealen Schockwelle bei Annahme einer im Dampf instantan deponierten Energie von 300 µJ, was etwa dem numerisch bestimmten Anteil der direkten Absorption im Dampf von 290 µJ entspricht. Insgesamt ist die Übereinstimmung mit der numerischen Simulation und den experimentellen Ergebnissen der Schattenfotografie zu späteren Zeiten vergleichsweise gut. Wie Bild 6.19 zeigt, wird etwa ab dem Zeitpunkt, an dem die maximale Pulsleistung erreicht wird, fast die gesamte Energie vom Dampf absorbiert, so dass im Endeffekt nur insgesamt 90 µJ in das Werkstück eingekoppelt werden. Lediglich zu Beginn des Pulses wird ein erheblicher Anteil der Laserstrahlung aus der Wechselwirkungszone heraus reflektiert, so dass die insgesamt eingekoppelte Energie immerhin mehr als 60 % der Pulsenergie beträgt. In dieser Darstellung lässt sich ebenfalls die puffernde Wirkung des Plasmas erkennen, auch wenn das zeitlich gaußförmige Pulsprofil den Effekt im Vergleich zu Bild 6.17 etwas schlechter erkennen lässt.

Für einen starken Stoß, bei dem der Druck  $p_2$  hinter der Schockfront erheblich höher ist als der davor, kann die Geschwindigkeit der Schockfront in einem idealen Gas durch

$$u = \sqrt{\frac{p_2(\gamma+1)}{2\rho_1}} = \sqrt{\frac{R_s T(\gamma+1)^2}{2(\gamma-1)}}$$
(6.7)

aus dem Adiabatenexponent  $\gamma$ , der spezifischen Gaskonstante  $R_s$  und der Dichte  $\rho_1$ des unkomprimierten Umgebungsgases (Luft) abgeschätzt werden. Demnach würden die teilweise experimentell beobachteten Werte in der Größenordnung von 20 km/s bei Temperaturen von etwa 200000 K erreicht werden. Die theoretischen Berechnungen mit der PARCIPHAL-Software unterstützen diese Abschätzung. Allerdings haben Vergleichsrechnungen mit unterschiedlichen Annahmen zur Absorption im Dampf zu starken Unterschieden im Expansionsverhalten geführt. Insbesondere breitet sich der Dampf bei geringer Absorption im Zwei-Phasengebiet aus Schmelze und Gas nicht hemisphärisch sondern stärker axial von der Oberfläche weg gerichtet aus. Dies ist dadurch zu begründen, dass in diesem Fall die Dampftemperatur so gering bleibt, dass das Mischungsgebiet nicht verlassen wird und somit die starke Volumenexpansion beim Übergang zum idealen Gas fehlt. Allerdings muss hierbei beachtet werden, dass die verwendete Zustandsgleichung nur den Gleichgewichtsfall darstellt. In dieser Näherung ist ein direkter Übergang vom schmelzflüssigen Zustand in eine Mischung aus Dampf und Schmelztröpfchen möglich. In Wirklichkeit wird der letztere Zustand jedoch in erster Linie dadurch erreicht, dass das Material zunächst verdampft wird und anschließend, teilweise erst erheblich verzögert, wieder rekondensiert. Schmelztropfen könnten ebenfalls erst zu späteren Zeiten in der Nähe des Grats gebildet werden. Ein verbessertes Modell müsste daher auch die für die Phasenübergänge und die Relaxation benötigten Zeitskalen einbeziehen.

Die berechneten Lochdurchmesser stimmen vergleichsweise gut mit den experimentellen Auswertungen überein (vgl. Bild 6.20). Insbesondere zeigen beide Kurven ein deutliches Abknicken bei etwa 0.2 mJ, wenn der Durchbruch im Metalldampf einsetzt. Vergleicht man allerdings in Bild 6.21 die theoretisch berechneten Abtragsraten mit denen aus dem Experiment, so fällt auf, dass die Simulationswerte aufgrund der unterschiedlichen Pulszahlen um mindestens eine Größenordnung zu hoch sind. Hierfür könnte die bereits angesprochene Überschätzung des Dampfdrucks bei niedrigen Temperaturen verantwortlich sein. Aber auch die mit der QEOS-Zustandsgleichung berechneten Pulsabträge sind immer noch erheblich zu hoch. Aufgrund der schlechten Zugänglichkeit des kommerziellen Algorithmus ist eine weitere Eingrenzung der Ursache nur schwer möglich. Eine Analyse der Massebilanz deutet jedoch darauf hin, dass ein signifikanter Anteil des abgetragenen Volumens gar nicht in Dampf umgewandelt wird. Daher sind auch



**Bild 6.20:** Vergleich der Lochdurchmesser der theoretischen Simulation ( $\tau_{\rm H} = 17$  ns,  $d_{\rm f} = 40 \,\mu\text{m}$ , N = 1) mit den experimentellen Messungen ( $\tau_{\rm H} = 13$  ns,  $d_{\rm f} = 33 \,\mu\text{m}$ , N = 10) [179]. In beiden Fällen ist ein Abknicken der Kurve bei 0.2 mJ zu erkennen, was nach der Berechnung etwa der Schwelle für starke Plasmaentstehung entspricht.



**Bild 6.21:** Mit PARCIPHAL berechnete Grat- und Abtragsvolumina im Vergleich zu experimentellen Werten (Parameter wie in Bild 6.20). Der prinzipielle Kurvenverlauf ist zwar vergleichbar aber die theoretischen Kurven entsprechen einem Einzelpuls während im Experiment 10 Pulse verwendet wurden.

numerische Fehler oder Konvergenzprobleme bei der Beschreibung des Verdampfungsvorgangs oder der elastisch-plastischen Verformung im Festkörper nicht auszuschließen. Der Massenverlust im Rechengebiet ist bei 0.2 mJ nach 100 ns immerhin so groß, dass dadurch ein zylindrisches Loch mit 40 µm Durchmesser und 6 µm Tiefe im Festkörper entstehen könnte, was immerhin einem Drittel der berechneten Lochtiefe entspräche.

Auch wenn das ganzheitliche Modell zum jetzigen Zeitpunkt noch zahlreiche Schwächen zeigt, so soll dennoch abschließend als Ausblick auf sein wissenschaftliches und technisches Potenzial die Frage untersucht werden, inwieweit der Prozess durch räumliche und zeitliche Pulsformung signifikant beeinflusst werden kann. Die experimentellen Untersuchungen konzentrieren sich bislang meist auf die einfacher zugänglichen Einflussfaktoren wie Pulsdauer, Leistungsdichte, Strahlbewegung, Umgebungsatmosphäre oder Laserwellenlänge. In Zukunft könnte jedoch auch die Frage nach dem optimalen zeitlichen Verlauf oder räumlichen Profil eines einzelnen Pulses oder einer Serie von Pulsen im Vordergrund stehen, um die Prozesseffizienz und -qualität weiter steigern zu können.

Bild 6.22 zeigt einen Vergleich von Lochgeometrien, die mit unterschiedlichen räumlichen Strahlprofilen bei gleicher Pulsenergie erzielt wurden. Die jeweiligen Fokusdurchmesser wurden dabei so gewählt, dass in allen Fällen der Eintrittsdurchmesser etwa 50 µm beträgt. Nach diesen Berechnungen sind die Abtragsvolumina insgesamt sehr ähnlich, auch wenn bei Verwendung des zylindrischen Profils etwas höhere Werte erreicht werden. Letzteres liegt daran, dass durch die homogenere Leistungsdichtevertei-



**Bild 6.22:** Berechnete Lochprofile für verschiedene räumliche Leistungsdichteverteilungen mit Q = 0.2 mJ. Die Fokusdurchmesser wurden dabei jeweils so gewählt, dass der Lochdurchmesser etwa 50 µm beträgt.



**Bild 6.23:** Maximale Dampftemperaturen bei Bearbeitung mit unterschiedlichen zeitlichen Pulsverläufen (siehe Skizzen im Diagramm). Je früher die Leistungsdichte ansteigt, desto stärker ist insgesamt die Plasmabildung.

lung Spitzenwerte im Zentrum vermieden werden und somit die Plasmaentstehung etwas unterdrückt wird. Wegen der höheren Energietransmission durch den Dampf sind somit die im Werkstück absorbierte Energie, ebenso wie das abgetragene Volumen, um fast 15% größer als beim gaußförmigen Profil. Das Gratvolumen beträgt beim kegelförmigen Strahlprofil rund 30% des Lochvolumens und ist damit immerhin um 6–8% geringer als bei den anderen beiden Geometrien. Möglicherweise ist dies auf eine gleichmäßigere Schmelzbeschleunigung infolge des linearen Leistungsdichtegradienten zurückzuführen. Dadurch könnten starke lokale Unterschiede im Dampfdruck bzw. der Fließgeschwindigkeit vermieden werden, die aufgrund der Massenkontinuität in der Strömung einen starken Schmelzaufwurf verursachen würden.

In Bild 6.23 wurde demgegenüber versucht, den Prozess über die Veränderung des zeitlichen Leistungsdichteverlaufs eines räumlich gaußförmigen Laserstrahls mit einer Pulsdauer von 10 ns zu beeinflussen. Es zeigt sich, dass die erreichte Plasmatemperatur umso höher ist, je früher der Puls seine maximale Leistungsdichte erreicht. Die Temperaturunterschiede betragen dabei immerhin einige 10 000 K. Die Absorption im Werkstück ist allerdings beim zeitlich gaußförmigen Puls etwas höher als bei den anderen beiden Verläufen. Trotzdem ist das abgetragene Volumen bei dem exponentiell ansteigenden Profil am höchsten und liegt etwa um 10 % über dem des Pulses, der bereits zu Beginn seine Spitzenleistung erreicht. Untersuchungen mit ansteigenden oder abfallenden Dreiecksrampen haben zu ähnlichen Ergebnissen geführt. Generell ist es für die Prozesseffizienz günstig, wenn die hohen Leistungsdichten und damit der Durchbruch im Metalldampf erst kurz vor dem Ende des Pulses erreicht werden. Dadurch kann die Absorption der Laserstrahlung im Dampf zumindest um Werte im Bereich von 10 % reduziert werden. Die Ergebnisse der ganzheitlichen Simulation zeigen insgesamt einige viel versprechende Perspektiven, insbesondere was die Berücksichtigung der gegenseitigen Beeinflussung der Gasdynamik und der Energieeinkopplung betrifft. Zur weiteren Verbesserung müsste allerdings auch die Strahlpropagation, z. B. durch das in Kapitel 3.2 beschriebene FDTD-Verfahren, auf eine kontinuierliche Art implementiert werden. Auch die Zustandsgleichung müsste, vor allem was den Dampf angeht, weiter überprüft und verbessert werden. Besonderes Augenmerk sollte dabei auf die zur Erreichung des thermodynamischen Gleichgewichts notwendigen Zeitskalen gelegt werden. Bevor mit einem solchen Ansatz wirklichkeitsnahe Simulationen berechnet werden können, muss aber in erster Linie die Numerik weiter verbessert werden. Dies betrifft einerseits die Konvergenzprobleme im Festkörper, die besonders bei ultrakurzen Pulsdauern erheblich waren, und andererseits die zu hohen Massenverluste. Abhilfe könnte hier ein konservatives Diskretisierungsschema schaffen, das dann vielleicht eine weniger gute Beschreibung der Schockwelle erlaubt, dafür aber den Verdampfungsvorgang selbst besser erfasst.
# 7 Zusammenfassung und Ausblick

Die Applikationen in der Lasermikrobearbeitung erfordern in zunehmendem Maß eine ausgewogene Kombination von Effizienz und Präzision. Aufgrund der Vielzahl an möglichen Einflussfaktoren ist dabei oft eine direkte Optimierung des Prozesses nur begrenzt möglich. Auch wenn die Modellierung derzeit den Abtragsvorgang wegen der extremen thermophysikalischen Bedingungen noch nicht quantitativ nachbilden kann, so verdeutlicht sie dennoch die qualitativen Grundzusammenhänge und kann bei der Auslegung einer geeigneten Bearbeitungsstrategie hilfreich sein. Es zeigt sich hierbei, dass beim Laserbohren mit kurzgepulsten Strahlquellen durch die gegenseitige Beeinflussung auf eine ganzheitliche Betrachtung von Materialeigenschaften, Energieeinkopplung, Relaxations- und Verdampfungsvorgängen sowie des Materialaustriebs nicht verzichtet werden kann. Der Schwerpunkt dieser Arbeit liegt daher zunächst auf einer systematischen Identifizierung der dem Laserbohren mit kurzen Pulsen zu Grunde liegenden, prozessrelevanten Mechanismen, um darauf aufbauend Möglichkeiten zur Modellierung des Gesamtsystems aufzuzeigen.

Die hohen Leistungsdichten beim Laserbohren führen zu einer derart schnellen und extremen Erwärmung, dass innerhalb kürzester Zeit praktisch alle Materialzustände durchlaufen werden, angefangen vom Festkörper über die Schmelze bis hin zum Dampf bzw. Plasma. Bei den dabei auftretenden Temperaturunterschieden von bis zu einigen 100 000 K ändern sich wichtige Werkstoffkennwerte wie die Wärmeleitfähigkeit oder die Absorptionseigenschaften teilweise um Größenordnungen. Zur Bestimmung dieser Größen, die unter solchen Extrembedingungen experimentell nur schwer messbar sind, kann ein theoretisches Zustandsgleichungsmodell verwendet werden, das im Fall von Aluminium eine gute Übereinstimmung mit den Messwerten bei tieferen Temperaturen zeigt. Während ein solches Modell nur den Gleichgewichtszustand beschreiben kann, verdeutlichen Untersuchungen der Relaxationszeiten, dass für die Thermalisierung zwischen Elektronen und Atomen im Festkörper typischerweise einige Pikosekunden, für die im Dampf dagegen eher Nanosekunden benötigt werden.

Die hohen Temperaturen und Dichten im Materialdampf führen zudem zu einer beträchtlichen Beeinflussung der Strahlpropagation und der Energieeinkopplung. Die Tropfenund Partikelentstehung sowie lokale Brechungsindexgradienten können dabei zu einer Streuung bzw. konischen Strahlablenkung führen, die sich dann im Bearbeitungsergebnis manifestieren. Außerdem haben mikroskopische Berechnungen der Maxwell-Gleichungen teilweise erhebliche lokale Leistungsdichten- und Absorptionsunterschiede infolge von Interferenzen gezeigt, die durch eine auf geometrischer Optik basierende Abschätzung der Energieeinkopplung selbst bei Berücksichtigung der Vielfachreflexionen nicht erfasst werden können. Solche Schwankungen werden zwar vermutlich teilweise im Laufe des Prozesses ausgeglichen, können aber für die Prozessstabilität und die Plasmaentstehung von Bedeutung sein.

Während die charakteristischen Prozesszeiten wie die Verdampfungsdauer oder die Erstarrungszeit bei Pulsdauern oberhalb von etwa 100 ps weitgehend mit dieser korrelieren, ist bei noch kürzeren Wechselwirkungszeiten aufgrund der Elektron-Phonon-Relaxation eine materialspezifische Sättigung des thermischen Verhaltens zu erkennen. Prinzipiell führt eine Verkürzung der Pulsdauer zwar zu geringeren energetischen Abtragsschwellen, Wärmeleitungsverlusten und Schmelzfilmdicken, aber die endliche Zeit der Energierelaxation im Metall verhindert z. B. eine völlig schmelzfreie Bearbeitung.

Mit zunehmender Bohrtiefe sinkt die Abtragsrate durch die Veränderung der Oberflächentopografie erheblich. Bei geringen Leistungsdichten können alleine die geometrisch bedingten Unterschiede in der Energieeinkopplung und der Wärmeleitung einen Abfall um 1–2 Größenordnungen innerhalb einiger 1000 Laserpulse verursachen. Vor allem bei höheren Leistungsdichten müssen jedoch auch die Einflüsse der Plasmaentstehung und der veränderten Abtragsmechanismen wie die Phasenexplosion am kritischen Punkt berücksichtigt werden, was eine Einbeziehung der Austriebsdynamik in die Simulation erfordert.

Auch wenn durch Verkürzung der Pulsdauer die Schmelzbildung derart reduziert werden kann, dass der Austrieb der Schmelze kaum einen Einfluss auf die Prozesseffizienz hat, so kann sie dennoch nicht generell vermieden werden, so dass häufig qualitätsmindernde Ablagerungen und Grate entstehen. Der Schmelzaustrieb findet gegenüber dem Puls verzögert statt und dauert bis zur Erstarrung an. Aufgrund der kurzen Wechselwirkungszeit ist die erreichte Fließgeschwindigkeit insbesondere bei tiefen Bohrungen so gering, dass das Material nicht innerhalb eines einzelnen Pulses ausgetrieben werden kann. Durch Senkung der Leistungsdichte kann die Schmelzbeschleunigung und damit die Tendenz zur Gratentstehung verringert werden. Bei Berücksichtigung der Metalldampfausbreitung zeigt sich deutlich die gegenseitige Beeinflussung von Dampfentstehung und Ablation durch die Plasmatransmission. Das vorgestellte, auf einer Zustandsgleichung basierende ganzheitliche Modell stimmt hinsichtlich der Dampftemperaturen und -geschwindigkeiten mit Werten von bis zu einigen 100 000 K bzw. 10 km/s vergleichsweise gut mit experimentellen Beobachtungen überein, überschätzt jedoch den Abtrag selbst erheblich. Ursache hierfür dürften neben den Unsicherheiten bei den verwendeten Materialeigenschaften vor allem numerische Konvergenzprobleme und Diskretisierungsfehler der verwendeten Software sein.

Die Untersuchungen zeigen, dass zur zuverlässigen Beschreibung des Bohrprozesses mit kurzgepulsten Lasern ein Modell verwendet werden muss, das sowohl Festkörper und Schmelze als auch den Dampf und das Plasma gleichzeitig und mit vergleichsweise kontinuierlichen Übergängen erfassen kann. Um dies zu ermöglichen sind weitere Verbesserungen in der Beschreibung der Materialeigenschaften, der Energieeinkopplung und der Numerik notwendig. Die Zustandsgleichung muss vor allem für den Dampf experimentell verifiziert und gegebenenfalls verbessert werden. Gleichzeitig sollte sich die Materialbeschreibung nicht ausschließlich auf das thermodynamische Gleichgewicht beschränken, sondern auch die Zeitskalen für die Energierelaxation und Tropfenkondensation einbeziehen. Das vorgestellte FDTD-Modell zur Beschreibung der Strahlpropagation und Absorption stellt einen Erfolg versprechenden Ansatz dar, sollte jedoch zur Reduzierung des Rechenaufwands mit einem adaptiven Rechennetz verbunden werden, so dass nur an der Materialoberfläche Zellen von der Größe der Absorptionslänge verwendet werden müssen. Die Hauptaufgabe bleibt jedoch auch weiterhin die Entwicklung einer stabilen, hydrodynamischen Numerik zur Beschreibung der extremen Prozessdynamik. Die vorgestellte PARCIPHAL-Software ist zwar ein viel versprechender Ansatz, zeigt jedoch insbesondere bei ultrakurzen Pulsen immer noch beträchtliche Konvergenzprobleme. Um diese zu überwinden könnte der Prozess eventuell wieder durch getrennte Algorithmen für die kondensierten Phasen und den Dampf beschrieben werden, die anschließend iterativ gekoppelt werden. Alternativ wäre auch ein kontinuierliches, konservatives numerisches Schema denkbar, das den Phasenübergang selbst besser beschreiben kann, selbst wenn dafür die Expansion der Schockwelle etwas schlechter erfasst würde.

# A Materialdaten ausgewählter Werkstoffe

In der folgenden Tabelle sind einige für die Modellierung der Laserbearbeitung wichtige Materialdaten typischer Werkstoffe aus den Referenzen [108, 110, 129, 189–191] zusammengefasst. Soweit nicht anders gekennzeichnet entsprechen alle Daten den Raumtemperaturwerten. Die einzelnen Angaben können in der Literatur stark voneinander abweichen und spiegeln damit die Einflüsse der strukturellen Beschaffenheit, eventueller Legierungselemente und Unsicherheiten bei der Messmethodik wieder. Dies gilt in besonderem Maß für Hochtemperaturwerte und Keramiken.

Eigenschaft	Einheit	Al	Fe	Si	$Si_3N_4$
Schmelztemperatur <i>T</i> <sub>m</sub> <sup>1</sup>	K	933	1809	1685	2173
Siedetemperatur $T_{\rm b}$	Κ	2793	3133	3543	
Debye-Temperatur $\theta_{\rm D}$	Κ	394	420	625	
Kritische Temperatur $T_{\rm c}$	Κ	8940	9400	5160	
Dichte $\rho$	$\rm kgm^{-3}$	2700	7870	2340	3200
Dichte $\rho @ T_{\rm m}$	${\rm kg}{\rm m}^{-3}$	2385	7015	2510	
Latente Schmelzwärme Lm	$\rm Jkg^{-1}$	$3.9\cdot 10^5$	$2.7\cdot 10^5$	$1.8\cdot 10^6$	
Lat. Verdampfungswärme $L_v$	$\rm Jkg^{-1}$	$1.1\cdot 10^7$	$6.1\cdot 10^6$	$1.4\cdot 10^7$	
Verhältnis $L_{\rm v}/R_{\rm s}$	Κ	36 000	41 000	47 000	38 000
Spez. Wärmekapazität c <sub>p</sub>	$J kg^{-1}K^{-1}$	904	450	715	713
Spez. Wärmekapazität $c_p @ T_m$	$J kg^{-1}K^{-1}$	1086	750	1040	
El. Wärmekapazitätskoeff. γ <sub>s</sub>	$J kg^{-1}K^{-2}$	0.047	0.09		
Wärmeleitfähigkeit $\lambda_{th}$	$\mathrm{W}\mathrm{m}^{-1}\mathrm{K}^{-1}$	238	78	139	10-30
Wärmeleitfähigkeit $\lambda_{\rm th} @ T_{\rm m}$	$\mathrm{W}\mathrm{m}^{-1}\mathrm{K}^{-1}$	94	$\approx 30$	67	
Dynamische Viskosität $\eta @ T_m$	$\mathrm{N}\mathrm{s}^{-1}\mathrm{m}^{-2}$	$1.3\cdot 10^{-3}$	$5.5\cdot 10^{-3}$	$9.4\cdot10^{-4}$	
Oberflächenspannung $\sigma$ @ $T_{ m m}$	${ m N}{ m m}^{-1}$	0.91	1.87	0.87	
Grüneisenkonstante $\Gamma_s$		2.17	1.6		
Elastizitätsmodul $E_s$	GPa	71	210	110	300
Kompressionsmodul B <sub>s</sub>	GPa	75	170	100	
Fließspannung $\sigma_{\rm F}$	MPa	100			
Spez. Kopplungskonstante Gep	$W kg^{-1}K^{-1}$	$2\cdot 10^{14}$	$9\cdot 10^{14}$		
Relaxationszeit $\tau_{ep}$	ps	5	0.5		
Absorptionslänge $l_{\alpha}$ @ 1064 nm	m	$8\cdot 10^{-9}$	$1.9\cdot 10^{-8}$	$1.3\cdot 10^{-3}$	$pprox 10^{-4}$
Absorptionsgrad A, @ 1064 nm		0.04	0.36	0.69	pprox 0.85

<sup>1</sup>Bei Si<sub>3</sub>N<sub>4</sub> ist die Zersetzungstemperatur der Keramik angegeben

# B Physikalische Grundlagen der Zustandsgleichung

# **B.1 Grundlagen des QEOS-Modells**

Das QEOS-Zustandsgleichungsmodell (*engl.: quotidian equation of state*) wurde in der hier vorgestellten Version am Lawrence Livermore National Laboratory in Kalifornien entwickelt [21] und bildet in einer vereinfachten Form auch die Basis für die in dieser Arbeit verwendete Simulationssoftware PARCIPHAL. Das Modell betrachtet zunächst die Elektronen und das Kristallgitter separat und berücksichtigt dann die Wechselwirkung dieser beiden Komponenten phänomenologisch durch eine Bindungskorrektur. Auf diese Weise können aufwändige quantenmechanische Berechnungen wie die der Austauschwechselwirkung vermieden und dennoch relativ verlässliche Aussagen über die thermodynamischen Materialeigenschaften getroffen werden. Die gesamte freie Enthalpie setzt sich dabei additiv aus denen der einzelnen Komponenten zusammen, d.h.  $F = F_e + F_i + F_b$ .

# **B.1.1 Elektronischer Anteil**

Die Elektronen werden im Rahmen des QEOS-Modells als ideales Fermi-Gas beschrieben, so dass ihr Beitrag zu den thermodynamischen Potenzialen durch die selbstkonsistente Lösung der Poisson-Gleichung

$$\nabla^2 V_{\rm e}(\vec{x}) = \frac{e}{\varepsilon_0} [n_{\rm e}(\vec{x}) - Z_{\rm at}\delta(\vec{x})] \tag{B.1}$$

unter Berücksichtigung der Fermi-Statistik für die Elektronendichte ne

$$n_{\rm e}(\vec{x}) = \int_0^\infty \left( 1 + \exp\left\{\frac{1}{k_{\rm B}T} \left[\frac{\vec{p}^2}{2m_{\rm e}} - eV_{\rm e}(\vec{x}) - \mu(\vec{x})\right]\right\} \right)^{-1} {\rm d}^3 \vec{p} \qquad (B.2)$$

berechnet wird. Weiterhin wird aus Gründen der Ladungsneutralität gefordert, dass die Anzahl der Elektronen innerhalb einer Zelle mit Radius  $\bar{r} = \left(\frac{4}{3}\pi n_0\right)^{-1/3}$  gerade der Zahl  $Z_{\rm at}$  der Elektronen je Atom entspricht. Die Konzentration der Atomkerne  $n_0$  lässt sich dabei aus der Dichte bestimmen. Wird zusätzlich der Nullpunkt des elektrostatischen Potenzials  $V_e(\vec{x})$  so gewählt, dass es am Rand der Zelle verschwindet, so lassen sich ungebundene also ionisierte Elektronen leicht anhand ihrer positiven Gesamtenergie identifizieren. Die selbstkonsistente Lösung der Gleichungen (B.1) und (B.2) ist numerisch vergleichsweise aufwändig, so dass die Bestimmung der freien Enthalpie  $F_e$  aus dem Potenzial  $V_e(\vec{x})$ , der Elektronendichte  $n_e$  und dem chemischen Potential  $\mu(\vec{x})$  normalerweise nicht während einer Simulation erfolgt, sondern vorab berechnet und anschließend entweder durch analytische Funktionen angenähert oder aus Tabellen interpoliert wird [21, 104, 188]. Aus den Ableitungen der freien Enthalpie  $F_e$  nach der Temperatur Tund der Dichte  $\rho$  werden schließlich der Druck  $p_e$  bzw. die spezifische Wärmekapazität  $c_{V,e}$  bestimmt.

# **B.1.2 Beitrag der Ionen**

Im Vergleich zu dem elektronischen Anteil ist die Beschreibung des Beitrags der Ionen im QEOS-Modell vergleichsweise einfach gehalten. Basierend auf empirischen Ergebnissen wird angenommen, dass die freie Enthalpie der Ionen  $F_i$  im Wesentlichen eine Funktion der Verhältnisse der dichteabhängigen Schmelz- bzw. Debye-Temperaturen zur Kristalltemperatur *T* ist:

$$F_{i} = \frac{k_{B}T}{m_{i}}f(u,w)$$
(B.3)
mit  $u = \frac{\Theta_{D}(\rho)}{T}$  und  $w = \frac{T_{m}(\rho)}{T}$ .

Die charakteristische Funktion f(u, v) wird dabei getrennt für Temperaturen deutlich unterhalb der Debye-Temperatur  $\Theta_D$ , sowie oberhalb der Schmelztemperatur  $T_m$  und im Bereich dazwischen angegeben. Für die Lasermaterialbearbeitung sind vor allem die beiden zuletzt genannten Bereiche relevant:

$$f(u,w) = \begin{cases} 3\ln(u) - 1 + \left(\frac{3u^2}{40} - \frac{u^4}{2240}\right) & \frac{1}{3}\Theta_{\rm D} < T < T_{\rm m} \\ \frac{3}{2}\ln\left(\frac{u^2}{w}\right) - 1 + \frac{13}{2}\left[w^{\frac{3}{13}} - 1\right] & T_{\rm m} < T . \end{cases}$$
(B.4)

Zur Vervollständigung der ionischen Zustandsgleichung fehlt noch der Zusammenhang zwischen den Debye- und Schmelztemperaturen und der Dichte  $\rho$ 

$$T_{\rm m} = 57930 \,\mathrm{K} \frac{\xi^{\frac{1}{3}}}{(1+\xi^{-1})^{2\mu}} \tag{B.5}$$

$$\Theta_{\rm D} = 2320 \, \mathrm{K} \frac{\xi^{\frac{1}{2}}}{(1+\xi^{-1})^{\mu}} \tag{B.6}$$

mit den Skalierungsgrößen  $\xi = \frac{2}{3}\rho$  [g/cm<sup>3</sup>] und  $\mu = 4.68$ .

Alle diese Funktionen wurden so gewählt, dass sie bekannte Grenzfälle wie z. B. die ideale Gasgleichung, die Gesetze von Dulong-Petit, Lindemann und Grüneisen sowie die Gittertheorie nach Debye und das Nernst Theorem erfüllen. Das ursprüngliche Ziel der Autoren war dabei eine Beschreibung für eine Vielzahl von Elementen und Verbindungen, ausschließlich ausgehend von der Kernladungszahl Z<sub>at</sub> und der Molmasse, so dass die Freiheitsgrade des Modells möglichst universell angepasst wurden [21]. Zur verbesserten Beschreibung von Aluminium wurden dagegen in den Gleichungen (B.4) und (B.6) bereits einige Anpassungen vorgenommen.

# B.1.3 Bindungskorrektur

Bisher wurden die elektronischen und ionischen Komponenten getrennt betrachtet. Durch das Fehlen von Bindungskräften wären so die berechneten Drücke, insbesondere bei niedrigen Temperaturen, viel zu groß. Um aufwändige quantenmechanische Berechnungen der Kristallbindung zu umgehen wird diese durch eine empirische Korrektur berücksichtigt

$$F_{\rm b} = F_{\rm b0} \left\{ 1 - \exp\left(b \left[1 - \left(\frac{\rho_{\rm s}}{\rho}\right)^{\frac{1}{3}}\right]\right) \right\} , \qquad (B.7)$$

bei der die Skalierungsgrößen  $F_{b0}$  und *b* derart bestimmt werden, dass der Gesamtdruck bei Raumtemperatur und der Festkörperdichte  $\rho_s$  gerade 1 bar beträgt und das Kompressionsmodul  $B_s$  des Festkörpers unter diesen Bedingungen korrekt wiedergegeben wird.

# B.2 Ionisierung des Dampfes nach dem Saha-Modell

Die Konzentration der Ladungsträger in einem  $Z_i$ -fach ionisierten Dampf mit der Temperatur *T* kann mit Hilfe der Saha-Gleichung

$$\frac{n_{\rm e}n_{\rm i}^{(Z_{\rm i}+1)}}{n_{\rm i}^{(Z_{\rm i})}} = 2\frac{\zeta^{(Z_{\rm i}+1)}}{\zeta^{(Z_{\rm i})}}\frac{(2\pi m_{\rm e}k_{\rm B}T)^{\frac{3}{2}}}{h^3}\exp\left\{-\frac{I^{(Z_{\rm i})}-\Delta I^{(Z_{\rm i})}}{k_{\rm B}T}\right\}$$
(B.8)

in Abhängigkeit von der Ionisierungsenergie  $I^{(Z_i)} = E_0^{(Z_i+1)} - E_0^{(Z_i)}$  beschrieben werden [192,193]. Ihre Herleitung erfolgt über die Annahme idealer Elektronen- bzw. Ionengase im lokalen thermodynamischen Gleichgewicht. Die Zustandssummen

$$\zeta^{(Z_i)} = \sum_k g_k^{(Z_i)} \exp\left\{-\frac{E_k^{(Z_i)} - E_0^{(Z_i)}}{k_{\rm B}T}\right\}$$
(B.9)

berücksichtigen dabei das statistischen Gewicht  $g_k^{(Z_i)}$  der einzelnen Elektronenzustände mit Energie  $E_k^{(Z_i)}$  des  $Z_i$ -fach ionisierten Atoms und entsprechen bei niedrigen Temperaturen etwa dem Entartungsgrad  $g_0^{(Z_i)}$  des Grundzustandes. Bei neutralem Aluminium bedeutet dies  $\zeta^{(0)} \approx 6$  (einfach besetztes *p*-Orbital), für einfache Ionisierung  $\zeta^{(1)} \approx 1$ (voll besetztes *s*-Orbital) und für zweifache Ionisierung  $\zeta^{(2)} \approx 2$  (einfach besetztes *s*-Orbital). Die Absenkung der Ionisierungsenergie um

$$\Delta I^{(Z_i)} = \frac{e^2(Z_i+1)}{4\pi\varepsilon_0\lambda_D}$$
(B.10)

bezieht phänomenologisch die Wechselwirkung der Ladungsträger ein. Die hierbei auftretende Debye-Länge  $\lambda_D$  kann durch

$$\frac{1}{\lambda_{\rm D}^2} = \frac{e^2 n_{\rm e}}{\varepsilon_0 k_{\rm B}} \left\{ \frac{1}{\sqrt{T_{\rm e}^2 + T_{\rm F}}} + \frac{Z}{T_{\rm i}} \right\}$$
(B.11)

aus der Fermi-Temperatur TF mit

$$E_{\rm F} = \frac{3}{2}k_{\rm B}T_{\rm F} = \frac{\hbar^2}{2m_{\rm e}} \left(3\pi^2 n_{\rm e}\right)^{\frac{2}{3}}$$
(B.12)

und dem mittleren Ionisierungsgrad

$$Z = \frac{\sum_{Z_i} Z_i^2 n_i^{(Z_i)}}{\sum_{Z_i} Z_i n_i^{(Z_i)}}$$
(B.13)

abgeschätzt werden [113]. Auch hier wird meist die Elektronentemperatur der der Ionen gleichgesetzt, d. h.  $T_e = T_i = T$ . Zur Vervollständigung des Gleichungssystems für die Elektronen- bzw. Ionenkonzentrationen  $n_e$  und  $n_i^{(Z_i)}$  wird noch die Ladungsträgerneutralität

$$n_{\rm e} = \sum_{Z_{\rm i}} Z_{\rm i} n_{\rm i}^{(Z_{\rm i})}$$
 (B.14)

gefordert und die Gesamtionenkonzentration

$$n_0 = \sum_{Z_i} n_i^{(Z_i)}$$
 (B.15)

aus der idealen Gasgleichung

$$p = (n_{\rm e} + n_0)k_{\rm B}T \tag{B.16}$$

bestimmt.

Für die Berechnung der Ionisierung von Aluminiumdampf in Bild 2.3 wurden die ersten vier Ionisierungszustände berücksichtigt, deren untere Energiezustände z. B. in Referenz [135] tabelliert sind. Der Entartungsgrad kann bei Annahme einer Spin-Bahn-Kopplung nach Russell-Saunders aus der Gesamtdrehimpulsquantenzahl *J* mit  $g_k^{(Z_i)} = 2J + 1$  berechnet werden. Höhere Energiezustände wurden durch Annahme eines wasserstoffähnlichen Spektrums abgeschätzt.

# **B.3** Berechnung der Stoßfrequenzen in einem teilweise ioniserten Plasma

Die mittlere Zeit zwischen Stößen von Teilchen mit gleicher Masse  $m_{\alpha}$ , Ladung  $Z_{\alpha}$  und Konzentration  $n_{\alpha}$  kann unter Annahme einer Maxwell-Geschwindigkeitsverteilung mit der Temperatur  $T_{\alpha}$  durch

$$\tau_{\alpha\alpha} = (4\pi\varepsilon_0)^2 \frac{3\sqrt{m_\alpha}(k_{\rm B}T_\alpha)^{\frac{3}{2}}}{4\sqrt{\pi}Z_\alpha^4 e^4 n_\alpha \ln\Lambda}$$
(B.17)

abgeschätzt werden [115, 192]. Der Coulomb-Logarithmus  $\ln \Lambda$  ist eine geringfügig temperaturabhängige Funktion, deren Berechnung weiter unten erläutert wird. Gleichung (B.17) ist nur für nichtentartete Teilchen im lokalen Gleichgewicht, also bei höheren Temperaturen und geringen Dichten, gültig. Der Entartungsgrad kann dabei aus dem Verhältnis der Fermi-Temperatur  $T_F$  zu  $T_{\alpha}$  abgeschätzt werden. Während dieser bei Ionen fast im gesamten Bereich oberhalb der Raumtemperatur und bei moderaten Dichten kleiner als 1 ist (vgl. Gleichung (B.12) mit Substitution  $e \rightarrow i$ ), sind Elektronen aufgrund ihrer geringen Masse bei den in der Lasermaterialbearbeitung üblichen Temperaturen oft teilweise entartet.

Eine einfache Möglichkeit die mittleren Stoßzeiten über einen weiten Temperaturbereich anzugeben stellt die in [113] vorgeschlagene Interpolation zwischen den bekannten Grenzfällen von vollständiger Entartung und Nichtentartung für die Elektronen-Ionen-Stoßzeit  $\tau_{ei}$  dar:

$$\tau_{\rm ei} = (4\pi\epsilon_0)^2 \frac{\sqrt{m_{\rm e}}E_{\rm ef}^{\frac{1}{2}}}{\sqrt{2}\pi Z^2 e^4 n_{\rm i}\ln\Lambda} \,. \tag{B.18}$$

Die effektive Energie  $E_{\text{ef}} = E_{\text{F}} + \frac{3}{2}k_{\text{B}}T$  ist dabei so gewählt, dass im Grenzfall niedriger Temperaturen die Fermi-Energie  $E_{\text{F}}$  und bei hohen Temperaturen die kinetische Energie verwendet wird.

Bei der Herleitung der Stoßzeiten muss der Wirkungsquerschnitt der Coulomb-Streuung über die möglichen Teilchenabstände gemittelt werden, wodurch der Coulomb-Logarithmus ln A in den Gleichungen (B.17) und (B.18) auftritt. Entsprechend den unterschiedlichen Annahmen für die unteren und oberen Grenzen  $b_{\min}$  bzw.  $b_{\max}$  für diese Mittelung finden sich in der Literatur viele verschiedene Angaben zu dessen Berechnung [112, 113, 115, 192]. Alle Ansätze führen jedoch auf eine logarithmische Funktion aus dem Verhältnis dieser Grenzen, die nur eine geringe Temperaturabhängigkeit aufweist. Nach Referenz [112] lässt sich der Coulomb-Logarithmus näherungsweise durch

$$\ln\Lambda = \frac{1}{2}\ln\left(1 + \frac{b_{\min}^2}{b_{\max}^2}\right) \tag{B.19}$$

berechnen. Für den Abstand  $b_{\text{max}}$  wird dabei die Debye-Länge  $\lambda_D$  (vgl. Gleichung (B.11)), mindestens jedoch der mittlere Teilchenabstand  $\bar{r} = (\frac{4}{3}\pi n_i)^{-1/3}$ , verwendet. Der minimale Abstand  $b_{\text{min}}$  entspricht der größeren der beiden Längen

$$l = \frac{Ze^2}{4\pi\varepsilon_0 k_{\rm B}\bar{T}} \text{ und } \lambda_{\rm dB} = \frac{\hbar}{2} \left(3m_{\rm e}k_{\rm B}\bar{T}\right)^{-\frac{1}{2}},$$

die etwa der klassisch minimal möglichen Annäherung bzw. der Elektronenwellenlänge entsprechen und wird nach oben durch  $b_{\text{max}}$  begrenzt. Durch den Ausdruck  $\bar{T} = \sqrt{T_e^2 + T_F^2}$  wird die Temperatur zwischen den Grenzfällen mit und ohne Entartung interpoliert.

Bei hoher Dichte kann die Streuung eines Elektrons an einem Ion nicht unabhängig von der Wechselwirkung mit benachbarten Ionen berechnet werden. Näherungsweise kann diese Wechselwirkung durch eine temperaturabhängige Korrektur der Stoßzeiten im Festkörper und der Schmelze proportional zu dem Verhältnis aus der Schmelztemperatur  $T_m$  und der Materialtemperatur T erfasst werden [113,114]. Diesem Ansatz folgend wurde die Stoßzeit in den kondensierten Phasen durch

$$\tau_{\rm ei} = \frac{28\beta\bar{r}}{\sqrt{2m_{\rm e}E_{\rm ef}}} \left(\frac{T_{\rm m}}{T}\right)^{\beta}$$
(B.20)

abgeschätzt, wobei zur guten Beschreibung der experimentell beobachteten Transporteigenschaften  $\beta = 1$  im Festkörper und  $\beta = 0.5$  für die Schmelze gewählt wurde.

Bei Temperaturen geringfügig über der Verdampfungstemperatur gibt es kaum freie Ladungsträger, so dass in diesem Bereich die Transporteigenschaften durch die Neutralteilchen bestimmt werden. Deren mittlere Stoßzeit lässt sich dann aus der kinetischen Gastheorie abschätzen [118]

$$\tau_{\rm nn} = \frac{1}{8\sigma_{\rm c}^2} \sqrt{\frac{m_{\rm i}}{\pi k_{\rm B}T}},\tag{B.21}$$

wobei der Teilchendurchmesser  $\sigma_c$  in der vorliegenden Arbeit aus Mangel an experimentellen Werten mit 0.3 nm angenommen wurde, was etwa den Werten anderer Atome entspricht [194].

# C Numerische Simulation der Strahlpropagation

Die Berechnung der Energieeinkopplung beim Laserbohren in Gegenwart eines teilweise ioniserten Metalldampfs erfordert häufig eine genauere Beschreibung als dies durch geometrische Optik möglich ist. In diesem Fall müssen die elektromagnetischen Maxwell-Gleichungen numerisch gelöst werden. Ein vergleichsweise einfacher Ansatz hierfür ist das FDTD-Verfahren (*engl.: Finite-Differences Time-Domain*), das die inhomogenen Gleichungen

$$\frac{\partial \vec{B}}{\partial t} = -\vec{\nabla} \times \vec{\mathcal{E}}$$
$$\frac{\partial \vec{D}}{\partial t} = \vec{\nabla} \times \vec{\mathcal{H}} - \sigma \vec{\mathcal{E}}$$
(C.1)

für das elektrische Feld  $\vec{\mathcal{E}}$ , die dielektrische Verschiebung  $\vec{\mathcal{D}}$ , das magnetischen Feld  $\vec{\mathcal{H}}$ und die magnetische Induktion  $\vec{\mathcal{B}}$  löst [105,106]. Die homogenen Maxwell-Gleichungen werden dagegen nicht direkt einbezogen, da sie von den Gleichungen automatisch erfüllt werden, wenn die Rand- und Anfangsbedingungen sie berücksichtigen [106]. Das FDTD-Verfahren ist in der Elektrotechnik weit verbreitet und wurde auch bereits erfolgreich zur Berechnung von Lichtstreuung an dielektrischen Partikeln oder zur Auslegung von diffraktiven optischen Elementen verwendet [195–198]. Im Folgenden soll nur der in dieser Arbeit hauptsächlich verwendete, rotationssymmetrische Lösungsansatz kurz skizziert werden. Grundsätzlich lässt sich das FDTD-Verfahren jedoch auf beliebige Rechennetze anwenden [199].

Bei rotationssymmetrischen Problemen wie der Ausbreitung eines gaußförmigen Laserstrahls bietet sich eine Diskretisierung des Problems in Zylinderkoordinaten an. Die azimutale Feldverteilung kann dann durch Feldansätze der Form

$$\vec{\mathcal{E}}(r,\varphi,z,t) = \sum_{k=0}^{\infty} \vec{\mathcal{E}}_1(r,k,z,t) \cos(k\varphi) + \vec{\mathcal{E}}_2(r,k,z,t) \sin(k\varphi)$$
(C.2)

in Moden zerlegt werden [197]. Falls das elektrische Feld dabei linear, z.B. in x-Richtung, polarisiert ist und der Strahl entlang der Symmetrieachse propagiert, müssen nur die Terme  $\mathcal{E}_{1,\rho}$ ,  $\mathcal{E}_{2,\varphi}$ ,  $\mathcal{E}_{1,z}$ ,  $\mathcal{H}_{2,\rho}$ ,  $\mathcal{H}_{1,\varphi}$  und  $\mathcal{H}_{2,z}$  des Grundmodes k = 1 berücksichtigt werden. Bei geeigneter Anordnung dieser Komponenten im Rechennetz, wie in Bild C.1 dargestellt, können die Maxwell-Gleichungen einfach diskretisiert werden. Die Berechnung des elektrischen Felds  $\vec{\mathcal{E}}^{(n+1/2)}$  erfolgt um einen halben Zeitschritt gegenüber der des magnetischen Felds  $\vec{\mathcal{H}}^{(n)}$  versetzt. Die Strahlquelle muss innerhalb des Rechengebietes definiert werden. Ist die analytische Ansatzfunktion wie bei ebenen Wellen oder einem paraxialen Gaußstrahl bekannt, so kann das Feld auf dem Rand eines geschlossenen Volumens vorgegeben werden [106].

Besonderes Augenmerk muss auf die Randbedingungen gelegt werden, um eine Rückreflexion der Wellen an den Begrenzungen des Rechennetzes zu verhindern. Hierbei haben sich die so genannten PML-Randbedingungen (*engl.: perfectly matched layer*) bewährt, bei denen am Rand zusätzliche Zellen mit angepasstem Wellenwiderstand eingefügt werden, welche die Welle absorbieren aber nicht reflektieren [200–202]. Eine solche Anpassung ist nur dann für beliebige Wellenlängen und Auftreffwinkel möglich, wenn hier eine fiktive magnetische Leitfähigkeit zusammen mit der für die Absorption verantwortlichen elektrischen verwendet wird, so dass ein zusätzlicher Freiheitsgrad in Gleichung (C.1) entsteht. Diese Leitfähigkeiten werden aufeinander abgestimmt und graduell zum Rand hin erhöht.



**Bild C.1:** Anordnung der Feldkomponenten innerhalb der Netzzelle (i,j) beim rotationssymmetrischen FDTD-Verfahren.

Die Materialeigenschaften werden schließlich in jeder Netzzelle durch eine Dispersionsrelation definiert, die das elektrische Feld  $\vec{\mathcal{E}}$  mit der dielektrischen Verschiebungsdichte  $\vec{\mathcal{D}}$  verbindet. Bei dielektrischen Materialien genügt hierfür die Angabe einer reellen Dielektrizitätskonstante  $\varepsilon$ . Bei Metallen muss jedoch auch die für die Absorption verantwortliche Phasenverschiebung von  $\vec{\mathcal{D}}$  und  $\vec{\mathcal{E}}$  berücksichtigt werden. Dazu wird eine weitere Differenzialgleichung, welche die zeitliche Entwicklung der Polarisation beschreibt, einbezogen [203,204]. Die elektrische Leitfähigkeit  $\sigma_{el}$  ist dann in dieser Dispersionsrelation enthalten und braucht nicht extra definiert werden. Zur Berechnung der Strahlpropagation und der Energieeinkopplung bei der Lasermaterialbearbeitung können dagegen die magnetischen Materialeigenschaften meist vernachlässigt werden.

Durch die Möglichkeit, die Materialeigenschaften für jede Netzzelle einzeln definieren zu können ist das FDTD-Verfahren sehr vielseitig verwendbar. Bei der Diskretisierung sollte jedoch beachtet werden, dass die räumliche Zellenabmessung nicht größer als etwa 5 % der Wellenlänge sein sollte und dass der Zeitschritt aus Stabilitätsgründen das Courant-Friedrich-Levy-Kriterium für explizite Algorithmen erfüllen muss. Dadurch bleibt dieser Ansatz für optische Probleme auf die Berechnung mikroskopischer Aufgabenstellungen mit Abmessungen von einigen 10–100 µm begrenzt. Falls zudem die Absorption in einem Metall berechnet werden soll, so muss die Zellengröße weiter auf die Größenordnung der optischen Eindringtiefe verringert werden. Dies kann bei Verwendung adaptiver Rechennetze jedoch auch lokal erfolgen. Insgesamt ist der Arbeitsspeicheraufwand durch die Vielzahl der vektoriellen Komponenten allerdings relativ hoch. Da die Lösung der Maxwell-Gleichungen iterativ in der Zeit erfolgt, muss bei kontinuierlicher Anregung so lange gerechnet werden, bis die Lösung nahezu stationär ist. Dazu genügen meist wenige Durchquerungen der Welle durch das gesamte Rechengebiet. Die Rechenzeit für die in dieser Arbeit vorgestellten Fragestellungen betrug typischerweise einige Stunden bis wenige Tage auf einem PC mit 1 GHz Taktfrequenz.

# D Erwärmung eines sphärischen Hohlraums

In den meisten Fällen lässt sich die Erwärmung von dreidimensionalen Objekten durch Laserstrahlung, mit Ausnahme von hochsymmetrischen Geometrien, nicht analytisch beschreiben [161]. Letztere können jedoch eine hilfreiche Näherung zur Beschreibung des Aufwärmvorgangs bei komplexeren Oberflächenkonturen sein. In Kapitel 4.3.2 wird z. B. ein analytisches Modell vorgestellt, das die Erwärmung der Bohrspitze durch Vergleich mit der eines sphärischen Hohlraums von gleichem Krümmungsradius  $r_{\kappa}$  beschreibt. Die sphärisch (l = 2) bzw. zylindrisch (l = 1) symmetrische Wärmeleitungsgleichung lässt sich unter Verwendung nichtdimensionaler Größen folgendermaßen schreiben:

$$\frac{\partial \Theta(x,y)}{\partial y} - \frac{\partial^2 \Theta(x,y)}{\partial x^2} - \frac{l}{x} \frac{\partial \Theta(x,y)}{\partial x} = 0$$
$$x = \frac{r}{r_{\kappa}}, y = \frac{\kappa_{\rm th}t}{r_{\kappa}^2}, \Theta = \frac{T - T_{\infty}}{T_{\rm b} - T_{\infty}}.$$
(D.1)

Diese Gleichung kann durch eine Laplace-Transformation in der Zeitkoordinate y und geeignete Substitution in die Besselsche Differenzialgleichung umgeformt werden, deren Lösung durch

$$Q(x,p) = \mathcal{L}_{y \to p}[\Theta(x,y)] = \frac{F K_m(x\sqrt{p})}{x^m \sqrt{p^3} K_{m+1}(\sqrt{p})} = \frac{Q(x,p)}{p}$$
(D.2)

mit  $m = \frac{1}{2}(l-1)$  und  $F = AEr_{\kappa}[\lambda_{\rm th}(T_{\rm b} - T_{\infty})]^{-1}$  gegeben ist. Hierbei wurde angenommen, dass die Oberfläche gleichmäßig durch eine Leistungsdichte *AE* erwärmt wird. Die Rücktransformation von Gleichung (D.2) ist aufgrund der hierin auftretenden modifizierten Besselfunktionen der zweiten Art K<sub>m</sub> vergleichsweise aufwändig. Es ist deshalb empfehlenswert zuerst  $\tilde{Q}(x,p)$  zu transformieren und dann  $\Theta(x,y)$  durch Integration dieser Lösung über y zu bestimmen. Bei der Rücktransformation muss, wie in Bild D.1 dargestellt, der Integrationspfad in der komplexen Ebene so gewählt werden, dass die Unstetigkeit entlang der negativen reellen Achse vermieden wird. Das komplexe Integral kann dann



**Bild D.1:** Integrationspfad für die Laplace-Rücktransformation von Gleichung (D.2).

durch den Residuensatz ausgewertet werden. Die Lösung für die transiente Temperatur lässt sich als Funktion der Besselfunktionen erster und zweiter Art,  $J_m$  bzw.  $Y_m$ , ausdrücken:

$$\Theta(x,y) = \frac{2F}{\pi x^m} \int_0^\infty \left[ 1 - \exp(-y\eta^2) \right] \frac{Y_m(x\eta) J_{m+1}(\eta) - J_m(x\eta) Y_{m+1}(\eta)}{\eta^2 \left[ J_{m+1}^2(\eta) + J_{m+1}^2(\eta) \right]} d\eta. \quad (D.3)$$

Dieses Integral vereinfacht sich im Fall eines sphärischen Hohlraums ( $m = \frac{1}{2}$ ) zu Gleichung (4.16).

# Literatur- und Quellenverzeichnis

- [1] RADTKE, J.; ABELN, T.; DAUSINGER, F.; BECK, M.: Bauteile und Werkzeuge aus Faserverbundwerkstoffen und Siliziumnitrid. In: Präzisionsabtragen mit Lasern - BMBF-Projektverbund: Laserinduzierte Fertigungsverfahren - Abtragen mit Laserphotonen (ABLATE). Düsseldorf: VDI-Technologiezentrum Physikalische Technologien, 2000, S. 66–78 (Laser in der Materialbearbeitung Bd. 12).
- [2] RADTKE, J.; ABELN, T.; DAUSINGER, F.; JASCHINSKI, W.: Mikrodüsen aus Oxidkeramiken - Verbundprojekt: Präzises Bohren und Abtragen metallischer und keramischer Werkstoffe (PRABO). In: Präzisionsabtragen mit Lasern - BMBF-Projektverbund: Laserinduzierte Fertigungsverfahren - Abtragen mit Laserphotonen (ABLATE). Düsseldorf: VDI-Technologiezentrum Physikalische Technologien, 2000, S. 79–91 (Laser in der Materialbearbeitung Bd. 12).
- [3] GIERING, A.; BECK, M.; BAHNMÜLLER, J.: Laser drilling of aerospace and automotive components. In: Proceedings of 18th International Congress on Applications of Lasers and Electro-Optics (ICALEO'99). Orlando: Laser Inst. America, 2000, S. C80–C87 (LIA Bd. 87).
- [4] EBERT, R.; HIRTHE, L.; KEIPER, B.; EXNER, H.: Laserschneiden von monokristallinem Diamant (MKD). Laser Magazin 3 (2000), S. 18–19.
- [5] DE PAOLI, A.; RAPP, J.: Laseranwendung in der Kraftstoffeinspritztechnik. In: Proceedings Stuttgarter Lasertage (SLT) '99. Stuttgart: FGSW, 1999, S. 8–11.
- [6] GIEDL, R.; WAGNER, F.; WILD, M.; HELML, H.: Bohren von Metall mit Nanosekundenlaser. In: Grub, A. (Hrsg.): Kurzpulstechnologie in der Anwendung: Präzisionsbohren (Proc. Photonics BW '02, Stuttgart). Oberkochen: Photonics BW, 2002, S. 141–162.
- [7] ROHDE, H.; MEINERS, E.: Trepan drilling of fuel injection nozzles with a TEM<sub>00</sub> Nd:YAG slab laser. J. Laser Appl. 8 (1996), S. 95–101.
- [8] ABELN, T.; KLINK, U.: Laserstrukturieren zur Verbesserung der tribologischen Eigenschaften von Oberflächen. In: Dausinger, F.; Hügel, H.; Müller, M.; Weick, J. M. (Hrsg.): Stuttgarter Lasertage SLT '01 (Stuttgart). Stuttgart: FGSW, 2001, S. 61–64.
- [9] MEINERS, E.; SAUTER, J.; FREUND, M.: *Herstellung rotativer Prägeformen mit Laser*. In: Proceedings Stuttgarter Lasertage (SLT) '99. Stuttgart: FGSW, 1999, S. 36–39.

- [10] WEIKERT, M.; FÖHL, C.; DAUSINGER, F.: Surface structuring of metals with ultrashort laser pulses. In: Miyamoto, I.; Kobayashi, K.; Sugioka, K.; Poprawe, R.; Helvajian, H. (Hrsg.): Third International Symposium on Laser Precision Microfabrication LPM 2002 (Osaka). Bellingham: Intl. Soc. for Optical Engineering, 2003, S. 501–505 (Proc. SPIE Bd. 4830).
- [11] GOWER, M. C.: Industrial applications of laser micromachining. Optics Express 7 (2000) Nr. 2, S. 56–67.
- [12] KAUTEK, W.; MITTERER, S.; KRUGER, J.; HUSINSKY, W.; GRABNER, G.: Femtosecond-pulse laser ablation of human corneas. Appl. Phys. A A58 (1994) Nr. 5, S. 513–518.
- [13] LASER ZENTRUM HANNOVER: Femtosekundenlaser in der Mittelohrchirurgie. Laser Magazin 4 (2002), S. 24.
- [14] LASER ZENTRUM HANNOVER: Vielversprechende Resultate in der Augenchirurgie. Laser Magazin 5 (2002), S. 16.
- [15] MAATZ, G.; HEISTERKAMP, A.; LUBATSCHOWSKI, H.; BARCIKOWSKI, S.; FALLNICH, C.; WELLING, H.; ERTMER, W.: Chemical and physical side effects at application of ultrashort laser pulses for intrastromal refractive surgery. J. Optics A: Pure Appl. Opt. 2 (2000), S. 59–64.
- [16] NEEV, J.; DA SILVA, L. B.; FEIT, M. D.; PERRY, M. D.; RUBENCHIK, A. M.; STUART, B. C.: Ultrashort pulse lasers for hard tissue ablation. IEEE J. of Sel. Topics in Quantum Electronics 2 (1996) Nr. 4, S. 790–800.
- [17] FRIED, D.; ZUERLEIN, M.; FEATHERSTONE, J. D. B.; SEKA, W.; DUHN, C.; MCCORMACK, S. M.: *IR laser ablation of dental enamel: mechanistic dependence on the primary absorber*. Appl. Surf. Science. **129** (1998), S. 852–856.
- [18] CHICHKOV, B. N.; MOMMA, C.; NOLTE, S.; VON ALVENSLEBEN, F.; TÜN-NERMANN, A.: Femtosecond, picosecond and nanosecond laser ablation of solids. Appl. Phys. A 63 (1996) Nr. 2, S. 109–115.
- [19] MOMMA, C.; NOLTE, S.; CHICHKOV, B. N.; VON ALVENSLEBEN, F.; TÜN-NERMANN, A.: Präzise Mikro-Bearbeitung mit Femtosekunden-Laserpulsen. Laser und Optoelektronik 29 (1997) Nr. 3, S. 82–89.
- [20] FÖHL, C.; BREITLING, D.; JASPER, K.; RADTKE, J.; DAUSINGER, F.: Precision drilling of metals and ceramics with short and ultrashort pulsed solid state lasers. In: Miyamoto, I.; Lu, Y. F. (Hrsg.): Second International Symposium on Laser Precision Microfabrication LPM 2001 (Singapore). Bellingham: Intl. Soc. for Optical Engineering, 2001, S. 104–107 (Proc. SPIE Bd. 4426).
- [21] MORE, R. M.; WARREN, K. H.; YOUNG, D. A.; ZIMMERMAN, G. B.: A new quotidian equation of state (QEOS) for hot dense matter. Physics of Fluids 31 (1988) Nr. 10, S. 3059–3078.

- [22] BREITLING, D.; RUF, A.; BERGER, P.; DAUSINGER, F.; KLIMENTOV, S.; PI-VOVAROV, P.; KONONENKO, T.; KONOV, V.: *Plasma effects during ablation and drilling using pulsed solid-state lasers*. In: Dausinger, F.; Konov, V.; Baranov, V.; Panchenko, V. (Hrsg.): Conference on Lasers, Applications, and Technologies LAT 2002 (Moscow). Bellingham: Intl. Soc. for Optical Engineering, 2003, S. 24–33 (Proc. SPIE Bd. 5121).
- [23] KLIMENTOV, S. M.; KONONENKO, T. V.; PIVOVAROV, P. A.; GARNOV, S. V.; KONOV, V. I.; BREITLING, D.; DAUSINGER, F.: *Effect of nonlinear scattering* of radiation in air on material ablation by femtosecond laser pulses. In: Dausinger, F.; Konov, V.; Baranov, V.; Panchenko, V. (Hrsg.): Conference on Lasers, Applications, and Technologies LAT 2002 (Moscow). Bellingham: Intl. Soc. for Optical Engineering, 2003, S. 77–86 (Proc. SPIE Bd. 5121).
- [24] BREITLING, D.; KONONENKO, T. V.; KLIMENTOV, S. M.; BERGER, P.; KO-NOV, V. I.; DAUSINGER, F.: *Hole formation and drilling progress analysis during high-aspect ratio drilling using ultra-short pulsed solid-state lasers*. In: Frühjahrstagung 2001 der Deutschen Physikalischen Gesellschaft (Berlin). Weinheim: Physikverlag GmbH, 2001, S. 105 (Verhandl. DPG (VI) Bd. 36).
- [25] RUF, A.; BREITLING, D.; FÖHL, C.; RADTKE, J.; DAUSINGER, F.; HÜGEL, H.; KONONENKO, T.; KLIMENTOV, S.; GARNOV, S.; KONOV, V.; SUZUKI, J.: Modeling and experimental analysis of hole formation in laser deep drilling with short and ultra-short pulses. In: Wissenschaftliche Gesellschaft Lasertechnik e.V. (Hrsg.): 1st Int. WLT-Conference Lasers in Manufacturing (München). Stuttgart: AT-Fachverlag GmbH, 2001, S. 214–226.
- [26] RADTKE, J.: Herstellung von Präzisionsdurchbrüchen in keramischen Werkstoffen mittels repetierender Laserbearbeitung. München: Herbert Utz Verlag, 2003. Universität Stuttgart, Dissertation (Laser in der Materialbearbeitung - Forschungsberichte des IFSW).
- [27] YABE, T.; MOCHIZUKI, T.; HARA, H.: Multi-dimensional hydrodynamic simulation of laser-induced evaporation dynamics. In: Matsunawa, A.; Katayama, S. (Hrsg.): Proc. Intl. Conf. on Laser Advanced Materials Processing LAMP '92 (Nagaoka). Osaka: High Temperature Society of Japan, 1992, S. 387–392.
- [28] YABE, T.: Three-dimensional simulation of melting and evaporation dynamics by the unified solver CIP for solid, liquid and gas. Trans. JWRI 25 (1996) Nr. 2, S. 23–31.
- [29] MAYER, A.: Lasermarkt: Stand und Perspektiven. In: Dausinger, F.; Hügel, H.; Müller, M.; Weick, J. M. (Hrsg.): Stuttgarter Lasertage SLT '01 (Stuttgart). Stuttgart: FGSW, 2001, S. 1–6.

- [30] SINHOFF, V.: Moderne Lasertechnik revolutioniert spanende Fertigungsverfahren. Industrieanzeiger 6 (1997), S. 24–27.
- [31] DAUSINGER, F.; ABELN, T.; BREITLING, D.; RADKE, J.; KONOV, V.; GAR-NOV, S.; KLIMENTOV, S.; KONONENKO, T.; TSARKOVA, O.: Bohren keramischer Werkstoffe mit Kurzpuls-Festkörperlasern. LaserOpto 31 (1999) Nr. 3, S. 78–85.
- [32] DAUSINGER, F.: Bohren mit kurzen und ultrakurzen Laserpulsen: Von den Grundlagen zu industriellen Anwendungen. In: Grub, A. (Hrsg.): Kurzpulstechnologie in der Anwendung: Präzisionsbohren (Proc. Photonics BW '02, Stuttgart). Oberkochen: Photonics BW, 2002, S. 105–140.
- [33] DAUSINGER, F.; HÜGEL, H.; KONOV, V.: Micro-machining with ultrashort laser pulses: From basic understanding to technical applications. In: Weber, H.; Konov, V.; Graf, T. (Hrsg.): Intl. Conference on Advanced Laser Technologies ALT-02, 2002 (Adelboden). Bellingham: Intl. Soc. for Optical Engineering, 2003, S. 106–115 (Proc. SPIE Bd. 5147).
- [34] DAUSINGER, F.: Femtosecond technology for precision manufacturing: fundamental and technical aspects. In: Miyamoto, I.; Kobayashi, K.; Sugioka, K.; Poprawe, R.; Helvajian, H. (Hrsg.): Third International Symposium on Laser Precision Microfabrication LPM 2002 (Osaka). Bellingham: Intl. Soc. for Optical Engineering, 2003, S. 471–478 (Proc. SPIE Bd. 4830).
- [35] BASOV, N. G.; GRIBKOV, V. A.; KROKHIN, O. N.; SKLIZKOV, G. V.: High temperature effects of intense laser emission focused on a solid target. Sov. Phys. JETP 27 (1968) Nr. 4, S. 575–582.
- [36] BREITLING, D.; SCHITTENHELM, H.; BERGER, P.; DAUSINGER, F.; HÜGEL, H.: Shadowgraphic and interferometric investigations on Nd:YAG laser-induced vapor/plasma plumes for different processing wavelengths. In: Lapucci, A.; Ciofini, M. (Hrsg.): XIII Intl. Symposium on Gas Flow and Chemical Lasers and High-Power Laser Conference GCL/HPL 2000 (Florence). Bellingham: Intl. Soc. for Optical Engineering, 2001, S. 534–538 (Proc. SPIE Bd. 4184).
- [37] CHANG, J. J.; WARNER, B. E.: Laser-plasma interaction during visible-laser ablation of methods. Appl. Phys. Lett. 69 (1996), S. 473–475.
- [38] ANISIMOV, S. I.; BONCH-BRUEVICH, A. M.; ELYASHEVICH, M. A.; IMAS, Y. A.; ROMANOV, N. A. P. G. S.: *Effect of powerful light fluxes on metals*. Sov. Phys. - Techn. Phys. **11** (1967) Nr. 7, S. 945–952.
- [39] BASU, S.; DEBROY, T.: Liquid metal expulsion during laser irradiation. J. Appl. Phys. 72 (1992) Nr. 8, S. 3317–3322.
- [40] WILLIS, D. A.; XU, X.: Transport phenomena and droplet formation during pulsed laser interaction with thin films. J. Heat Trans. 122 (2000), S. 763–770.

- [41] FRENCH, P. W.; HAND, D. P.; PETERS, C.; SHANNON, G. J.; BYRD, P.; STEEN, W. M.: Investigation of the Nd:YAG laser percussion drilling process using high speed filming. In: Beyer, E.; Chen, X.; Miyamoto, I. (Hrsg.): Proc. Laser Materials Processing Conf. ICALEO '98 (Orlando). Orlando: Laser Inst. of America, 1998, S. B1–B10 (LIA Bd. 85).
- [42] KARASEV, I. G.; KIRILLOV, V. M.; NORSKII, V. E.; SAMOILOV, V. I.; ULYAKOV, P. I.: *Disintegration of metals by a laser beam*. Sov. Phys. Tech. Phys. 15 (1971) Nr. 9, S. 1523–1527.
- [43] RODDEN, W. S. O.; SOLANA, P.; KUDESIA, S. S.; HAND, D. P.; KAPADIA, P.; DOWDEN, J.; JONES, J. D. C.: *Melt-ejection processes in single pulse Nd:YAG laser drilling*. In: Christensen, P.; Denney, P.; Miyamoto, I.; Watkins, K. (Hrsg.): Proc. Laser Materials Processing Conf. ICALEO '99 (San Diego). Orlando: Laser Inst. of America, 2000, S. C61–C69 (LIA Bd. 87).
- [44] SOLANA, P.; KAPADIA, P.; DOWDEN, J.; RODDEN, W. S. O.; KUDESIA, S. S.; HAND, D. P.; JONES, J. D. C.: *Time dependent ablation and liquid ejection processes during the laser drilling of metals.* Opt. Comm. **191** (2001), S. 97–112.
- [45] ZHIRYAKOV, B. M.; POPOV, N. I.; SAMOKHIN, A. A.: Influence of a plasma on the interaction of laser radiation with a metal. Sov. Phys. JETP 48 (1979) Nr. 2, S. 247.
- [46] LUFT, A.; FRANZ, U.; EMSERMANN, A.; KASPAR, J.: A study of thermal and mechanical effects on materials induced by pulsed laser drilling. Appl. Phys. A 63 (1996), S. 93–101.
- [47] SIANO, S.; PINI, R.; SALIMBENI, R.: Variable energy blast modeling of the stress generation associated with laser ablation. Appl. Phys. Lett. 74 (1999) Nr. 9, S. 1233–1235.
- [48] PIRRI, A. N.: Theory for momentum transfer to a surface with a high-power laser. Phys. Fluids 16 (1973) Nr. 9, S. 1435–1440.
- [49] RAIZER, Y. P.: *Heating of a gas by a powerful light pulse*. Sov. Phys. JETP 21 (1965) Nr. 5, S. 1009–1017.
- [50] SCHITTENHELM, H.; CALLIES, G.; BERGER, P.; HÜGEL, H.: Two-wavelength interferometry on excimer laser induced vapor/plasma plumes during the laser pulse. Appl. Surf. Science 127–129 (1998), S. 922–917.
- [51] AMORUSO, S.; ARMENANTE, M.; BERARDI, V.; BRUZZESE, R.; SPINELLI, N.: Absorption and saturation mechanisms in aluminium laser ablated plasmas. Appl. Phys. A 65 (1997) Nr. 3, S. 265–271.
- [52] DYER, P. E.: Electrical characterization of plasma generation in KrF laser Cu ablation. Appl. Phys. Lett. 55 (1989) Nr. 16, S. 1630–1632.

- [53] NERSISYAN, G. T.; PAPANYAN, V. O.: Spectroscopic diagnostics of carbon and aluminum laser-produced plasmas. Optics and Spectroscopy 89 (2000) Nr. 3, S. 344–347.
- [54] BREITLING, D.; SCHITTENHELM, H.; BERGER, P.; DAUSINGER, F.; HÜGEL, H.: Shadowgraphic and interferometric investigations on Nd:YAG laser-induced vapor/plasma plumes for different processing wavelengths. Appl. Phys. A 69S (1999), S. 505–508.
- [55] KONONENKO, T. V.; KLIMENTOV, S. M.; KONOV, V. I.; PIVOVAROV, P. A.; GARNOV, S. V.; DAUSINGER, F.; BREITLING, D.: Propagation of short-pulsed laser radiation and stages of ablative deep-channel formation. In: Gower, M. C.; Helvajian, H.; Sugioka, K.; Dubowski, J. J. (Hrsg.): Laser Applications in Microelectronic and Optoelectronic Manufacturing VI. Bellingham: Intl. Soc. for Optical Engineering, 2001, S. 248–257 (Proc. SPIE Bd. 4274).
- [56] SCHITTENHELM, H.: Diagnostik des laserinduzierten Plasmas beim Abtragen und Schweißen. München: Herbert Utz Verlag, 2000. Universität Stuttgart, Dissertation (Laser in der Materialbearbeitung - Forschungsberichte des IFSW).
- [57] BREITLING, D.; RUF, A.; DAUSINGER, F.; KLIMENTOV, S.; KONONENKO, T.; KONOV, V.; SUZUKI, J.: Bausteine zum Prozeβverständnis beim Laserbohren. In: Dausinger, F.; Hügel, H.; Müller, M.; Weick, J. M. (Hrsg.): Proc. Stuttgarter Lasertage SLT '01 (Stuttgart). Stuttgart: FGSW, 2001, S. 50–55.
- [58] KLIMENTOV, S. M.; KONONENKO, T. V.; PIVOVAROV, P. A.; GARNOV, S. V.; KONOV, V. I.; PROKHOROV, A. M.; BREITLING, D.; DAUSINGER, F.: *The role* of plasma in ablation of materials by ultrashort laser pulses. In: Wissenschaftliche Gesellschaft Lasertechnik (WLT) e.V. (Hrsg.): 1st Int. WLT-Conference Lasers in Manufacturing (München). Stuttgart: AT Fachverlag GmbH, 2001, S. 273–283.
- [59] KONONENKO, T. V.; KONOV, V. I.; GARNOV, S. V.; KLIMENTOV, S. M.; DAUSINGER, F.: Dynamics of deep short pulse laser drilling: ablative stages and light propagation. Laser Physics 11 (2001) Nr. 3, S. 343–351.
- [60] ABELN, T.; RADTKE, J.; DAUSINGER, F.: High precision drilling with shortpulsed solid-state lasers. In: Christensen, P.; Herman, P.; Patel, R. (Hrsg.): Proc. Laser Microfabrication Conf. ICALEO '99 (San Diego). Orlando: Laser Institute of America, 2000, S. 195–203 (LIA Bd. 88).
- [61] READY, J. F.: Effects due to absorption of laser radiation. J. Appl. Phys. 36 (1965) Nr. 2, S. 462–468.
- [62] DABBY, F. W.; PAEK, U. C.: *High-intensity laser-induced vaporization and explosion of solid material*. IEEE J. of Quantum Electronics QE-8 (1972) Nr. 2, S. 106–111.

- [63] ANDREWS, J. G.; ATTHEY, D. R.: On the motion of an intensely heated evaporating boundary. Journal of the Inst. of Mathematics and its Applications 15 (1975) Nr. 1, S. 59–72.
- [64] HE, M.; BISHOP, P. J.; MINARDI, A.: Prediction of cavity shape and material removal rates using a two dimensional axisymmetric heat conduction model for fibrous ceramic insulation and comparison with experiments. J. Laser Applications 5 (1993) Nr. 1, S. 33–40.
- [65] CALLIES, G.; SCHITTENHELM, H.; BERGER, P.; HÜGEL, H.: Simulation des Laserabtragens mit 3D-Wärmeleitungsmodell. In: Dausinger, F.; Bergmann, H. W.; Sigel, J. (Hrsg.): Proceedings of the 6th European Conference on Laser Treatment of Materials (ECLAT '96, Stuttgart). Wiesbaden: Arbeitsgemeinschaft Wärmebehandlung und Werkstofftechnik e. V, 1996, S. 613–620.
- [66] MODEST, M. F.: Three-dimensional, transient model for laser machining of ablating/decomposing materials. Int. J. of Heat and Mass Transfer 39 (1996) Nr. 2, S. 221–234.
- [67] MODEST, M. F.: Laser through-cutting and drilling models for ablating/decomposing materials. J. Laser Applications **9** (1997), S. 137–145.
- [68] MODEST, M. F.: Minimization of elastic thermal stresses during laser machining of ceramics using a dual-beam arrangement. J. Laser Applications 13 (2001) Nr. 3, S. 111–117.
- [69] KAR, A.; ROCKSTROH, T.; MAZUMDER, J.: Two-dimensional model for laserinduced materials damage: effects of assist gas and multiple reflections inside the cavity. J. Appl. Phys. 71 (1992) Nr. 6, S. 2560–2569.
- [70] ANISIMOV, S. I.; KAPELIOVICH, B. L.; PERELMAN, T. L.: Electron emission from metal surfaces exposed to ultrashort laser pulses. Sov. Phys. JETP 39 (1974) Nr. 2, S. 375.
- [71] KAR, A.; CHAN, C. L.; MAZUMDER, J.: Comparative studies on nonlinear hyperbolic and parabolic heat conduction for various boundary conditions: analytic and numerical solutions. J. of Heat Transfer 114 (1992) Nr. 1, S. 14–20.
- [72] QIU, T. Q.; TIEN, C. L.: Heat transfer mechanisms during short-pulse laser heating of metals. J. of Heat Transfer 115 (1993) Nr. 4, S. 835–841.
- [73] HÜTTNER, B.; ROHR, G.: On the theory of ps and sub-ps laser pulse interaction with metals - I. Surface temperature. Appl. Surf. Science 103 (1996) Nr. 3, S. 269–274.
- [74] KÖRNER, C.: *Theoretische Untersuchungen zur Wechselwirkung von ultrakurzen Laserpulsen mit Metallen.* 1997. Universität Erlangen-Nürnberg, Dissertation.

- [75] RETHFELD, B.; KAISER, A.; VICANEK, M.; SIMON, G.: Irradiation of solids with subpicosecond laser pulses: excitation and relaxation dynamics of electrons and phonons. In: High–Power Laser Ablation. Intl. Soc. for Optical Engineering, 1998, S. 388–399 (Proc. SPIE Bd. 3343).
- [76] HÜTTNER, B.: On the physics at short laser pulses. Lasers in Engineering 8 (1999), S. 319–337.
- [77] VON ALLMEN, M.: Laser drilling velocity in metals. J. Appl. Phys. 47 (1976) Nr. 12, S. 5460–5463.
- [78] CHAN, C. L.; MAZUMDER, J.: One-dimensional steady-state model for damage by vaporization and liquid expulsion due to laser-material interaction. J. Appl. Phys. 62 (1987) Nr. 11, S. 4579–4586.
- [79] SMUROV, I.; AKSENOV, L.; FLAMANT, G.: Melt removal in pulsed laser action of millisecond range. In: Denney, P.; Miyamoto, I.; Mordike, B. L. (Hrsg.): Proc. Laser Materials Processing Conf. ICALEO '93 (Orlando). Orlando: Laser Inst. of America, 1994, S. 242–249 (LIA Bd. 77).
- [80] BATTEH, J. J.; CHEN, M. M.; MAZUMDER, J.: A stagnation flow analysis of the heat transfer and fluid flow phenomena in laser drilling. J. of Heat Transfer 122 (2000) Nr. 4, S. 801–807.
- [81] GANESH, R. K.; BOWLEY, W. W.; BELLANTONE, R. R.; HAHN, Y.: A model for laser hole drilling in metals. J. Comp. Phys. 125 (1996) Nr. 1, S. 161–176.
- [82] GANESH, R. K.; FAGHRI, A.; HAHN, Y.: A generalized thermal modeling for laser drilling process – I. Mathematical modeling and numerical methodology. Int. J. of Heat and Mass Transfer 40 (1997) Nr. 14, S. 3351–3360.
- [83] BOARDMAN, A. D.; CRESSWELL, B.; ANDERSON, J.: An analytical model for the laser ablation of materials. Appl. Surf. Science 96-98 (1996), S. 55–60.
- [84] LUNNEY, J. G.; JORDAN, R.: Pulsed laser ablation of metals. Appl. Surf. Science 127-129 (1998), S. 941–946.
- [85] SOLANA, P.; KAPADIA, P.; DOWDEN, J. M.; MARSDEN, P. J.: An analytical model for the laser drilling of metals with absorption within the vapour. J. Phys. D: Appl. Phys. 32 (1999) Nr. 8, S. 942–952.
- [86] SEDOV, L. I.: Similarity and Dimensional Methods in Mechanics. London: Cleaver–Hume Press, 1959.
- [87] AFANASIEV, Y. V.; KROKHIN, O. N.: Vaporization of matter exposed to laser emission. Sov. Phys. JETP 25 (1967) Nr. 4, S. 639–645.
- [88] SIBOLD, D.; URBASSEK, H. M.: Gas-dynamic study of pulsed desorption flows into a vacuum. Physics of Fluids A 4 (1992) Nr. 1, S. 165–177.
- [89] ADEN, M.; BEYER, E.; HERZIGER, G.; KUNZE, H.: Laser-induced vaporization of a metal surface. J. Phys. D: Appl. Phys. 25 (1992) Nr. 1, S. 57–65.

- [90] BELLANTONE, R.; HAHN, Y.: Gas dynamics resulting from laser vaporization of metals in one dimension. I. J. Appl. Phys. **76** (1994) Nr. 3, S. 1436–1446.
- [91] HO, J. R.; GRIGOROPOULOS, C. P.; HUMPHREY, J. A. C.: Computational study of heat transfer and gas dynamics in the pulsed laser evaporation of metals. J. Appl. Phys. 78 (1995) Nr. 7, S. 4696–4709.
- [92] HO, J. R.; GRIGOROPOULOS, C. P.; HUMPHREY, J. A. C.: Gas dynamics and radiation heat transfer in the vapor plume produced by pulsed laser irradiation of aluminum. J. Appl. Phys. 79 (1996) Nr. 9, S. 7205–7215.
- [93] CALLIES, G.; SCHITTENHELM, H.; BERGER, P.; HÜGEL, H.: Modeling of the expansion of laser-evaporated matter in argon, helium and nitrogen and the condensation of clusters. Appl. Surf. Science 127-129 (1998), S. 134–141.
- [94] BOLEY, C. D.; EARLY, J. T.: Computational model of drilling with high radiance pulsed lasers. In: McCay, T. D.; Matsunawa, A.; Hügel, H. (Hrsg.): Proceedings of the Laser Materials Processing Symposium (ICALEO 1994, Orlando). Orlando: Laser Inst. of America, 1994, S. 499–508 (LIA Bd. 79).
- [95] EVANS, R. G.; BELL, A. R.; MACGOWAN, B. J.: Numerical studies of laserdriven ablation. J. Phys. D: Appl. Phys. 15 (1982) Nr. 4, S. 711–724.
- [96] KOMASHKO, A. M.; FEIT, M. D.; RUBENCHIK, A. M.; PERRY, M. D.; BANKS, P. S.: Simulation of material removal efficiency with ultrashort laser pulses. Appl. Phys. A 69 (1999), S. 95–98.
- [97] ATANASOV, P. A.; NEDIALKOV, N. N.; IMAMOVA, S. E.; HÜGEL, H.; DAUSINGER, F.; RUF, A.: *Molecular dynamics simulation of ultrashort laser ablation of nickel*. In: 11th International School on Quantum Electronics: Laser Physics and Applications. Intl. Soc. for Optical Engineering, 2001, S. 290–294 (Proc. SPIE Bd. 4397).
- [98] FUKUMOTO, I.; OHMURA, E.; MIYAMOTO, I.: Computer simulation on laser ablation of fcc metal with modified molecular dynamics. In: Fabbro, R.; Kar, A.; Matsunawa, A. (Hrsg.): Proc. Laser Materials Processing Conf. ICALEO '97 (San Diego). Orlando: Laser Inst. of America, 1997, S. C150–C158 (LIA Bd. 83).
- [99] OHMURA, E.: Molecular dynamics simulation on laser ablation of metal and silicon. Int. J. Jap. Soc. Prec. Eng. 32 (1998) Nr. 4, S. 248.
- [100] HERRMANN, R. F. W.; GERLACH, J.; CAMPBELL, E. E. B.: Molecular dynamics simulation of laser ablation of silicon. Nucl. Instr. Methods Phys. Res. B 122 (1997), S. 401–404.
- [101] HERRMANN, R. F. W.; GERLACH, J.; CAMPBELL, E. E. B.: Ultrashort pulse laser ablation of silicon: an MD simulation study. Appl. Phys. A 66 (1998) Nr. 1, S. 35–42.

- [102] LORAZO, P.; LEWIS, L.; MEUNIER, M.: Picosecond pulsed laser ablation of silicon: a molecular-dynamics study. Appl. Surf. Science 168 (2000), S. 276–279.
- [103] ZHIGILEI, L. V.; KODALI, P. B. S.; GARRISON, B. J.: A microscopic view of laser ablation. Journal of Physical Chemistry B. 16 (1998) Nr. 102, S. 2845–2853.
- [104] KEMP, A. J.: Das Zustandsgleichungs-Modell QEOS für heiße, dichte Materie. Max-Planck-Institut für Quantenoptik Garching, Diplomarbeit, 1998.
- [105] YEE, K. S.: Numerical solution of initial boundary value problems involving Maxwell's equations in isotropic media. IEEE Transactions on Antennas and Propagation 14 (1966) Nr. 4, S. 302–307.
- [106] TAFLOVE, A.; HAGNESS, S. C.: Computational electrodynamics. Boston: Artech House, 2000.
- [107] CALLIES, G.: Modellierung von qualitäts- und effektivitätsbestimmenden Mechanismen beim Laserabtragen. Stuttgart: Teubner, 1999. Universität Stuttgart, Dissertation (Laser in der Materialbearbeitung - Forschungsberichte des IFSW).
- [108] OHSE, R. W.; VON TIPPELSKIRCH, H.: The critical constants of the elements and of some refractory materials with high critical temperatures. (A review). High Temperatures – High Pressures 9 (1977) Nr. 4, S. 367–385.
- [109] HESS, H.: Critical data and vapor pressures for aluminium and copper. Zeitschrift fur Metallkunde 89 (1998) Nr. 6, S. 388–393.
- [110] SMITHELLS, C. J.: *Smithells metals reference book*. Oxford: Butterworth-Heinemann, 1992.
- [111] ASHCROFT, N. W.; MERMIN, N. D.: Solid state physics. Orlando: Saunders College, 2000.
- [112] BRYSK, H.; CAMPBELL, P. M.; HAMMERLING, P.: Thermal conduction in laser fusion. Plasma Physics 17 (1975) Nr. 6, S. 473–484.
- [113] EBELING, W.: Thermophysical properties of hot dense plasmas. Stuttgart: Teubner, 1991 (Teubner-Texte zur Physik Bd. 25).
- [114] LEE, Y. T.; MORE, R. M.: An electron conductivity model for dense plasmas. Physics of Fluids 27 (1984) Nr. 5, S. 1273–1286.
- [115] SPITZER, L.: Physics of fully ionized gases, 2. Aufl. New York: Interscience Publ., 1962.
- [116] ALLEN, P. B.: Theory of thermal relaxation of electrons in metals. Phys. Rev. Lett. 59 (1987) Nr. 13, S. 1460–1463.
- [117] BRAGINSKII, S. I.: Transport phenomena in a completely ionized twotemperature plasma. Sov. Phys. JETP 6 (1958) Nr. 2, S. 358–369.
- [118] PAULI, W.: Thermodynamics and the kinetic theory of gases. Mineola: Dover Publ., 2000.

- [119] GATHERS, G. R.: Thermophysical properties of liquid copper and aluminum. Int. J. of Thermophysics 4 (1983) Nr. 3, S. 209–226.
- [120] DAUSINGER, F.: Strahlwerkzeug Laser: Energieeinkopplung und Prozeßeffektivität. Stuttgart: Teubner, 1995. Universität Stuttgart, Habilitationsschrift (Laser in der Materialbearbeitung - Forschungsberichte des IFSW).
- [121] JACKSON, J. D.: Classical electrodynamics. New York: Wiley, 1975.
- [122] ASHCROFT, N. W.; STURM, K.: Interband absorption and the optical properties of polyvalent metals. Phys. Rev. B 3 (1971) Nr. 6, S. 1898–1910.
- [123] HÜTTNER, B.: Optical properties of polyvalent metals in the solid and liquid state: aluminium. Journal of Physics: Condensed Matter 6 (1994) Nr. 13, S. 2459– 2474.
- [124] MILLER, J. C.: Optical properties of liquid metals at high temperatures. Philosophical Magazine 20 (1969) Nr. 168, S. 1115–1132.
- [125] MATHEWSON, A. G.; MYERS, H. P.: Optical absorption in aluminium and the effect of temperature. J. Phys. D: Metal Phys. 2 (1972) Nr. 2, S. 403–415.
- [126] KRISHNAN, S.; NORDINE, P. C.: Optical properties of liquid aluminum in the energy range 1.2–3.5 eV. Phys. Rev. B 47 (1993) Nr. 18, S. 11780–11787.
- [127] KRISHNAN, S.; NORDINE, P. C.: Analysis of the optical properties of liquid aluminum. Phys. Rev. B 48 (1993) Nr. 6, S. 4130–4131.
- [128] MÜLLER-LUFFT, S.: Temperatur- und wellenlängenabhängige Absorption von Aluminium und Aluminiumlegierungen. Universität Stuttgart, Diplomarbeit, 1994.
- [129] PALIK, E. D.: Handbook of optical constants of solids, Bd. 1. New York: Academic Press, 1985.
- [130] BRUCKNER, M.; SCHAFER, J. H.; UHLENBUSCH, J.: Ellipsometric measurement of the optical constants of solid and molten aluminum and copper at  $\lambda = 10.6 \,\mu m$ . J. Appl. Phys. **66** (1989) Nr. 3, S. 1326–1332.
- [131] STERN, G.: Absorptivity of cw CO<sub>2</sub>, CO and YAG-laser beams by different metallic alloys. In: Bergmann, H. W. (Hrsg.): Proceedings of the 3rd European Conference on laser treatment of materials (ECLAT '90). Coburg: Sprechsaal Publ. Group, 1990, S. 25–35.
- [132] ZEL'DOVICH, Y. B.; RAIZER, Y. P.: Physics of Shock Waves and High-Temperature Hydrodynamic Phenomena, Bd. 1. New York: Academic Press, Inc., 1966.
- [133] MAZHUKIN, V. I.; GUSEV, I. V.; SMUROV, I.; FLAMANT, G.: *Kinetics of laser plasma formation in metal vapour*. In: Denny, P.; Miyamoto, I.; Mordike, B. L. (Hrsg.): Proceedings of the Laser Materials Processing Symposium (ICALEO'93, Orlando). Orlando: Laser Inst. of America, 1993, S. 213–223 (LIA Bd. 77).

- [134] STEPANOV, K. L.; BOROVIK, F. N.; KASKOVA, S. I.; ROMANOV, G. S.; TOL-KACH, V. I.: *Continuous absorption spectra of aluminum plasma*. Optics and Spectroscopy **52** (1982) Nr. 4, S. 366–370.
- [135] VON ANGERER, E.; JOOS, G.; SAUR, A.: *Terme und wichtigste Spektrallinien*. In: Eucken, A.; Hellwege, K. H. (Hrsg.): Zahlenwerte und Funktionen aus Physik, Chemie, Astronomie, Geophysik und Technik. Berlin: Springer, 1950 (Landolt-Börnstein Bd. I-1).
- [136] BAILYN, M.: A survey of thermodynamics. New York: AIP Press, 1994.
- [137] CHAKRAVERTY, B. K.: Crystal growth: an introduction, Heterogeneous nucleation and condensation. HARTMAN, P. (Hrsg.). Amsterdam: North-Holland, 1973.
- [138] TOSCHEV, S.: *Homogeneous nucleation*. In: Hartman, P. (Hrsg.): Crystal growth: an introduction. Amsterdam: North-Holland, 1973.
- [139] KELLY, R.; MIOTELLO, A.: Contribution of vaporization and boiling to thermalspike sputtering by ions or laser pulses. Phys. Rev. E 60 (1999) Nr. 3, S. 2616– 2625.
- [140] MARTYNYUK, M. M.: Vaporization and boiling of liquid metal in an exploding wire. Sov. Phys. Tech. Phys. 19 (1974) Nr. 6, S. 793–797.
- [141] MARTYNYUK, M. M.: Critical constants of metals. Russ. J. Phys. Chemistry 57 (1983) Nr. 4, S. 494–501.
- [142] SONG, K. H.; XU, X.: Explosive phase transformation in excimer laser ablation. Appl. Surf. Science 127-129 (1998), S. 111–116.
- [143] YOO, J. H.; JEONG, S. H.; MAO, X. L.; GREIF, R.; RUSSO, R. E.: Evidence for phase-explosion and generation of large particles during high power nanosecond laser ablation of silicon. Appl. Phys. Lett. 76 (2000) Nr. 6, S. 783–785.
- [144] CRACIUN, V.: Comment on "Evidence for phase-explosion and generation of large particles during high power nanosecond laser ablation of silicon" [Appl. Phys. Lett. 76, 783 (2000)]. Appl. Phys. Lett. 79 (2001) Nr. 3, S. 442–443.
- [145] MAZHUKIN, V. I.; SMUROV, I.; FLAMANT, G.: Overheated metastable states in pulsed laser action on ceramics. J. Appl. Phys. 78 (1995) Nr. 2, S. 1259–1270.
- [146] KELLY, R.; MIOTELLO, A.: Comments on explosive mechanisms of laser sputtering. Appl. Surf. Science 96-98 (1996), S. 205–215.
- [147] STOIAN, R.; ROSENFELD, A.; ASHKENASI, D.; HERTEL, I. V.; BULGAKOVA, N. M.; CAMPBELL, E. E. B.: Surface charging and impulsive ion ejection during ultrashort pulsed laser ablation. Phys. Rev. Lett. 88 (2002) Nr. 9, S. 097603.
- [148] CHENG, H. P.; GILLASPY, J. D.: Nanoscale modification of silicon surfaces via Coulomb explosion. Phys. Rev. B 55 (1997) Nr. 4, S. 2628–2636.
- [149] BÄUERLE, D.: Laser processing and chemistry, 3. Aufl. Berlin: Springer, 2000.

- [150] HÜGEL, H.: *Strahlwerkzeug Laser: Eine Einführung*. Stuttgart: Teubner, 1992 (Teubner Studienbücher Maschinenbau).
- [151] SALEH, B. E. A.; TEICH, M. C.: Fundamentals of photonics. New York: Wiley, 1991.
- [152] BORN, M.; WOLF, E.: Principles of optics. Oxford: Pergamon Press, 1986.
- [153] RUF, A.: Geometrische Einflüsse auf das Abtragsverhalten von Metallen und Dielektrika. IFSW, Universität Stuttgart, Interner Bericht, 2000 (Inst. f. Strahlwerkzeuge IFSW 00-31).
- [154] RUF, A.; CALLIES, G.; BERGER, P.; HÜGEL, H.: Influence of multiple reflections on hole shape during laser drilling. In: Kaplan, A.; Schuöcker, D. (Hrsg.): Proceedings on Mathematical Modeling of Material Processing with Lasers. (14th Meeting, Innsbruck, 1999). Wien: ISLT der TU Wien, 1999.
- [155] VAN DE HULST, H. C.: Light scattering by small particles. New York: Dover, 1957.
- [156] KONOV, V. I.; KLIMENTOV, S. M.; KONONENKO, T. V.; GARNOV, S.; PIVO-VAROV, P.; TSARKOVA, O.; MALYUTIN, A.: Präzise Materialbearbeitung mit Ultrakurzpuls-Strahlquellen: Eleventh Quarter Report. Moscow: General Physics Institute of the Russian Academy of Science, 2002.
- [157] ROTHENBERG, J. E.: Pulse splitting during self-focusing in normally dispersive media. Optics Letters 17 (1992) Nr. 8, S. 583–585.
- [158] MLEJNEK, M.; WRIGHT, E. M.; MOLONEY, J. V.: Dynamic spatial replenishment of femtosecond pulses propagating in air. Optics Letters 23 (1998) Nr. 5, S. 382–384.
- [159] JUNNARKAR, M. R.: Short pulse propagation in tight focusing conditions. Optics Communications 195 (2001) Nr. 1-4, S. 273–292.
- [160] RETHFELD, B.; KAISER, A.; VICANEK, M.; SIMON, G.: Femtosecond laserinduced heating of electron gas in aluminium. Appl. Surf. Sc. 96–98 (1996), S. 109–112.
- [161] CARSLAW, H. S.; JAEGER, J. C.: Conduction of heat in solids, 2. Aufl. Oxford: Clarendon Press, 1988.
- [162] ENGIN, D.; KIRBY, K. W.: Development of an analytical model for the laser machining of ceramic and glass-ceramic materials. J. Appl. Phys. 80 (1996) Nr. 2, S. 681–690.
- [163] RUF, A.: Analytische Untersuchungen zu grundlegenden physikalischen Zusammenhängen beim thermischen Laserabtragen. IFSW, Universität Stuttgart, Interner Bericht, 1999 (Inst. f. Strahlwerkzeuge IFSW 00-29).
- [164] PAEK, U. C.; GAGLIANO, F. P.: *Thermal analysis of laser drilling processes*. IEEE Journal of Quantum Electronics QE-8 (1972) Nr. 2, S. 112–119.

- [165] OHMUKAI, M.; TAKIGAWA, Y.; KUROSAWA, K.: Excimer laser irradiation of Si<sub>3</sub>N<sub>4</sub>, films deposited on Si. J. Appl. Phys. 83 (1998) Nr. 7, S. 3556–3559.
- [166] LUKAS, H. L.; WEISS, J.; KRIEG, H.; HENIG, E. T.; PETZOW, G.: *Phase equilibria in Si<sub>3</sub>N<sub>4</sub> and SiC ceramics*. High Temperatures High Pressures 14 (1982), S. 607–615.
- [167] KANAVIN, A. P.; SMETANIN, I. V.; ISAKOV, V. A.; AFANASIEV, Y. V.; CHICH-KOV, B. N.; WELLEGEHAUSEN, B.; NOLTE, S.; MOMMA, C.; TUNNERMANN, A.: Heat transport in metals irradiated by ultrashort laser pulses. Phys. Rev. B 57 (1998) Nr. 23, S. 14698–14703.
- [168] NOLTE, S.; MOMMA, C.; JACOBS, H.; TUNNERMANN, A.; CHICHKOV, B. N.; WELLEGEHAUSEN, B.; WELLING, H.: Ablation of metals by ultrashort laser pulses. J. Opt. Soc. America B 14 (1997) Nr. 10, S. 2716–2722.
- [169] JOSEPH, D. D.; PREZIOSI, L.: *Heat waves*. Rev. Mod. Phys. 61 (1989) Nr. 1, S. 41–73.
- [170] JOSEPH, D. D.; PREZIOSI, L.: Addendum to the paper 'Heat waves' (Rev. Mod. Phys. 61, 41 (1989)). Rev. Mod. Phys. 62 (1990) Nr. 2, S. 375–391.
- [171] AL NIMR, M. A.: Heat transfer mechanisms during short-duration laser heating of thin metal films. Int. J. of Thermophysics 18 (1997) Nr. 5, S. 1257–1268.
- [172] FUCKE, W.; SEYDEL, U.: Improved experimental determination of critical-point data for tungsten. High Temperatures – High Pressures 12 (1980) Nr. 4, S. 419– 432.
- [173] ANISIMOV, S. I.: Vaporization of metal absorbing laser radiation. Sov. Phys. JETP 27 (1968) Nr. 1, S. 182–183.
- [174] KNIGHT, C. J.: Theoretical modeling of rapid surface vaporization with back pressure. AIAA Journal 17 (1979) Nr. 5, S. 519–523.
- [175] SIBOLD, D.; URBASSEK, H. M.: Kinetic study of pulsed desorption flows into vacuum. Physical Review A 43 (1991) Nr. 12, S. 6722–6734.
- [176] PREUSS, S.; DEMCHUK, A.; STUKE, M.: Sub-picosecond UV laser ablation of metals. Appl. Phys. A 61 (1995) Nr. 1, S. 33–37.
- [177] LIU, C. L.; LEBOEUF, J. N.; WOOD, R. F.; GEOBEGAN, D. B.; DONATO, J. M.; CHEN, K. R.; PURETZKY, A. A.: *Computational modeling of physical processes during laser ablation*. Materials Science and Engineering B 47 (1997) Nr. 1, S. 70–77.
- [178] RUF, A.; BERGER, P.; DAUSINGER, F.; HÜGEL, H.: Analytical investigations on geometrical influences on laser drilling. J. Phys. D: Appl. Phys. 34 (2001), S. 2918–2925.

- [179] HORN, R.: Untersuchung und Bewertung verschiedener analytischer und numerischer Modelle hinsichtlich ihrer Eignung zur Beschreibung des Laserbohrens und -abtragens. Universität Stuttgart, Studienarbeit, 2001.
- [180] ASTIN, S.; PILKINGTON, R.; WILLIAMS, S.; SIDHU, J.: New processing regime for machining of organic materials. In: High-Power Laser Ablation. Intl. Soc. for Optical Engineering, 1998, S. 90–96 (Proc. SPIE Bd. 3343).
- [181] WILLIAMS, S. W.; MARSDEN, P. J.; ROBERTS, N. C.; SIDHU, J.; VENABLES, M. A.: Excimer laser beam shaping and material processing using diffractive optics. In: Baker, H. J. (Hrsg.): XI International Symposium on Gas Flow and Chemical Lasers and High Power Laser Conference. Intl. Soc. for Optical Engineering, 1997, S. 431–434 (Proc. SPIE Bd. 3092).
- [182] RUF, A.; BREITLING, D.; BERGER, P.; DAUSINGER, F.; HÜGEL, H.: Modeling and investigation of melt ejection dynamics for laser drilling with short pulses. In: Miyamoto, I.; Kobayashi, K.; Sugioka, K.; Poprawe, R.; Helvajian, H. (Hrsg.): Third International Symposium on Laser Precision Microfabrication LPM 2002 (Osaka). Bellingham: Intl. Soc. for Optical Engineering, 2003, S. 73–78 (Proc. SPIE Bd. 4830).
- [183] VON ALLMEN, M.; BLATTER, A.: Laser-beam interactions with materials, 3. Aufl. Berlin: Springer, 1995.
- [184] RUF, A.: Untersuchungen zum Schmelzfluss beim Laserbohren und -abtragen. IFSW, Universität Stuttgart, Interner Bericht, 2000 (Inst. f. Strahlwerkzeuge IFSW 00-30).
- [185] DAUSINGER, F.; BREITLING, D.; FÖHL, C.; RUF, A.; WEIKERT, M.: BMBF-Verbundprojekt PRIMUS (FKZ 13N7710/6): 2. Zwischenbericht für das Teilvorhaben Grundlegende Untersuchungen zum Bohren und Oberflächenabtragen mit ultrakurzen Laserpulsen. IFSW, Universität Stuttgart, 2002.
- [186] BRAILOVSKY, A. B.; GAPONOV, S. V.; LUCHIN, V. I.: Mechanisms of melt droplets and solid-particle ejection from a target surface by pulsed laser action. Appl. Phys. A 61 (1995) Nr. 1, S. 81–86.
- [187] RUF, A.; BREITLING, D.; BERGER, P.; DAUSINGER, F.; HÜGEL, H.: Hydrodynamical Modeling of Laser Drilling with Short and Ultrashort Pulses. In: Atanasov, P. A.; Serafetinides, A. A.; Kolev, I. N. (Hrsg.): 12th International School on Quantum Electronics: Laser Physics and Applications. Intl. Soc. for Optical Engineering, 2003, S. 367–371 (Proc. SPIE Bd. 5226).
- [188] BELL, A. R.: New equations of state for MEDUSA. Chilton: Rutherford and Appleton Laboratory, 1981 (Report 80-091).
- [189] KOSOLAPOVA, T. Y. (Hrsg.): Handbook of high temperature compounds. New York: Hemisphere, 1990.

- [190] RAIBER, A.: Grundlagen und Prozeßtechnik für das Lasermikrobohren technischer Keramiken. Stuttgart: Teubner, 1995. Universität Stuttgart, Dissertation (Laser in der Materialbearbeitung - Forschungsberichte des IFSW).
- [191] ROSE, J. H.; SMITH, J. R.; GUINEA, F.; FERRANTE, J.: Universal features of the equation of state of metals. Phys. Rev. B 29 (1984) Nr. 6, S. 2963–2969.
- [192] ANDERS, A.: A formulary for plasma physics. Berlin: Akademie Verlag, 1990.
- [193] BERGMANN, L.; SCHAEFER, C.: Lehrbuch der Experimentalphysik, Bd. 4,1 Aufbau der Materie, 2. Aufl. GOBRECHT, H. (Hrsg.). Berlin: de Gruyter, 1981.
- [194] HANLE, W.; FRANCK, E. U.: Querschnitte von Atomen, Ionen und Molekeln. In: Eucken, A.; Hellwege, K. H. (Hrsg.): Zahlenwerte und Funktionen aus Physik, Chemie, Astronomie, Geophysik und Technik. Berlin: Springer, 1950 (Landolt-Börnstein Bd. I-1).
- [195] MIROTZNIK, M. S.; PRATHER, D. W.; MAIT, J. N.; BECK, W. A.; SHOUYU-AN, S.; XIANG, G.: Three-dimensional analysis of subwavelength diffractive optical elements with the finite-difference time-domain method. Applied Optics 39 (2000) Nr. 17, S. 2871–2880.
- [196] PALKAR, S. A.; RYDE, N. P.; SCHURE, M. R.; GUPTA, N.; COLE, J. B.: Finite difference time domain computation of light scattering by multiple colloidal particles. Langmuir 14 (1998) Nr. 13, S. 3484–3492.
- [197] PRATHER, D. W.; SHI, S.: Formulation and application of the finite-difference time-domain method for the analysis of axially symmetric diffractive optical elements. J. Opt. Soc. America A 16 (1999) Nr. 5, S. 1131–1142.
- [198] YANG, P.; LIOU, K. N.; MISHCHENKO, M. I.; GAO, B. C.: Efficient finitedifference time-domain scheme for light scattering by dielectric particles: application to aerosols. Applied Optics **39** (2000) Nr. 21, S. 3727–3737.
- [199] HARMS, P. H.; LEE, J. F.; MITTRA, R.: A study of the nonorthogonal FDTD method versus the conventional FDTD technique for computing resonant frequencies of cylindrical cavities. IEEE Transactions on Microwave Theory and Techniques 40 (1992) Nr. 4, S. 741–746.
- [200] BERENGER, J.-P.: Three-dimensional perfectly matched layer for the absorption of electromagnetic waves. J. Comp. Physics 127 (1996), S. 363.
- [201] HE, J. Q.; LIU, Q. H.: A nonuniform cylindrical FDTD algorithm with improved PML and quasi-PML absorbing boundary conditions. IEEE Transactions on Geoscience and Remote Sensing 37 (1999) Nr. 2, S. 1066–1072.
- [202] TEIXEIRA, F. L.; CHEW, W. C.: Finite-difference computation of transient electromagnetic waves for cylindrical geometries in complex media. IEEE Transactions on Geoscience and Remote Sensing 38 (2000) Nr. 4, S. 1530–1543.

- [203] JOSEPH, R. M.; HAGNESS, S. C.; TAFLOVE, A.: Direct time integration of Maxwell's equations in linear dispersive media with absorption for scattering and propagation of femtosecond electromagnetic pulses. Optics Letters 16 (1991) Nr. 18, S. 1412–1414.
- [204] JUDKINS, J. B.; ZIOLKOWSKI, R. W.: Finite-difference time-domain modeling of nonperfectly conducting metallic thin-film gratings. J. Opt. Soc. America A 12 (1995) Nr. 9, S. 1974–1983.

# Danksagung

Die vorliegende Arbeit ist das Ergebnis meiner Tätigkeit als wissenschaftlicher Mitarbeiter am Institut für Strahlwerkzeuge (IFSW) der Universität Stuttgart. Ohne die Unterstützung von einer Vielzahl von Kollegen und Freunden wäre sie nicht in dieser Form möglich gewesen, so dass ich diesen meinen besonderen Dank aussprechen möchte.

Ich danke meinem Doktorvater, Herrn Prof. Dr. rer. nat. Friedrich Dausinger, für die Anregung und Betreuung dieser Arbeit sowie die hilfreichen fachlichen Diskussionen. Ganz besonders wichtig war für mich jedoch die offene und freundliche Art seiner Unterstützung, die mir viel kreativen Freiraum zur Verwirklichung meiner Ideen ließ.

Herrn Prof. Dr.-Ing. Hans Hasse danke ich für die Übernahme des Mitberichts, sein Interesse an meiner Arbeit und die wohlwollende und freundliche Art der Betreuung.

Bei Herrn Prof. Dr.-Ing. Helmut Hügel möchte ich mich für die herzliche Aufnahme an seinem Institut bedanken. Während meiner Zeit dort habe ich durch seine Förderung und sein Vertrauen stets eine angenehme und fruchtbare Arbeitsatmosphäre vorgefunden.

Herrn Peter Berger möchte ich meinen Dank dafür aussprechen, dass er mir stets für fachliche Diskussionen zur Verfügung stand und mir durch sein Wissen und kritische Fragen viele Inspirationen für meine Arbeit gegeben hat.

Allen ehemaligen Kollegen am IFSW danke ich für die konstruktive Zusammenarbeit und vor allem für die angenehme Arbeitsatmosphäre. Besonderen Dank möchte ich in diesem Zusammenhang meinen langjährigen Zimmergenossen Thomas Fuhrich, Christian Föhl und Detlef Breitling aussprechen. Letzterem danke ich auch für die gründliche Durchsicht meines Manuskriptes.

Wesentliche Voraussetzung für meine erfolgreiche Arbeit war die langjährige Unterstützung meiner Freunde, denen ich daher zu großem Dank verpflichtet bin. Vor allem meinen Eltern, Gerda und Hermann Ruf, möchte ich aber auf diesem Weg für ihre liebevolle und geduldige Unterstützung danken und ihnen diese Arbeit widmen.

Ulm, im Februar 2004

Andreas Ruf

# Laser in der Materialbearbeitung

# Forschungsberichte des IFSW (Institut für Strahlwerkzeuge)

Herausgegeben von Prof. Dr.-Ing. habil. Helmut Hügel, Universität Stuttgart Forschungsberichte des IFSW von 1992 bis 1999 erschienen im Teubner Verlag, Stuttgart

## Zoske, Uwe

Modell zur rechnerischen Simulation von Laserresonatoren und Strahlführungssystemen 1992, 186 Seiten, ISBN 3-519-06205-4

## Gorriz, Michael

Adaptive Optik und Sensorik im Strahlführungssystem von Laserbearbeitungsanlagen 1992, vergriffen, ISBN 3-519-06206-2

## Mohr, Ursula

Geschwindigkeitsbestimmende Strahleigenschaften und Einkoppelmechanismen beim CO<sub>2</sub>-Laserschneiden von Metallen 1993, 130 Seiten, ISBN 3-519-06207-0

## Rudlaff, Thomas

Arbeiten zur Optimierung des Umwandlungshärtens mit Laserstrahlen 1993, 152 Seiten, ISBN 3-519-06208-9

## Borik, Stefan

Einfluß optischer Komponenten auf die Strahlqualität von Hochleistungslasern 1993, 200 Seiten, ISBN 3-519-06209-7

## Paul, Rüdiger

Optimierung von HF-Gasentladungen für schnell längsgeströmte CO<sub>2</sub>-Laser 1994, 149 Seiten, ISBN 3-519-06210-0

## Wahl, Roland

Robotergeführtes Laserstrahlschweißen mit Steuerung der Polarisationsrichtung 1994, 150 Seiten, ISBN 3-519-06211-9

## Frederking, Klaus-Dieter

Laserlöten kleiner Kupferbauteile mit geregelter Lotdrahtzufuhr 1994, 139 Seiten, ISBN 3-519-06212-7

## Grünewald, Karin M.

Modellierung der Energietransferprozesse in längsgeströmten CO<sub>2</sub>-Lasern 1994, 158 Seiten, ISBN 3-519-06213-5

## Shen, Jialin

Optimierung von Verfahren der Laseroberflächenbehandlung mit gleichzeitiger Pulverzufuhr 1994, 160 Seiten, ISBN 3-519-06214-3

## Arnold, Johannes M.

Abtragen metallischer und keramischer Werkstoffe mit Excimerlasern 1994, 192 Seiten, ISBN 3-519-06215-1

## Holzwarth, Achim

Ausbreitung und Dämpfung von Stoßwellen in Excimerlasern 1994, 153 Seiten, ISBN 3-519-06216-X

## Dausinger, Friedrich

Strahlwerkzeug Laser: Energieeinkopplung und Prozeßeffektivität 1995, 143 Seiten, ISBN 3-519-06217-8

## Meiners, Eckhard

Abtragende Bearbeitung von Keramiken und Metallen mit gepulstern Nd:YAG-Laser als zweistufiger Prozeß 1995, 120 Seiten, ISBN 3-519-06222-4

## Beck, Markus

Modellierung des Lasertiefschweißens 1996, 160 Seiten, ISBN 3-519-06218-6

## Breining, Klaus

Auslegung und Vermessung von Gasentladungsstrecken für CO<sub>2</sub>-Hochleistungslaser 1996, 131 Seiten, ISBN 3-519-06219-4

## Griebsch, Jürgen

Grundlagenuntersuchungen zur Qualitätssicherung beim gepulsten Lasertiefschweißen 1996, 133 Seiten, ISBN 3-519-06220-8

## Krepulat, Walter

Aerodynamische Fenster für industrielle Hochleistungslaser 1996, 144 Seiten, ISBN 3-519-06221-6

## Xiao, Min

Vergleichende Untersuchungen zum Schneiden dünner Bleche mit CO<sub>2</sub>- und Nd:YAG-Lasern 1996, 118 Seiten, ISBN 3-519-06223-2

## Glumann, Christiane

Verbesserte Prozeßsicherheit und Qualität durch Strahlkombination beim Laserschweißen 1996, 143 Seiten, ISBN 3-519-06224-0

## Gross, Herbert

Propagation höhermodiger Laserstrahlung und deren Wechselwirkung mit optischen Systemen 1996, 191 Seiten, ISBN 3-519-06225-9

## Rapp, Jürgen

Laserschweißeignung von Aluminiumwerkstoffen für Anwendungen im Leichtbau 1996, 202 Seiten, ISBN 3-519-06226-7

#### Wittig, Klaus

Theoretische Methoden und experimentelle Verfahren zur Charakterisierung von Hochleistungslaserstrahlung 1996, 198 Seiten, ISBN 3-519-06227-5

## Grünenwald, Bernd

Verfahrensoptimierung und Schichtcharakterisierung beim einstufigen Cermet-Beschichten mittels CO<sub>2</sub>-Hochleistungslaser 1996, 160 Seiten, ISBN 3-519-06229-1

#### Lee, Jae-Hoon

Laserverfahren zur strukturierten Metallisierung 1996, 154 Seiten, ISBN 3-519-06232-1

#### Albinus, Uwe N. W.

Metallisches Beschichten mittels PLD-Verfahren 1996, 144 Seiten, ISBN 3-519-06233-X

#### Wiedmaier, Matthias

Konstruktive und verfahrenstechnische Entwicklungen zur Komplettbearbeitung in Drehzentren mit integrierten Laserverfahren 1997, 129 Seiten, ISBN 3-519-06228-3

#### Bloehs, Wolfgang

Laserstrahlhärten mit angepaßten Strahlformungssystemen 1997, 143 Seiten, ISBN 3-519-06230-5

#### Bea, Martin

Adaptive Optik für die Materialbearbeitung mit CO<sub>2</sub>-Laserstrahlung 1997, 143 Seiten, ISBN 3-519-06231-3

#### Stöhr, Michael

Beeinflussung der Lichtemission bei mikrokanalgekühlten Laserdioden 1997, 147 Seiten, ISBN 3-519-06234-8

#### Plaß, Wilfried

Zerstörschwellen und Degradation von CO<sub>2</sub>-Laseroptiken 1998, 158 Seiten, ISBN 3-519-06235-6

#### Schaller, Markus K. R.

Lasergestützte Abscheidung dünner Edelmetallschichten zum Heißgaskorrosionsschutz für Molybdän 1998, 163 Seiten, ISBN 3-519-06236-4

#### Hack, Rüdiger

System- und verfahrentechnischer Vergleich von Nd:YAG- und CO<sub>2</sub>-Lasern im Leistungsbereich bis 5 kW 1998, 165 Seiten, ISBN 3-519-06237-2

#### Krupka, René

Photothermische Charakterisierung optischer Komponenten für Hochleistungslaser 1998, 139 Seiten, ISBN 3-519-06238-0

#### Pfeiffer, Wolfgang

Fluiddynamische und elektrophysikalisch optimierte Entladungsstrecken für CO<sub>2</sub>-Hochleistungslaser 1998, 152 Seiten, ISBN 3-519-06239-9

#### Volz, Robert

Optimiertes Beschichten von Gußeisen-, Aluminium- und Kupfergrundwerkstoffen mit Lasern 1998, 133 Seiten, ISBN 3-519-06240-2

#### Bartelt-Berger, Lars

Lasersystem aus kohärent gekoppelten Grundmode-Diodenlasern 1999, 135 Seiten, ISBN 3-519-06241-0

# Müller-Hummel, Peter

Entwicklung einer Inprozeßtemperaturmeßvorrichtung zur Optimierung der laserunterstützten Zerspanung 1999, 139 Seiten, ISBN 3-519-06242-9

#### Rohde, Hansjörg

Qualitätsbestimmende Prozeßparameter beim Einzelpulsbohren mit einem Nd:YAG-Slablaser 1999, 171 Seiten, ISBN 3-519-06243-7

#### Huonker, Martin

Strahlführung in CO<sub>2</sub>-Hochleistungslasersystemen zur Materialbearbeitung 1999, 121 Seiten, ISBN 3-519-06244-5

#### Callies, Gert

Modellierung von qualitäts- und effektivitätsbestimmenden Mechanismen beim Laserabtragen 1999, 119 Seiten, ISBN 3-519-06245-3

#### Schubert, Michael E.

Leistungsskalierbares Lasersystem aus fasergekoppelten Singlemode-Diodenlasern 1999, 105 Seiten, ISBN 3-519-06246-1

#### Kern, Markus

Gas- und magnetofluiddynamische Maßnahmen zur Beeinflussung der Nahtqualität beim Laserstrahlschweißen 1999, 132 Seiten, ISBN 3-519-06247-X

#### Raiber, Armin

Grundlagen und Prozeßtechnik für das Lasermikrobohren technischer Keramiken 1999, 135 Seiten, ISBN 3-519-06248-8
# Laser in der Materialbearbeitung

## Forschungsberichte des IFSW (Institut für Strahlwerkzeuge)

Herausgegeben von Prof. Dr.-Ing. habil. Helmut Hügel, Universität Stuttgart Forschungsberichte des IFSW ab 2000 erschienen im Herbert Utz Verlag, München

## Schittenhelm, Henrik

Diagnostik des laserinduzierten Plasmas beim Abtragen und Schweißen 2000, 141 Seiten, ISBN 3-89675-712-1

## Stewen, Christian

Scheibenlaser mit Kilowatt-Dauerstrichleistung 2000, 145 Seiten, ISBN 3-89675-763-6

## Schmitz, Christian

Gaselektronische Analysemethoden zur Optimierung von Lasergasentladungen 2000, 107 Seiten, ISBN 3-89675-773-3

## Karszewski, Martin

Scheibenlaser höchster Strahlqualität 2000, 132 Seiten, ISBN 3-89675-785-7

## Chang, Chin-Lung

Berechnung der Schmelzbadgeometrie beim Laserstrahlschweißen mit Mehrfokustechnik 2000, 141 Seiten, ISBN 3-89675-825-X

## Haag, Matthias

Systemtechnische Optimierungen der Strahlqualität von Hochleistungsdiodenlasern 2000, 166 Seiten, ISBN 3-89675-840-3

#### Bahnmüller, Jochen

Charakterisierung gepulster Laserstrahlung zur Qualitätssteigerung beim Laserbohren 2000, 138 Seiten, ISBN 3-89675-851-9

## Schellhorn, Martin Carl Johannes

CO-Hochleistungslaser: Charakteristika und Einsatzmöglichkeiten beim Schweißen 2000, 142 Seiten, ISBN 3-89675-849-7

#### Angstenberger, Birgit

Fliehkraftunterstütztes Laserbeschichten 2000, 153 Seiten, ISBN 3-89675-861-6

## **Bachhofer**, Andreas

Schneiden und Schweißen von Aluminiumwerkstoffen mit Festkörperlasern für den Karosseriebau 2001, 194 Seiten, ISBN 3-89675-881-0

## Breitschwerdt, Sven

Qualitätssicherung beim Laserstrahlschweißen 2001, 150 Seiten, ISBN 3-8316-0032-5

#### Mochmann, Gunter

Laserkristallisation von Siliziumschichten auf Glas- und Kunststoffsubstraten für die Herstellung verbesserter Dünnschichttransistoren 2001, 170 Seiten, ISBN 3-89675-811-X

#### Herrmann, Andreas

Fertigungsorientierte Verfahrensentwicklung des Weichlötens mit Diodenlasern 2002, 133 Seiten, ISBN 3-8316-0086-4

## Mästle, Rüdiger

Bestimmung der Propagationseigenschaften von Laserstrahlung 2002, 147 Seiten, ISBN 3-8316-0113-5

## Voß, Andreas

Der Scheibenlaser: Theoretische Grundlagen des Dauerstrichbetriebs und erste experimentelle Ergebnisse anhand von Yb:YAG 2002, 195 Seiten, ISBN 3-8316-0121-6

## Müller, Matthias G.

Prozessüberwachung beim Laserstrahlschweißen durch Auswertung der reflektierten Leistung 2002, 122 Seiten, ISBN 3-8316-0144-5

## Abeln, Tobias

Grundlagen und Verfahrenstechnik des reaktiven Laserpräzisionsabtragens von Stahl 2002, 138 Seiten, ISBN 3-8316-0137-2

## Erhard, Steffen

Pumpoptiken und Resonatoren für den Scheibenlaser 2002, 184 Seiten, ISBN 3-8316-0173-9

#### Contag, Karsten

Modellierung und numerische Auslegung des Yb:YAG-Scheibenlasers 2002, 155 Seiten, ISBN 3-8316-0172-0

#### Krastel, Klaus

Konzepte und Konstruktionen zur laserintegrierten Komplettbearbeitung in Werkzeugmaschinen 2002, 140 Seiten, ISBN 3-8316-0176-3

#### Staud, Jürgen

Sensitive Werkzeuge für ein neues Montagekonzept in der Mikrosystemtechnik 2002, 122 Seiten, ISBN 3-8316-0175-5

#### Schinzel, Cornelius M.

Nd:YAG-Laserstrahlschweißen von Aluminiumwerkstoffen für Anwendungen im Automobilbau 2002, 177 Seiten, ISBN 3-8316-0201-8

#### Sebastian, Michael

Grundlagenuntersuchungen zur Laser-Plasma-CVD Synthese von Diamant und amorphen Kohlenstoffen 2002, 153 Seiten, ISBN 3-8316-0200-X

## Lücke, Bernd

Kohärente Kopplung von Vertikalemitter-Arrays 2003, 120 Seiten, ISBN 3-8316-0224-7

#### Hohenberger, Bernd

Laserstrahlschweißen mit Nd:YAG-Doppelfokustechnik – Steigerung von Prozeßsicherheit, Flexibilität und verfügbarer Strahlleistung 2003, 128 Seiten, ISBN 3-8316-0223-9

#### Jasper, Knut

Neue Konzepte der Laserstrahlformung und -führung für die Mikrotechnik 2003, 152 Seiten, ISBN 3-8316-0205

#### Heimerdinger, Christoph

Laserstrahlschweißen von Aluminiumlegierungen für die Luftfahrt 2003, 112 Seiten, ISBN 3-8316-0256-5

#### Christoph Fleig

Evaluierung eines Messverfahrens zur genauen Bestimmung des Reflexionsgrades optischer Komponenten 2003, 150 Seiten, ISBN 3-8316-0274-3

#### Joachim Radtke

Herstellung von Präzisionsdurchbrüchen in keramischen Werkstoffen mittels repetierender Laserbearbeitung 2003, 150 Seiten, ISBN 3-8316-0285-9

#### Michael Brandner

Steigerung der Prozesseffizienz beim Löten und Kleben mit Hochleistungsdiodenlasern 2003, 195 Seiten, ISBN 3-8316-0288-3

## **Reinhard Winkler**

Porenbildung beim Laserstrahlschweissen von Aluminium-Druckguss 2004, 153 Seiten, ISBN 3-8316-0313-8

#### Helmut Kindler

Optische und gerätetechnische Entwicklungen zum Laserstrahlspritzen 2004, 117 Seiten, ISBN 3-8316-0315-4