Um das Werkzeug Laser universell einsetzen zu können, sind applikationsangepasste Strahlformungs- und -führungsoptiken erforderlich. Diese absorbieren einen geringen Teil der Laserstrahlung, was eine inhomogene Erwärmung der optischen Komponenten zur Folge hat. Deren optische Eigenschaften ändern sich, da der Brechungsindex von der Temperatur abhängt und thermische Deformation auftritt. Für die Auslegung thermisch stabiler optischer Systeme bedarf es multiphysikalischer Simulationen. In dieser Arbeit werden thermooptische Effekte in drei Anwendungsbereichen untersucht, nämlich Selective Laser Melting (SLM), Einsatz von Kunststoffoptiken sowie Optiken für die Erzeugung hoher Harmonischer.

Bei der additiven Fertigung mittels SLM, auch bekannt als Laser Powder Bed Fusion (LPBF), treten verbreitet thermooptische Effekte auf, insbesondere wenn das Schutzglas während des Prozesses durch entstehenden Rauch oder Spritzer verschmutzt. Außerdem sind keine kommerziellen Messmittel verfügbar, um die transiente winkelabhängige Fokusverschiebung von SLM-Anlagen zu messen. Um diese Lücke zu schließen, wird die Fokusverschiebung für unterschiedliche Belichtungs- und Scanstrategien simuliert und verglichen. Die laterale Fokusverschiebung kann einen Schrumpf sowie eine Verschiebung der aufgebauten Strukturen verursachen.

Kunststoffoptiken werden aufgrund signifikanter thermooptischer Effekte bisher nicht zur Fokussierung von Laserstrahlung eingesetzt. In dieser Arbeit wird der Ansatz verfolgt, die thermooptischen Effekte durch eine an den Betriebspunkt, d. h. Laserleistung, Strahldurchmesser und Strahlprofil, angepasste Linsenform zu kompensieren. Simulationen zeigen, dass auf diese Weise für 10 W Laserleistung die thermisch induzierte Fokusverschiebung einer PMMA-Linse vollständig kompensiert werden kann.

Die mittleren Ausgangsleistungen von Ultrakurzpuls-Strahlquellen überschreiten mittlerweile 100 W. Aufgrund der großen Bandbreite können keine reinen Quarzglasoptiken eingesetzt werden. Um die Optiken gleichzeitig achromatisieren und athermalisieren zu können, wird ein neuartiger Simulationsansatz entwickelt. Hierzu werden eine thermomechanische Finite-Elemente-Analyse und eine optische Analyse auf der Basis von strahlen- und wellenoptischen Methoden gekoppelt. Unter Anwendung dieses Simulationsansatzes wird ein achromatisches Doublet aus Calciumfluorid und Quarzglas ausgelegt und analysiert. Potentielles Einsatzgebiet dieses Doublets ist die Erzeugung hoher Harmonischer.

ISBN 978-3-86359-726-9

LASERTECHNIK

Multiphysikalische Simulation und Kompensation thermooptischer Effekte in Optiken für Laseranwendungen

Tobias Bonhoff

Tobias Bonhoff

Multiphysikalische Simulation und Kompensation thermooptischer Effekte in Optiken für Laseranwendungen

Edition Wissenschaft Apprimus

TOS Lehrstuhl für Technologie Optischer Systeme | RWTH AACHEN UNIVERSITY | Fraunhofer ILT

Multiphysikalische Simulation und Kompensation thermooptischer Effekte in Optiken für Laseranwendungen

Multi-Physical Simulation and Compensation of Thermo-Optical Effects in Optics for Laser Applications

Von der Fakultät für Maschinenwesen
der Rheinisch-Westfälischen Technischen Hochschule Aachen
zur Erlangung des akademischen Grades eines
D o k t o r s d e r N a t u r w i s s e n s c h a f t e n
genehmigte Dissertation

vorgelegt von

Tobias Bonhoff

Berichter:

Univ.-Prof. Dr. rer. nat. Peter Loosen
Univ.-Prof. Dr. rer. nat. Gerd Marowsky

Tag der mündlichen Prüfung: 15. Februar 2019

Diese Dissertation ist auf den Internetseiten der Universitätsbibliothek online verfügbar.

ERGEBNISSE AUS DER LASERTECHNIK

Tobias Bonhoff

Multiphysikalische Simulation und Kompensation thermooptischer Effekte in Optiken für Laseranwendungen

Bibliografische Information der Deutschen Nationalbibliothek
Die Deutsche Nationalbibliothek verzeichnet diese Publikation in der Deutschen Nationalbibliografie; detaillierte bibliografische Daten sind im Internet über https://portal.dnb.de abrufbar.

Tobias Bonhoff:

Multiphysikalische Simulation und Kompensation thermooptischer Effekte in Optiken für Laseranwendungen

1. Auflage, 2019

Gedruckt auf holz- und säurefreiem Papier, 100% chlorfrei gebleicht.

Apprimus Verlag, Aachen, 2019
Wissenschaftsverlag des Instituts für Industriekommunikation und Fachmedien an der RWTH Aachen
Steinbachstr. 25, 52074 Aachen
Internet: www.apprimus-verlag.de, E-Mail: info@apprimus-verlag.de

Printed in Germany

ISBN 978-3-86359-726-9

D 82 (Diss. RWTH Aachen University, 2019)

Zusammenfassung

Um das Werkzeug Laser universell einsetzen zu können, sind applikationsangepasste Strahlformungs- und -führungsoptiken erforderlich. Diese absorbieren einen geringen Teil (typischerweise < 0,1 %) der Laserstrahlung, was eine inhomogene Erwärmung der optischen Komponenten zur Folge hat. Deren optische Eigenschaften ändern sich, da der Brechungsindex von der Temperatur abhängt und thermische Deformation auftritt. In erster Linie verschiebt sich die Fokuslage. Für die Auslegung thermisch stabiler optischer Systeme bedarf es multiphysikalischer Simulationen. In der vorliegenden Arbeit werden thermooptische Effekte in drei Anwendungsbereichen untersucht, nämlich Selective Laser Melting (SLM), Einsatz von Kunststoffoptiken sowie Optiken für die Erzeugung hoher Harmonischer. Hierzu werden Simulationen und Experimente durchgeführt und jeweils Ansätze für Kompensationsstrategien diskutiert.

Bei der additiven Fertigung mittels SLM, auch bekannt als Laser Powder Bed Fusion (LPBF), treten verbreitet thermooptische Effekte auf, insbesondere wenn das Schutzglas, das die Optikeinheit von der Baukammer trennt, während des Prozesses durch entstehenden Rauch oder Spritzer verschmutzt. Außerdem sind keine kommerziellen Messmittel verfügbar, um die transiente winkelabhängige Fokusverschiebung von SLM-Anlagen zu messen. Um diese Lücke zu schließen, werden transiente Simulationen durchgeführt und die thermooptischen Effekte systematisch analysiert. Die Fokusverschiebung wird für unterschiedliche Belichtungs- und Scanstrategien simuliert und verglichen. Die laterale Fokusverschiebung variiert i. d. R. über den Bauraum und kann einen Schrumpf sowie eine Verschiebung der aufgebauten Strukturen verursachen.

Kunststoffoptiken werden aufgrund signifikanter thermooptischer Effekte bisher nicht zur Fokussierung von Laserstrahlung eingesetzt. Da thermoplastische Kunststoffe vergleichbare optische und mechanische Eigenschaften aufweisen, ist eine Kompensation thermisch induzierter Effekte durch die Kombination unterschiedlicher Kunststoffe nicht möglich. In dieser Arbeit wird der Ansatz verfolgt, die thermooptischen Effekte durch eine an den Betriebspunkt, d. h. Laserleistung, Strahldurchmesser und Strahlprofil, angepasste Linsenform zu kompensieren. Simulationen zeigen, dass auf diese Weise für 10 W Laserleistung die thermisch induzierte Fokusverschiebung einer PMMA-Linse vollständig kompensiert und eine beugungsbegrenzte Fokussierung erzielt werden kann.

Die mittleren Ausgangsleistungen von Ultrakurzpuls-Strahlquellen überschreiten mittlerweile 100 W. Aufgrund der großen Bandbreite können keine reinen Quarzglasoptiken eingesetzt werden, da Dispersion zu einer Pulsdauerverlängerung führen würde. Um die Optiken gleichzeitig achromatisieren und athermalisieren zu können, wird ein neuartiger Simulationsansatz entwickelt. Hierzu werden eine thermomechanische Finite-Elemente-Analyse und eine optische Analyse auf der Basis von strahlen- und wellenoptischen Methoden gekoppelt. So kann der räumliche und zeitliche Verlauf der Laserpulse in der Fokusregion berechnet werden. Unter Anwendung dieses Simulationsansatzes wird ein achromatisches Doublet aus Calciumfluorid und Quarzglas ausgelegt und analysiert. Potentielles Einsatzgebiet dieses Doublets ist die Erzeugung hoher Harmonischer.

Abstract

The universal use of the tool laser requires application-specific optical systems for beam guiding and shaping. These optics absorb a small proportion (typically < 0.1 %) of laser radiation causing an inhomogeneous heating of the optical components. Their optical properties change since the refractive index depends on the local temperature and thermal deformation occurs. The primary effect is a focus shift. For designing thermally stable optical systems, a multi-physical simulation is needed. In this thesis, thermo-optical effects are analyzed in three areas of application, namely Selective Laser Melting (SLM), the usage of plastic optics, and optics for High Harmonic Generation (HHG). For this purpose, simulations and experiments are performed, and approaches for compensation strategies are discussed.

When performing additive manufacturing by SLM, also known as Laser Powder Bed Fusion (LPBF), thermo-optical effects occur quite frequently. This is particularly true if the protective window, which separates the optical unit and the processing chamber, gets contaminated by smoke and splashes emerging during the process. Furthermore, there are no commercial devices available for measuring the transient, angle-dependent focus shift of a SLM unit. To close this gap, transient simulations are performed, and thermo-optical effects are analyzed systematically. The focus shift is simulated for different exposure and scanning strategies, and the results are compared. The lateral focus shift usually varies across the working plane and can induce a shrinkage as well as a displacement of the manufactured structures.

Up to now, plastic optics have not been utilized for focusing laser radiation because of significant thermo-optical effects. Since thermoplastics feature similar optical and mechanical properties, a compensation of thermally-induced effects cannot be obtained by combining different plastics. In this thesis, the following approach is taken: The thermo-optical effects are compensated for by designing a lens shape that is adapted to the operating point, i. e. laser power, beam diameter, and beam profile. Simulations predict that the thermally-induced focus shift of a PMMA-lens at 10 W laser power can be fully offset by applying this approach, and that a diffraction-limited focusing can be achieved.

Today, the time-averaged output power of ultrashort pulse laser sources exceeds 100 W. Due to the large bandwidth, optics exclusively made of fused silica cannot be utilized, because dispersion would lead to an increased pulse duration. In order to make the optics both achromatic and athermal, a novel simulation approach is developed. For this purpose, a thermomechanical finite element analysis and an optical analysis, which is based on ray-optical and wave-optical methods, are coupled. Hence, the pulse shape in the focal region can be computed both in the spatial domain and in the time domain. By applying this novel simulation approach, an achromatic doublet made of calcium fluoride and fused silica is designed and analyzed. This doublet is intended to be used in the field of High Harmonic Generation.

Danksagung

Die vorliegende Dissertation entstand im Rahmen meiner Tätigkeit als wissenschaftlicher Mitarbeiter am Lehrstuhl für Technologie Optischer Systeme (TOS) der RWTH Aachen University. Ich möchte mich herzlich bei allen Personen bedanken, die mich während dieser Zeit unterstützt und zum erfolgreichen Abschluss meiner Promotion beigetragen haben.

Mein besonderer Dank gilt Herrn Prof. Dr. rer. nat. Peter Loosen, der mir die Promotion ermöglicht und die Entstehung der Arbeit durch fachliche Gespräche ausgezeichnet betreut hat. Zudem danke ich Herrn Prof. Dr. rer. nat. Gerd Marowsky für das Koreferat sowie Herrn Prof. Dr.-Ing. Christian Hopmann für die Übernahme des Prüfungsvorsitzes.

Herrn Dr.-Ing. Jochen Stollenwerk danke ich für zahlreiche inspirierende Diskussionen sowie das Korrekturlesen meiner Arbeit.

Darüber hinaus danke ich den derzeitigen und ehemaligen Kollegen am Lehrstuhl TOS, insbesondere Michael Berens, Dr.-Ing. Lasse Büsing, Dr.-Ing. Alexander Gatej, Oskar Hofmann, Martin Holters, Georg König, Marcel Prochnau, Dr.-Ing. Oliver Pütsch und Annika Völl, für das ausgesprochen gute Arbeitsklima sowie den kontinuierlichen fachlichen Austausch.

Außerdem haben Marcus Poppe, Lukas Harter und Benny Ku mit ihrem Engagement im Rahmen ihrer Bachelorarbeit und/oder studentischen Hilfskrafttätigkeit zum Gelingen meiner Arbeit beigetragen.

Weiterhin danke ich Herrn Dr. rer. nat. Johannes Weitenberg für erkenntnisreiche Diskussionen zum Einfluss dispersiver und thermooptischer Effekte auf ultrakurze Laserpulse sowie zur Charakterisierung der Strahlkaustik. Mein Dank gilt zudem Herrn Maximilian Schniedenharn für den kontinuierlichen fachlichen Austausch zu thermooptischen Effekten beim SLM sowie die Bereitstellung von experimentellen Messdaten. Für die produktive Zusammenarbeit bei der experimentellen Charakterisierung thermooptischer Effekte sei Sebastian Nippgen, Ulrich Thombansen und Wolfgang Fiedler gedankt. Herrn Sebastian Gronloh vom Fraunhofer ILT danke ich für die Unterstützung bei der Nutzung des photothermalen Common-Path-Interferometers sowie der Auswertung der Messdaten.

Meiner Familie danke ich dafür, dass sie mich während meiner gesamten Studien- und Promotionszeit in jeder Hinsicht unterstützt und die Entstehung dieser Arbeit mit Freude verfolgt hat.

Koblenz im April 2019 Tobias Bonhoff

Inhalt

1	**Motivation, Zielsetzung und Vorgehensweise**	**1**
2	**Stand von Wissenschaft und Technik**	**5**
2.1	Thermooptische Effekte	5
2.1.1	Temperatur- und wellenlängenabhängiger Brechungsindex	7
2.1.2	Lorentz-Lorenz-Gleichung	8
2.2	Kompensationsmethoden und Materialparameter	10
2.3	Simulation thermooptischer Effekte	13
2.3.1	Simulation basierend auf der Kopplung von FEA und Strahlenoptik	14
2.3.2	Simulation basierend auf wellenoptischen Methoden	18
2.4	Messmittel zur Bestimmung der Fokusverschiebung	19
2.4.1	Messmittel nach ISO-Norm 11146	19
2.4.2	Weitere Messmittel	20
2.5	Bestimmung des Absorptionsgrads	21
2.5.1	Spektrale Photometrie	22
2.5.2	Photothermale Messverfahren	23
2.5.3	Kalorimetrie	25
2.6	Ultrakurze Laserpulse	26
2.6.1	Yb:YAG-basierte Lasersysteme	26
2.6.2	Dispersive Effekte	27
2.6.3	Erzeugung hoher Harmonischer	29
2.7	Defizite im Stand von Wissenschaft und Technik	31
3	**Methoden zur thermooptischen Simulation**	**33**
3.1	Definition thermischer Lasten und Randbedingungen	34
3.1.1	Thermische Lasten durch Absorption von Laserstrahlung	34
3.1.2	Thermische und mechanische Randbedingungen	36
3.2	Thermische Oberflächendeformation	36
3.2.1	Aufbereitung der Finite-Elemente-Daten	37
3.2.2	Approximation der Deformationsdaten	38
3.3	Analytisches Modell	39
3.3.1	Temperaturprofil	39
3.3.2	Oberflächendeformation	41
3.4	Verifikation der Algorithmen	42

3.4.1	RMS-Fehler der Approximation	43
3.4.2	Abweichung der Fokuslage	44
3.4.3	Wellenfrontabweichung	45
3.5	Einfluss der FE-Netzstruktur	48
3.5.1	Klassifikation der Netzstrukturen	49
3.5.2	Qualitätskriterien zur Beurteilung der Vernetzung	50
3.5.3	Einfluss auf die optischen Größen	51
3.6	Gleichzeitige Berücksichtigung thermischer und dispersiver Effekte	54
3.6.1	Multiphysikalischer Simulationsansatz	54
3.6.2	Auswertung der Strahlkaustik	58
3.7	Transiente Analyse und thermische Lastfälle	60
4	**Experimentelle Methoden**	**61**
4.1	Photothermale Common-Path-Interferometrie	61
4.2	Thermografie	62
4.3	Bestimmung von Fokuslage und -verschiebung	63
4.4	Versuchsaufbau und -durchführung	65
4.4.1	Charakterisierung der variablen Fokussieroptik	65
4.4.2	Charakterisierung der Kunststofflinse	66
5	**Analyse und Auslegung von thermisch belasteten Optiken**	**69**
5.1	Optiken für das Selective Laser Melting (SLM)	69
5.1.1	Variable Fokussieroptik	69
5.1.2	Transiente Fokusverschiebung beim SLM	76
5.2	Kunststoffoptiken für Laseranwendungen	87
5.2.1	Experimentelle und simulative Charakterisierung einer Asphäre aus PMMA	87
5.2.2	Iterative Optimierung der Form der Asphäre	94
5.3	Optiken zur Erzeugung hoher Harmonischer mittels ultrakurzen Laserpulsen	98
5.3.1	Auslegung der Fokussieroptiken	99
5.3.2	Thermomechanische Analyse	102
5.3.3	Einfluss thermooptischer und dispersiver Effekte auf die Fokussierung ultrakurzer Laserpulse	103
6	**Zusammenfassung und Ausblick**	**107**
7	**Literaturverzeichnis**	**111**
8	**Anhang**	**119**
8.1	Thermooptischer Koeffizient	119
8.2	Lorentz-Lorenz-Gleichung	119
8.3	Vermessung eines astigmatischen Gaußstrahls über Detektion der Rayleigh-Streuung	121

8.4	Spektrale Verbreiterung durch Selbstphasenmodulation	122
8.5	APDL-Code zur Definition thermischer Lasten	123
8.6	Radiale Wärmeleitungsgleichung mit gaußförmiger Last	124
8.7	Parameter für den WLS-Algorithmus	126
8.8	Multiphysikalischer Simulationsansatz	127
8.9	Berechnung des Strahlradius	128
8.10	Strahlkaustiken PMMA-Asphäre	129

Abkürzungen und Formelzeichen

Abkürzung	**Bedeutung**
APDL	ANSYS Parametric Design Language
AR	Antireflex
BFL	Rückseitige Brennweite (engl. *back focal length*)
CaF_2	Calciumfluorid
DLL	Dynamische Programmbibliothek (engl. *dynamic-link library*)
EUV	Extrem ultraviolett(e Strahlung)
FE	Finite Elemente
FEA	Finite-Elemente-Analyse
GD	Gruppenlaufzeit (engl. *group delay*)
GDD	Gruppenlaufzeit-Dispersion (engl. *group delay dispersion*)
GVD	Gruppengeschwindigkeitsdispersion (engl. *group velocity dispersion*)
HFS	Set harmonischer Felder (engl. *Harmonic Field Set*)
HHG	Erzeugung hoher Harmonischer (engl. *high harmonic generation*)
IBS	Ionenstrahlsputtern (engl. *ion beam sputtering*)
ISO	International Organization for Standardization
LPBF	Laser Powder Bed Fusion
LSR	Liquid Silicone Rubber
MBA	Multilevel-B-Spline-Approximation
OH	Hydroxid
OPD	Optische Weglängendifferenz (engl. *optical path difference*)
PC	Polycarbonat
PCI	Photothermale Common-Path-Interferometrie
PD	Photodiode
PMMA	Polymethylmethacrylat
PTD	Propagationszeitdifferenz (engl. *propagation time difference*)
RMS	Quadratisches Mittel (engl. *root mean square*)
SBS	Stimulierte Brillouin-Streuung
SiO_2	Siliziumdioxid
SLM	Selective Laser Melting

SPW	Spektrum ebener Wellen (engl. *Spectrum of Plane Waves*)
TOD	Dispersion dritter Ordnung (engl. *third order dispersion*)
WLS	Weighted Least Squares
Yb:YAG	Ytterbium dotiertes Yttrium-Aluminium-Granat
ZOS-API	Zemax OpticStudio Application Programming Interface

Formel-zeichen	**Bedeutung**
a	Konstante
A	Oberfläche, die Wärmestrahlung emittiert
A, B, C	Koeffizienten der Polynomanpassung zur Bestimmung der Strahlkaustik
$A(\lambda_i)$	Spektrale Amplitude
$A_0(\lambda_i)$, $A_0(\nu)$	Spektrale Amplitude eines bandbreitebegrenzten, gaußförmigen Pulses
A_1, A_2	Faktoren der zweiphasigen Exponentialfunktion (Formel **5.1**)
B_j, C_j	Koeffizienten der Sellmeierformel (Formel **2.1**)
c	Oberflächenkrümmung
c_0	Lichtgeschwindigkeit im Vakuum
$\vec{C}_i$	Vektor vom Schwerpunkt eines finiten Elements zum jeweiligen Schwerpunkt der benachbarten Elemente
d	Materialdicke
d_P	Pupillendurchmesser
$d(z)$	Strahldurchmesser
d_i	Strahldurchmesser in der Austrittspupille
d_0	Fokusdurchmesser
def	Oberflächendeformation definiert als Durchbiegung
$\mathrm{d}n/\mathrm{d}T$	Thermooptischer Koeffizient
dr	Radialer Anteil der Oberflächendeformation
$\mathbf{dr}$	Deformationsvektor (3D) im lokalen Koordinatensystem der jeweiligen Oberfläche
$\mathbf{dr_g}$	Deformationsvektor (3D) im globalen Koordinatensystem
ds	Infinitesimales Wegstück (Strahlgleichung in Formel **2.2**)
dx	Anteil der Oberflächendeformation in x-Richtung
dy	Anteil der Oberflächendeformation in y-Richtung
dz	Axialer Anteil der Oberflächendeformation

dz_{sag}	Hilfsgröße zur Berechnung der Durchbiegung der optischen Oberfläche
D	Optische Brechkraft
$D_{\mathrm{d}n/\mathrm{d}T}$	Brechkraft durch temperaturabhängiges Brechungsindexprofil
$D_{\alpha_{th}}$	Brechkraft durch thermische Oberflächendeformation
D_0, D_1, D_2, E_0, E_1, λ_{TK}	Koeffizienten für das nichtlineare Modell des thermooptischen Koeffizienten $\mathrm{d}n/\mathrm{d}T$ (Formel **2.4**)
e	Elementarladung eines Elektrons
$\vec{E}$	Elektrischer Feldvektor
$\vec{E}_{lokal}$	Lokales elektrisches Feld
E_x	x-Komponente des elektrischen Felds
E_y	y-Komponente des elektrischen Felds
E_z	z-Komponente des elektrischen Felds
$E_1(x)$	Integralexponentialfunktion
f	Brennweite bzw. Fokuslage
f_j	Oszillatorstärke (Lorentz-Oszillatormodell)
f_{ref}	Referenzwert der Fokuslage
$\vec{F}_i$	Vektor vom Schwerpunkt eines finiten Elements zu den Mittelpunkten der Seitenflächen
I	Intensität
$I(\omega)$	Spektrale Intensität
$I_m(t)$	Momentane Intensität
I_0	Maximale Intensität eines Gaußstrahls
k	Konische Konstante
$k = 2\pi/\lambda$	Kreiswellenzahl
l	Weglänge im optischen Medium
L	Länge des zylinderförmigen Testkörpers
m_0	Effektive Elektronenmasse
M^2	Strahlqualitätskennzahl bzw. Beugungsmaßzahl
n	Brechungsindex
n_{Luft}	Brechungdindex von Luft
n_{rel}	Brechungsindex relativ zu Luft
n_0	Brechungsindex bei Normalbedingungen (Normaldruck und T_0 = 22 °C)
n_2	Nichtlinearer Brechungsindex (Kerr-Effekt)

N	Anzahl der Gitterpunkte des FE-Netzes
N_e	Elektronendichte
$\vec{N}_i$	Flächennormale eines finiten Elements
P	Laserleistung
$\vec{P}$	Polarisation
P_S	Emittierte Strahlungsleistung
Q	Thermische Last
Q_O	Orthogonale Qualität eines finiten Elements
r	Radiale Koordinate
$\vec{r}$, $\mathbf{r}$	Ortsvektor in 3D
$\tilde{r} = r + dr$	Hilfsgröße zur Berechnung der Durchbiegung der optischen Oberfläche
r_L	Halbdurchmesser des zylinderförmigen Testkörpers
$\langle r \rangle$	Erstes Moment einer rotationssymmetrischen Intensitätsverteilung
$\langle r^2 \rangle$	Zweites Moment einer rotationssymmetrischen Intensitätsverteilung
R	Krümmungsradius
$R(\lambda)$	Reflexionsgrad (Reflexionsverluste durch Fresnelreflexion)
R_{WF}	Krümmungsradius der Wellenfront
R_1	Krümmungsradius der Vorderseite der Kunststofflinse
t	Zeit
T	Temperatur
$T(\lambda)$	Transmissionsgrad
$T_{int}(\lambda)$	Interner Transmissionsgrad
T_{Kamera}	Mit Thermografiekamera gemessene Temperatur
T_{korr}	Korrigierte Temperatur
T_{max}	Maximale Temperatur
T_{min}	Minimale Temperatur
T_{Pt100}	Mit Platinmesswiderstand gemessene Temperatur
T_0	Referenztemperatur
v_G	Gruppengeschwindigkeit
v_p	Phasengeschwindigkeit
V	Volumen
w, $w(z)$	Strahlradius
w_0	Fokusradius

w_x	Strahlradius eines astigmatischen Gaußstrahls in x-Richtung
w_y	Strahlradius eines astigmatischen Gaußstrahls in y-Richtung
WF_{PV}	Spitze-Tal-Wert der Wellenfront
x	Kartesische Koordinate (senkrecht zur Propagationsrichtung der Laserstrahlung)
x'	Kartesische Koordinate des Detektors (Anhang 8.3)
$\tilde{x} = x + dx$	Hilfsgröße zur Berechnung der Durchbiegung der optischen Oberfläche
$\langle x \rangle$	Erstes Moment einer Intensitätsverteilung in x-Richtung
$\langle x^2 \rangle$	Zweites Moment einer Intensitätsverteilung in x-Richtung
y	Kartesische Koordinate (senkrecht zur Propagationsrichtung der Laserstrahlung)
y'	Kartesische Koordinate des Detektors (Anhang 8.3)
$\tilde{y} = y + dy$	Hilfsgröße zur Berechnung der Durchbiegung der optischen Oberfläche
$\langle y \rangle$	Erstes Moment einer Intensitätsverteilung in y-Richtung
$\langle y^2 \rangle$	Zweites Moment einer Intensitätsverteilung in y-Richtung
z	Koordinate in Propagationsrichtung der Laserstrahlung
$z(r)$, $z(x,y)$	Oberflächenform einer sphärischen, asphärischen oder konischen Oberfläche
z_R	Rayleighlänge
z_{ex}	Lage der Austrittspupille
z_0	Fokuslage
α_4, α_6	Asphärische Koeffizienten der Vorderseite der Kunststofflinse
α_{Coat}	Absorptionsgrad einer AR-Beschichtung
α_{abs}	Volumenabsorptionskoeffizient
α_i	Koeffizienten einer asphärischen optischen Oberfläche
α_{th}	Thermischer Ausdehnungskoeffizient
β	Verhältnis von $D_{\mathrm{d}n/\mathrm{d}T}$ zu $D_{\alpha_{th}}$
γ	Euler-Mascheroni-Konstante, auch Eulersche Konstante genannt
γ_j	Dämpfungsterm (Lorentz-Oszillatormodell)
$\delta\omega$	Frequenzverschiebung durch Selbstphasenmodulation
Δf	Fokusverschiebung
ΔL	Zusätzlicher optischer Weg durch Brechungsindexänderung
Δn	Brechungsindexänderung relativ zu n_0
ΔT	Erwärmung, Temperaturdifferenz

Δx	Laterale Fokusverschiebung in x-Richtung
Δy	Laterale Fokusverschiebung in y-Richtung
Δz	Axiale Fokusverschiebung
$\Delta\lambda$	Spektrale Breite im Wellenlängenraum (Halbwertsbreite)
$\Delta\nu$	Spektrale Breite im Frequenzraum (Halbwertsbreite)
ε	Emissionsgrad
ε_r	Dielektrizitätsfunktion
ε_0	Dielektrische Konstante
θ	Divergenzwinkel (Vollwinkel)
κ	Wärmeleitfähigkeit
λ	Wellenlänge
λ_0	Zentralwellenlänge eines Pulses
ν	Frequenz
ν_d	Abbe-Zahl
ν_0	Trägerfrequenz
ξ	Substitutionsvariable
ρ_x, ρ_y	Normierte Pupillenkoordinaten
σ	Stefan-Boltzmann-Konstante
τ, τ_0	Pulsdauer (definiert als Halbwertsbreite)
τ_{fast}	Zeitkonstante der schnellen Fokusverschiebung
τ_{slow}	Zeitkonstante der langsamen Fokusverschiebung
φ	Winkel zwischen den Achsen des astigmatischen Gaußstrahls und den Detektorachsen (Anhang 8.3)
φ	Polarwinkel
$\phi(\lambda_i)$, $\phi(\omega)$	Spektrale Phase eines Pulses
$\phi^{(i)}$	Koeffizienten der Taylorentwicklung der spektralen Phase
ϕ_{Offset}	Offset der spektralen Phase
$\tilde{\phi}(t)$	Nichtlineare Phase
$\tilde{\phi}_{NL}$	Maximale nichtlineare Phase
χ_a	Elektrische Suszeptibilität
ω	Kreisfrequenz
ω_j	Resonanzfrequenz (Lorentz-Oszillatormodell)
ω_0	Trägerfrequenz des Pulses
$\widetilde{\omega} = \omega - \omega_0$	Frequenz relativ zur Trägerfrequenz

1 Motivation, Zielsetzung und Vorgehensweise

Das Werkzeug Laser hat sich aufgrund von verfahrenstechnischen Vorteilen im industriellen Umfeld etabliert. Die Anwendungsbereiche erstrecken sich vom Laserschneiden und -schweißen über die Oberflächenbehandlung bis zu additiven Fertigungsverfahren [1]. Zur Steigerung der Produktivität und Prozessqualität werden zunehmend Strahlquellen mit Leistungen im Multi-Kilowatt-Bereich sowie hoher Strahlqualität eingesetzt. Dies hat zur Folge, dass die thermischen Lasten auf strahlformenden und -führenden optischen Elementen, die durch Absorption von Laserstrahlung verursacht werden, zunehmen. Durch die Erwärmung ändern sich die optischen Eigenschaften der Komponenten, was die Qualität und Stabilität der Laserbearbeitungsprozesse beeinträchtigt. Neben einer Verschiebung der Fokuslage können Aberrationen auftreten, die sowohl Einfluss auf die Intensitätsverteilung an der Werkstückoberfläche haben als auch die Strahlqualität verschlechtern. Thermisch induzierte Aberrationen können außerdem die Bildqualität einer koaxialen Prozessbeobachtung signifikant herabsetzten [2, 3]. Folglich besteht großer Entwicklungsbedarf an thermisch stabilen optischen Systemen für die Lasermaterialbearbeitung. Deren Auslegung setzt geeignete multiphysikalische Berechnungen und Simulationen voraus. Darüber hinaus existieren bislang keine kommerziellen Messmittel, um die transiente winkelabhängige Fokusverschiebung in Scanner-basierten Laserbearbeitungsverfahren, wie dem Selective Laser Melting (SLM), zu erfassen. Hier können Simulationen helfen, das Prozessverständnis im Hinblick auf thermooptische Effekte zu verbessern.

Kunststoffoptiken werden aufgrund signifikanter thermooptischer Effekte bisher nicht in Laseranwendungen eingesetzt. Dabei weisen thermoplastische Kunststoffe gegenüber dem Werkstoff Glas Vorteile auf, die bei optischen Anwendungen im Consumer-Bereich, wie Beleuchtungssystemen [4] oder Kameraobjektiven für Smartphones [5], bereits genutzt werden. Zu diesen Vorteilen zählen neben einer deutlichen Gewichtsreduzierung insbesondere die große Designfreiheit und die Eignung für die Massenfertigung mittels Spritzgießen oder -prägen [6]. Aufgrund der Materialeigenschaften von Kunststoffen treten eine signifikante Fokusverschiebung und Aberrationen schon bei wenigen Watt Laserleistung auf [7, 8]. Da Laseroptiken im Gegensatz zu Optiken für Beleuchtungsanwendungen nicht über die gesamte Apertur ausgeleuchtet werden, führt die Laserstrahlung zu einer lokalen Erwärmung der Kunststoffoptik und folglich zu großen thermischen Gradienten. Eine beugungsbegrenzte Fokussierung kann daher nicht oder nur schwer erzielt werden. Die Berücksichtigung sowie die Kompensation thermischer Effekte bei der Auslegung von Kunststoffoptiken zählen nicht zum Stand der Technik, sind jedoch Voraussetzung für einen erfolgreichen Einsatz

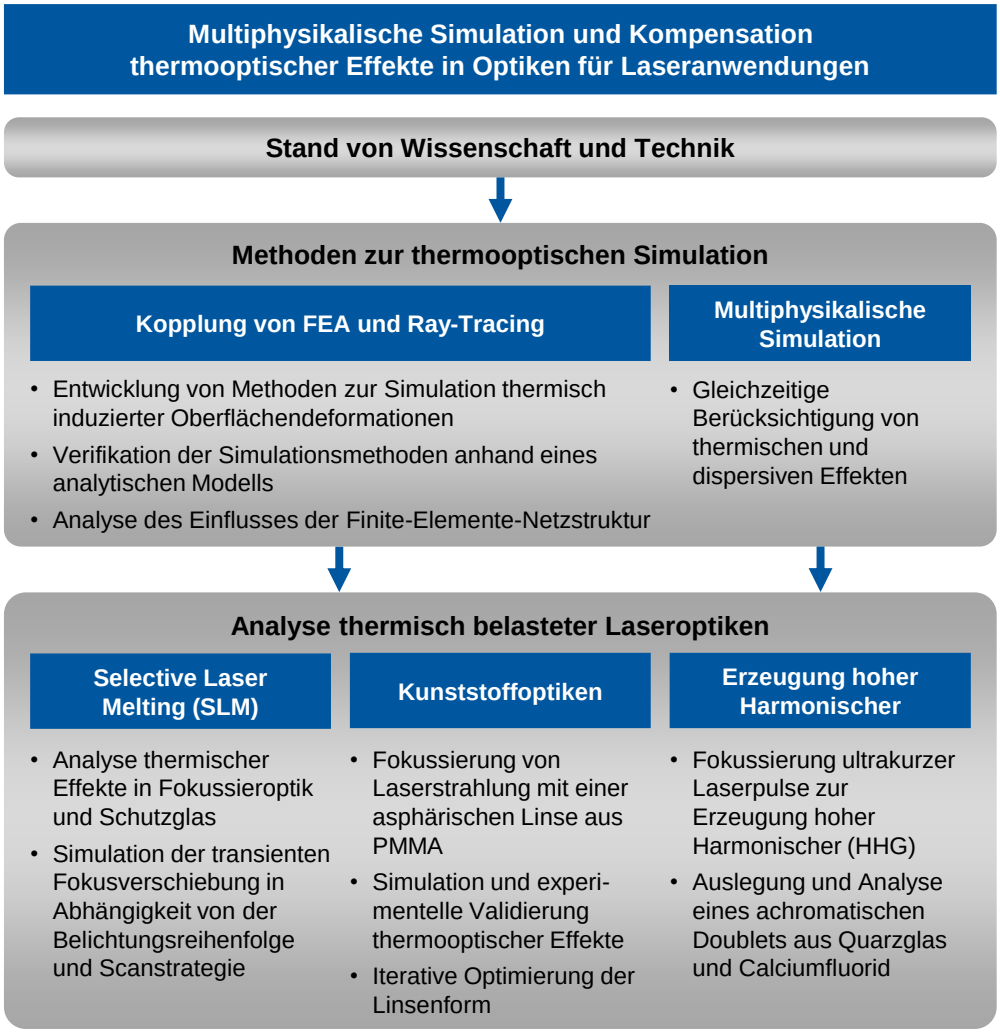
von Kunststoffoptiken in Laseranwendungen mit niedrigen und mittleren Leistungen (≤ 100 W), beispielsweise dem Laserbeschriften.

Bei der Verwendung ultrakurzer Laserpulse hoher mittlerer Leistung treten thermooptische und dispersive Effekte auf. Ein Beispiel ist die Erzeugung hoher Harmonischer (engl. *high harmonic generation*, HHG) aus infraroter Laserstrahlung [9, 10]. Die so erzeugte räumlich und zeitlich kohärente extrem ultraviolette (EUV) Strahlung im Wellenlängenbereich von 30 nm bis 100 nm besitzt zahlreiche wissenschaftliche Anwendungen [11]. Um die für den HHG-Prozess in Edelgasen erforderlichen Intensitäten von 10^{13} W/cm^2 bis 10^{15} W/cm^2 zu erzielen, werden ultrakurze Laserpulse (Pulsdauer ≤ 120 fs) bei mittleren Leistungen bis zu 170 W verwendet, wobei der Trend zu ≥ 300 W geht [12]. Zur Vermeidung chromatischer Effekte bei der Fokussierung der ultrakurzen Pulse werden entweder sphärische bzw. parabolische Spiegel oder achromatische Fokussieroptiken eingesetzt. Bei der Auslegung letzterer besteht die Herausforderung, gleichzeitig dispersive und thermooptische Effekte sowie deren Einfluss auf die Intensitätsverteilung im Fokus zu berücksichtigen. Dies ist derzeit mit kommerziellen Programmen zur Optikauslegung nicht möglich.

Ziel dieser Arbeit ist es, bestehende Methoden zur Simulation thermooptischer Effekte zu erweitern und sie auf Optiken für die Lasermaterialbearbeitung sowie die Erzeugung hoher Harmonischer anzuwenden. So sollen die genannten Lücken im Stand von Wissenschaft und Technik (vgl. Kapitel 2) geschlossen werden. Die einzelnen Arbeitsschritte sowie die zugehörigen Methoden sind in Bild 1 dargestellt.

Die Methoden zur thermooptischen Simulation werden in Kapitel 3 ausgeführt. Im ersten Schritt wird die bestehende Kopplung von Finite-Elemente-Analyse (FEA) und Ray-Tracing zur Simulation thermooptischer Effekte [13] weiterentwickelt, um thermisch induzierte Oberflächendeformationen präzise berücksichtigen zu können. Ein analytisches Modell für die thermooptischen Effekte dient zur Verifikation der Simulationsmethoden. Ergänzend wird der Einfluss der Finite-Elemente-Netzstruktur auf die Modellbildung systematisch untersucht. Eine gleichzeige Analyse von thermischen und dispersiven Effekten wird durch eine Kopplung von FEA und optischer Analyse auf der Basis strahlen- und wellenoptischer Methoden ermöglicht. Die verwendeten experimentellen Methoden zur Charakterisierung thermisch belasteter Optiken sowie zur Verifikation der Simulationsergebnisse sind in Kapitel 4 dargestellt.

Bild 1: Vorgehensweise und Ziele dieser Arbeit.



Kapitel 5 beschreibt die Anwendung von Simulationsmethoden und experimentellen Methoden auf praxisrelevante Anwendungsfälle. Für den weiten Bereich der Lasermaterialbearbeitung werden beispielhaft thermische Effekte in einer variablen Fokussieroptik für das additive Fertigungsverfahren Selective Laser Melting (SLM) untersucht. Dabei wird u. a. der Einfluss der thermischen Kopplung zwischen Linse und Halter auf die transiente Erwärmung analysiert. Darüber hinaus wird die transiente Fokusverschiebung beim SLM-Prozess simuliert, die durch ein kontaminiertes Schutzglas zwischen Laserscanner und Baukammer verursacht wird. Auf diese Weise kann der Einfluss der Scanstrategie auf die Fokusverschiebung untersucht werden.

Als zweites werden die erarbeiteten Methoden auf den Werkstoff Polymethylmethacrylat (PMMA) angewendet und die thermooptischen Effekte einer asphärischen Linse aus PMMA systematisch analysiert. So wird eine Basis für den verlässlichen Einsatz von Kunststoffoptiken in Laseranwendungen geschaffen. Die Form der Linse wird iterativ für einen definierten Betriebspunkt, d. h. eine gegebene thermische Last, optimiert, um thermisch induzierte Aberrationen zu minimieren.

Als dritter Anwendungsfall werden thermooptische und dispersive Effekte in Fokussieroptiken für die Erzeugung hoher Harmonischer untersucht. Dazu wird ein achromatisches Doublet für hohe mittlere Laserleistungen aus Quarzglas und Calciumfluorid ausgelegt. Die optischen Eigenschaften werden mit denen eines Doublets aus Standardgläsern sowie denen eines chromatisch nicht korrigierten Doublets aus Quarzglas verglichen.

2 Stand von Wissenschaft und Technik

Hohe Laserleistungen induzieren aufgrund von Volumenabsorption sowie Absorption in optischen Vergütungen thermische Lasten in strahlformenden und -führenden optischen Elementen, die zu einer inhomogenen Erwärmung führen. Wie in Abschnitt 2.1 dargestellt, ändern sich die optischen Eigenschaften mit der Temperatur. Entscheidend für den Einfluss thermischer Effekte auf die Eigenschaften eines optischen Systems, wie z. B. die Fokuslage, sind Materialparameter, insbesondere der thermooptische Koeffizient und der thermische Ausdehnungskoeffizient. Diese und weitere relevante Materialparameter werden in Abschnitt 2.2 für verschiedene optische Gläser und Kunststoffe zusammengestellt und verglichen. Zur Simulation thermooptischer Effekte wird häufig eine Kopplung von thermomechanischer Finite-Elemente-Analyse (FEA) und optischer Analyse mittels Ray-Tracing verwendet. Verschiedene Ansätze aus Wissenschaft und Technik werden in Abschnitt 2.3 vorgestellt und vorhandene Defizite identifiziert. Da nicht für jedes optische System eine Simulation möglich ist, z. B. wenn die erforderlichen Daten für eine proprietäre Optik nicht vorliegen, ist eine experimentelle Charakterisierung der optischen Eigenschaften in Abhängigkeit von der Laserleistung erforderlich. Verschiedene Messmittel werden in Abschnitt 2.4 einander gegenübergestellt. Voraussetzung für eine präzise Simulation thermooptischer Effekte ist die Kenntnis des Absorptionskoeffizienten im Volumenmaterial sowie des Absorptionsgrads optischer Vergütungen wie Antireflexbeschichtungen. Insbesondere der Absorptionsgrad von Vergütungen hängt signifikant von der Beschichtungsmethode und der Oberflächenbeschaffenheit des Substrats ab [14], wird jedoch nur selten von den Herstellern spezifiziert. Daher sind ggf. Absorptionsmessungen erforderlich (vgl. Abschnitt 2.5). Die räumliche und zeitliche Form von ultrakurzen Laserpulsen wird neben thermooptischen Effekten durch Dispersion beeinflusst. Die physikalischen Grundlagen dispersiver Effekte in refraktiven Optiken werden in Abschnitt 2.6 beschrieben. Schließlich werden aus den aktuellen Defiziten im Stand von Wissenschaft und Technik konkrete Forschungsgegenstände sowie die zugehörigen Arbeitsschritte abgeleitet, die in den folgenden Kapiteln ausgeführt werden.

2.1 Thermooptische Effekte

Die Eigenschaften von refraktiven optischen Elementen können bei gegebener (Oberflächen-)Geometrie auf Basis der makroskopischen Größe des Brechungsindex und des Brechungsgesetzes nach Snellius berechnet werden. Der Brechungsindex n hängt von der Wellenlänge λ der Laser-

strahlung ab und wird üblicherweise durch eine empirische Gleichung beschrieben. Am geläufigsten ist die Sellmeierformel [15]

2.1

$$n(\lambda)^2 = 1 + \sum_{j=1}^{3} \frac{B_j \lambda^2}{\lambda^2 - C_j}.$$

Die sechs Koeffizienten B_j und C_j werden durch eine Modellanpassung an experimentelle Daten für den Brechungsindex unter Normalbedingungen, d. h. für eine Temperatur T_0 = 22°C und Normaldruck, ermittelt.

Das Brechungsgesetz und die Sellmeierformel setzen ein homogenes Volumenmaterial voraus, d. h. eine konstante Temperatur- und Dichteverteilung. Diese Bedingung wird jedoch verletzt, wenn sich die optischen Elemente aufgrund thermischer Lasten erwärmen und ausdehnen. Die resultierenden thermooptischen Effekte können wie folgt gegliedert werden:

- Brechungsindexänderung in Abhängigkeit von der lokalen Temperatur,
- Oberflächendeformation aufgrund der thermischen Ausdehnung des Volumenmaterials und
- spannungsinduzierte Doppelbrechung.

Die qualitative Auswirkung der ersten beiden Effekte auf die Strahlpropagation durch eine planparallele Platte ist schematisch in Bild 2 dargestellt. Die Brechungsindexänderung mit der Temperatur führt je nach Vorzeichen des thermooptischen Koeffizienten $\mathrm{d}n/\mathrm{d}T$, der materialabhängig ist, zu einer Fokussierung oder Defokussierung der Laserstrahlung. Die physikalischen Grundlagen hierzu werden in den folgenden Abschnitten erläutert. Die Oberflächendeformation ruft eine Brechung der Strahlen hin zur optischen Achse und somit eine Fokussierung hervor. Die spannungsinduzierte Doppelbrechung beeinflusst den Polarisationszustand. Für optische Gläser ist dieser Effekt in der Regel zu vernachlässigen [16]. Die thermooptischen Effekte werden in Abschnitt 2.2 (insb. Tabelle 1) zueinander ins Verhältnis gesetzt.

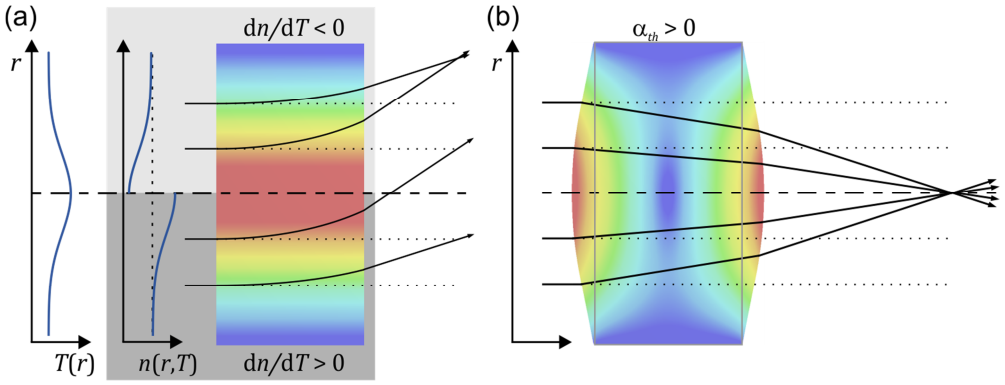


Bild 2: Schematische Darstellung der thermooptischen Effekte einer planparallelen Platte: (a) temperaturabhängiges Brechungsindexprofil und (b) thermisch induzierte Oberflächendeformation.

2.1.1 Temperatur- und wellenlängenabhängiger Brechungsindex

In optischen Materialien mit inhomogenem Brechungsindexprofil erfolgt die Berechnung der Strahlpropagation gemäß der differentiellen Strahlgleichung [17]

2.2
$$\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}s}\left(n(\vec{r})\frac{\mathrm{d}\vec{r}}{\mathrm{d}s}\right) = \nabla n(\vec{r}),$$

die auf dem Prinzip nach Fermat beruht. $\mathrm{d}s$ bezeichnet ein infinitesimales Stück entlang des Strahls und $\vec{r}$ die Position. Der Strahlweg hängt folglich vom lokalen Brechungsindexprofil $n(\vec{r})$ und dessen Gradienten ab. In erster Näherung kann der Brechungsindex durch eine lineare Temperaturabhängigkeit beschrieben werden, sodass

2.3
$$n(\lambda, T) = n_0(\lambda, T_0) + \frac{\mathrm{d}n}{\mathrm{d}T}\Delta T, \qquad \Delta T = T - T_0,$$

folgt. Dabei ist $n_0(\lambda, T_0)$ durch Formel **2.1** gegeben. Die Ableitung des Brechungsindex nach der Temperatur, $\mathrm{d}n/\mathrm{d}T$, wird als thermooptischer Koeffizient bezeichnet. In Abschnitt 2.2 werden Zahlenwerte für unterschiedliche optische Materialien angegeben. Wie im Anhang 8.1 dargestellt, sollte nicht der relativ zum Brechungsindex von Luft definierte thermooptische Koeffizient, sondern der absolute verwendet werden.

Für viele Materialien liegt eine ausgeprägte Abhängigkeit des thermooptischen Koeffizienten von der Temperatur und Wellenlänge vor. Daher führen Hoffmann et al. ein erweitertes, nichtlineares Modell der Form [18]

2.4
$$\frac{\mathrm{d}n}{\mathrm{d}T}(\lambda, T) = \frac{n_0^2(\lambda, T_0) - 1}{2n_0(\lambda, T_0)}\left[D_0 + 2D_1\Delta T + 3D_2\Delta T^2 + \frac{E_0 + 2E_1\Delta T}{\lambda^2 - \lambda_{TK}^2}\right]$$

ein. Die Koeffizienten D_i, E_i und λ_{TK} sind wiederum durch eine Modellanpassung an experimentelle Daten zu ermitteln. Diese Koeffizienten sind in der Literatur bislang lediglich für die meisten optischen Gläser [19] zu finden, jedoch selten für Quarzglas oder Kristalle und für keine optischen Kunststoffe. Die Integration von Formel **2.4** ergibt den gesuchten Brechungsindex

2.5
$$n(\lambda, T) = n_0(\lambda, T_0) + \frac{n_0^2(\lambda, T_0) - 1}{2n_0(\lambda, T_0)}\left[D_0\Delta T + D_1\Delta T^2 + D_2\Delta T^3 + \frac{E_0\Delta T + E_1\Delta T^2}{\lambda^2 - \lambda_{TK}^2}\right],$$

der in die Strahlgleichung **2.2** eingesetzt werden kann.

Ein Vergleich der beiden Modelle für das Standardglas N-BK7 (Materialdaten gemäß [19]) zeigt die Notwendigkeit des erweiterten Modells im Hinblick auf eine präzise Simulation. In Bild 3 sind der thermooptische Koeffizient sowie die resultierende Brechungsindexänderung Δn für

532 nm sowie 1064 nm Wellenlänge und den Temperaturbereich von 0 °C bis 150 °C dargestellt. Für die Ausgangstemperatur gilt T_0 = 22 °C.

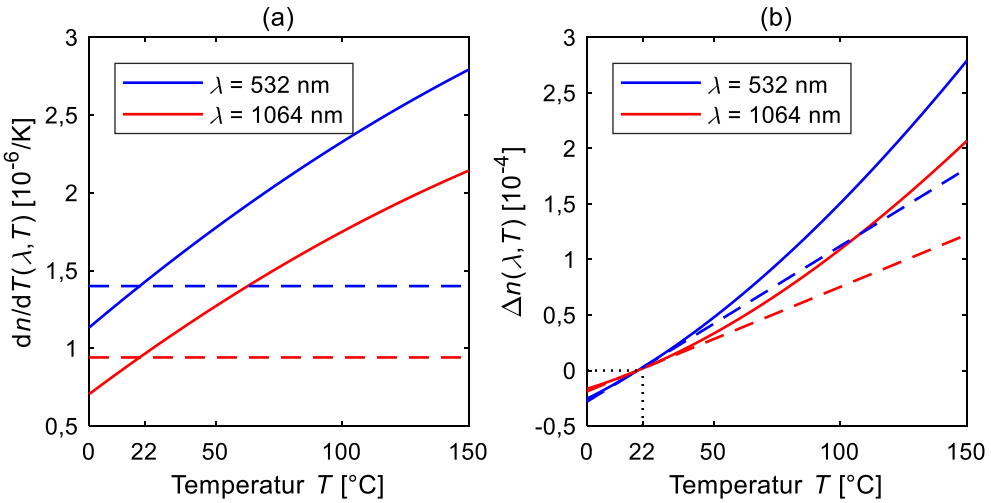


Bild 3: Thermooptischer Koeffizient (a) sowie Brechungsindexänderung (b) in Abhängigkeit von der Temperatur und Wellenlänge für das Standardglas N-BK7. Die gestrichelten Kurven gelten für eine lineare Temperaturabhängigkeit.

Das lineare Modell gemäß Formel **2.3** ergibt eine lineare Änderung des Brechungsindex $\Delta n = \mathrm{d}n/\mathrm{d}T \cdot \Delta T$ mit der Temperaturänderung ΔT (vgl. Bild 3 b). Da der Brechungsindex bei 532 nm Wellenlänge aufgrund von Dispersion größer ist als bei 1064 nm, ist der thermooptische Koeffizient ebenfalls größer (vgl. Formel **2.12** in Abschnitt 2.1.2). Für das nichtlineare Modell nach Hoffmann et al. resultiert eine deutliche Abhängigkeit des thermooptischen Koeffizienten von der Temperatur (vgl. Bild 3 a). Grund hierfür sind die Temperaturabhängigkeit des thermischen Ausdehnungskoeffizienten sowie der Polarisierbarkeit (vgl. Abschnitt 2.1.2). Folglich nimmt die Brechungsindexänderung progressiv mit der Temperatur zu. Insgesamt ergibt das nichtlineare Modell bei einer Erwärmung des Glases auf 150 °C eine um etwa 40 % größere Brechungsindexänderung als das lineare Modell.

2.1.2 Lorentz-Lorenz-Gleichung

Zum Verständnis, welche physikalischen Effekte eine Änderung des Brechungsindex mit der Temperatur verursachen, kann die Lorentz-Lorenz-Gleichung herangezogen werden. Ausgangspunkt für deren Herleitung ist das sogenannte Lorentz-Oszillatormodell für gebundene Elektronen. Dies beschreibt vereinfacht die Reaktion eines Elektrons, d. h. die Auslenkung aus der Gleichgewichtslage, auf ein externes elektrisches Feld als gedämpften harmonischen Oszillator [20, 21]. In der erweiterten Form für vielfache Resonanzen bei den Frequenzen ω_j ergibt sich die frequenzabhängige Dielektriziätsfunktion zu [21]

2.6

$$\varepsilon_r(\omega) = 1 + \chi_a = 1 + \frac{N_e e^2}{\varepsilon_0 m_0} \sum_j \frac{f_j}{\omega_j^2 - \omega^2 - i\gamma_j \omega}.$$

Dabei sind χ_a die elektrische Suszeptibilität, N_e die Elektronendichte, e die Elementarladung, m_0 die effektive Masse der Elektronen und ε_0 die dielektrische Konstante. γ_j gibt den jeweiligen Dämpfungsterm und f_j die Oszillatorstärke an.

Die Beziehung in **2.6** gilt nur für Gase mit geringer Atomdichte. In Festkörpern beeinflussen sich hingegen die elektrischen Dipole gegenseitig. Da das elektrische Feld durch die anderen Dipole analytisch nicht zu berechnen ist, wird im Modell angenommen, dass sich die Dipole parallel zum externen Feld ausrichten und das Medium isotrop ist. Das lokale Feld, das ein einzelner Dipol erfährt, beträgt $\vec{E}_{lokal} = \vec{E} + \vec{P}/3\varepsilon_0$. Der zweite Term entspricht dem elektrischen Feld einer homogen polarisierten Kugel, dem sogenannten Lorentz-Feld. In dieser Näherung beträgt die makroskopische Polarisation des Mediums [21]

2.7
$$\vec{P} = N_e \varepsilon_0 \chi_a \vec{E}_{lokal} = N_e \varepsilon_0 \chi_a \left(\vec{E} + \frac{\vec{P}}{3\varepsilon_0} \right)$$

und hängt von der elektrischen Suszeptibilität χ_a pro Atom ab. Mit $\vec{P} = (\varepsilon_r - 1)\varepsilon_0 \vec{E}$ folgt schließlich die Clausius-Mosotti-Gleichung

2.8
$$\frac{\varepsilon_r - 1}{\varepsilon_r + 2} = \frac{N_e \chi_\mathrm{a}}{3},$$

welche äquivalent zur Lorentz-Lorenz-Gleichung

2.9
$$\frac{n^2 - 1}{n^2 + 2} = \frac{N_e \chi_\mathrm{a}}{3}$$

ist. Dabei gilt für den Brechungsindex $n = \sqrt{\varepsilon_r}$.

Die Ableitung der Lorentz-Lorenz-Gleichung nach der Temperatur ergibt ein Modell für den thermooptischen Koeffizienten:

2.10
$$\frac{\mathrm{d}n}{\mathrm{d}T} = \frac{(n^2 - 1)(n^2 + 2)}{6n} \left(\frac{1}{\chi_a} \frac{\mathrm{d}\chi_a}{\mathrm{d}T} + \frac{1}{N_e} \frac{\mathrm{d}N_e}{\mathrm{d}T} \right).$$

Die Herleitung von Gleichung **2.10** kann im Anhang 8.2 nachvollzogen werden. Die relative Änderung der Teilchendichte mit der Temperatur kann für isotrope Materialien zur Volumenänderung $\mathrm{d}V/\mathrm{d}T$ und somit näherungsweise zum thermischen Ausdehnungskoeffizienten α_{th} in Beziehung gesetzt werden. Mit

2.11
$$\frac{1}{N_e} \frac{\mathrm{d}N_e}{\mathrm{d}T} = -\frac{1}{V} \frac{\mathrm{d}V}{\mathrm{d}T} \approx -3\alpha_{th}$$

folgt [8]

2.12
$$\frac{\mathrm{d}n}{\mathrm{d}T} = \frac{(n^2-1)(n^2+2)}{6n}\left(\frac{1}{\chi_a}\frac{\mathrm{d}\chi_a}{\mathrm{d}T} - 3\alpha_{th}\right).$$

Folglich skaliert der thermooptische Koeffizient mit der relativen Änderung der Suszeptibilität, d. h. der Polarisierbarkeit, mit der Temperatur sowie mit dem thermischen Ausdehnungskoeffizienten. Für optische Gläser sind beide Terme von derselben Größenordnung, sodass $\mathrm{d}n/\mathrm{d}T$ positive oder negative Werte annehmen kann. Aufgrund der großen thermischen Ausdehnung von thermoplastischen Kunststoffen im Bereich von $\alpha_{th} \approx 1{\cdot}10^{-4}$ 1/m ist $\mathrm{d}n/\mathrm{d}T$ für diese Werkstoffe grundsätzlich negativ [8].

2.2 Kompensationsmethoden und Materialparameter

Da die Entwicklung von Kompensationsmethoden eng mit der Wahl geeigneter Materialien verknüpft ist, werden beide Aspekte gemeinsam diskutiert. Ansätze zur Kompensation thermooptischer Effekte können in die Bereiche der Designoptimierung sowie der aktiven und passiven Kompensationsmethoden unterteilt werden. Gatej beschreibt in [13, 16] ausführlich unterschiedliche Kompensationsmethoden. Folgende Ansätze sind zentral:

Design- und Prozessoptimierungen:

- Verringerung des Absorptionsgrads der optischen Elemente, z. B. durch die Verwendung von Quarzgläsern mit geringer intrinsischer Absorption (aufgrund eines geringen OH-Gehalts) wie Heraeus Suprasil 3001 [22] sowie durch die Auswahl hochwertiger optischer Vergütungen, vorzugsweise mittels Ionenstrahlsputtern (engl. *ion beam sputtering*, IBS) hergestellt [23];
- Verringerung der Anzahl optischer Elemente und/oder Verringerung der thermischen Last durch größere Strahlquerschnitte auf den Optiken;
- Angepasste thermische Randbedingungen durch eine aktive oder passive Kühlung bzw. Heizung: Da eine Kühlung des Rands einer Optik den Temperatur- und damit den Brechungsindexgradienten im Allgemeinen vergrößert, kann ein gezieltes Heizen des optischen Elements hilfreich sein [24].
- Vermeidung einer Kontamination der Optiken während des Bearbeitungsprozesses. Bei Laserbearbeitungsköpfen oder SLM-Anlagen hat sich der Einsatz von Schutzgläsern in Kombination mit einer Schutzgasströmung etabliert. Allerdings muss sichergestellt werden, dass die Schutzgläser rechtzeitig getauscht oder gereinigt werden, da diese sonst eine signifikante Fokusverschiebung induzieren können [25].

Aktive Kompensationsmethoden:

Aktive Methoden werden bisher vorwiegend zur Kompensation thermooptischer Effekte in Laserstrahlquellen eingesetzt.

- Aktive Positionierung von optischen Komponenten in Abhängigkeit von der Laserleistung oder der gemessenen/simulierten Fokuslage [26];
- Einsatz von aktiven Strahlformungselementen wie Membranspiegeln oder die aktive Deformation eines planen Spiegels [27] zur Beeinflussung der Fokuslage.

Passive Kompensationsmethoden:

Die passive Kompensation beruht i. d. R. auf der geeigneten Kombination verschiedener optischer Materialien mit positivem und negativem thermooptischen Koeffizienten [16, 28–30]. In Festkörperlasersystemen können thermooptische Effekte außerdem mit Phasenkonjugatoren passiv kompensiert werden [31]. Eine mit Gas oder Flüssigkeit gefüllte Zelle dient als phasenkonjugierter Resonatorspiegel, wobei das Phasengitter durch stimulierte Brillouin-Streuung (SBS) induziert wird [32, 33]. Die Phasenkonjugation kompensiert die thermisch induzierten Phasenstörungen. Eine kommerzielle Anwendung stellte die Strahlquelle *Infinity 40-100* der Fa. Coherent dar.

Das Funktionsprinzip der Kombination optischer Materialien mit positivem und negativem thermooptischen Koeffizienten kann anhand eines analytischen Modells für die thermische Brechkraft einer planparallelen Platte nachvollzogen werden. Koechner nimmt rein axiale Wärmeleitung und ein homogenes Strahlprofil an [34]. Die Brechkraft aufgrund des temperaturabhängigen Brechungsindexprofils beträgt bei diesen Annahmen

2.13

$$D_{\mathrm{d}n/\mathrm{d}T} = \frac{\alpha_{abs} P}{2\pi\kappa w^2} \cdot \frac{\mathrm{d}n}{\mathrm{d}T},$$

wobei P die Laserleistung und w der Strahlradius sind. α_{abs} gibt den Volumenabsorptionskoeffizienten und κ die Wärmeleitfähigkeit des Materials an. Die Brechkraft aufgrund der thermischen Oberflächendeformation beträgt [34]

2.14

$$D_{\alpha_{th}} = \frac{\alpha_{abs} P}{2\pi\kappa w^2}(n-1)\alpha_{th}$$

mit dem thermischen Ausdehnungskoeffizienten α_{th}. Die Brechkräfte addieren sich näherungsweise zur gesamten thermischen Brechkraft der planparallelen Platte. Für den Fall, dass $D_{\mathrm{d}n/\mathrm{d}T}$ und $D_{\alpha_{th}}$ den selben Betrag haben, sich aber im Vorzeichen unterscheiden, liegt eine Selbstkompensation der thermooptischen Effekte vor. Entsprechend muss das Verhältnis

2.15

$$\beta = \frac{D_{\mathrm{d}n/\mathrm{d}T}}{D_{\alpha_{th}}} = \frac{(n-1)\alpha_{th}}{\mathrm{d}n/\mathrm{d}T}$$

den Wert –1 annehmen. Diese Abschätzung verwendet auch Gatej zur Beurteilung verschiedener Materialien in [13].

In Tabelle 1 sind die Materialdaten und der daraus resultierende Faktor β für ausgewählte optische Gläser, darunter zwei Quarzgläser, das kristalline Material Calciumfluorid (CaF_2) sowie drei Kunststoffe aufgelistet. Der Volumenabsorptionskoeffizient wird auf Basis des internen Transmissionsgrads berechnet (vgl. Abschnitt 2.5). Außerdem wird die Wärmeleitfähigkeit angegeben.

Material	n(1064 nm)	$\mathrm{d}n/\mathrm{d}T$ [10^{-6}/K]	α_{th} [10^{-6}/K]	κ [W/mK]	α_{abs} [%/cm]	β	Quellen
N-BK7	1,506635	1,1	8,3	1,114	0,12	3,82	[19]
N-SF11	1,753896	–1,4	9,9	0,950	0,08	–5,33	[19]
N-FK51A	1,479557	–7,3	14,8	0,76	0,24	–0,97	[19]
N-PK52A	1,489678	–8,0	15,0	0,73	0,24	–0,92	[19]
Corning C79-80	1,449633	9,6	0,57	1,3	0,002	0,03	[35]
Heraeus Suprasil 3001	1,449914	9,6	0,51	1,38	<0,0001	0,02	[22, 36]
CaF_2	1,428501	–11,5	18,7	9,71	0,002	–0,76	[37, 38]
PC (Makrolon LED2245)	1,566	–134*	65	0,20	1,1**	–0,27	[7, 39]
PMMA	1,483	–102*	60	0,20	2,6***	–0,28	[6]
LSR7070	1,4122 @ 589 nm	–300 @ 589 nm	270	0,19	1,6**	–0,37	[40, 41]

Tabelle 1: Materialdaten ausgewählter optischer Gläser, Kristalle und Kunststoffe. Sofern nicht anders angegeben, gelten die Werte für den Brechungsindex n, den thermooptischen Koeffizienten $\mathrm{d}n/\mathrm{d}T$ und den Volumenabsorptionskoeffizienten α_{abs} für eine Wellenlänge von 1064 nm. Die gelisteten Daten werden für die in Kapitel 5 dargestellten Simulationen verwendet.
*Gemäß Formel **2.12** auf Basis von n und α_{th} berechnet.
**Eigene Absorptionsmessung mittels Spektralphotometrie.
***Indirekt durch Abgleich von Thermografiemessungen und Temperaturfeldanalyse ermittelt (vgl. Abschnitt 5.2.1).

Für das Standardglas N-BK7 dominiert der Effekt der thermischen Deformation gegenüber der Brechungsindexänderung. Das Glas N-FK51A erfüllt nahezu die Bedingung der Selbstkompensation. Allerdings ist es etwa 10-mal so teuer wie N-BK7. Aufgrund des hohen Volumenabsorptionskoeffizienten ist N-FK51A für den Einsatz im Kilowatt-Bereich ungeeignet. Bei Quarzgläsern (Corning C79-80 und Heraeus Suprasil 3001) ist die thermisch induzierte Oberflächendeformation aufgrund des geringen Ausdehnungskoeffizienten von etwa $0{,}5 \cdot 10^{-6}$ 1/K vernachlässigbar klein. Aufgrund der geringen intrinsischen Absorption im ppm-Bereich wird Quarzglas häufig für Hochleistungsoptiken verwendet. CaF_2 eignet sich zur passiven Kompensation in Kombination mit anderen Materialien. Da

$0 > \beta > -1$, kann eine positive thermische Brechkraft anderer optischer Komponenten kompensiert werden. Allerdings weist CaF_2 aufgrund der kristallinen Struktur eine etwa 10-mal so große Wärmeleitfähigkeit auf wie die von Gläsern. Um eine Kompensation auch während des transienten Aufwärmvorgangs zu erzielen, müssen die Zeitkonstanten angepasst werden, z. B. durch eine geeignete Wahl des Linsendurchmessers [13]. Dies setzt jedoch voraus, dass die akkumulierte Wärme primär radial durch Wärmeleitung in den Halter abgeführt wird.

Die thermoplastischen Kunststoffe Polycarbonat (PC) und Polymethylmethacrylat (PMMA) weisen sehr ähnliche optische Eigenschaften auf. Der thermische Ausdehnungskoeffizient ist etwa um ein 7-faches, der thermooptische Koeffizient gar um einen Faktor 100 größer als für N-BK7 (vgl. Tabelle 1). Zusammen mit einem vergleichsweise hohen Absorptionskoeffizient von > 1 %/cm sind signifikante thermische Effekte bereits bei wenigen Watt Laserleistung zu erwarten. Werden PC und PMMA über eine längere Zeit UV-Licht oder hohen Temperaturen ausgesetzt, kommt es zu einer Vergilbung, die den Transmissionsgrad herabsetzt [42]. Im Gegensatz dazu ist das Elastomer Liquid Silicone Rubber (LSR7070) bis zu 200 °C hitzebeständig sowie UV-beständig [40]. Allerdings sind die thermooptischen Effekte etwa um einen Faktor drei größer als für Thermoplaste. Da, wie in Abschnitt 2.1.2 gezeigt, Kunststoffe aufgrund der großen thermischen Ausdehnung einen negativen thermooptischen Koeffizienten aufweisen, ist es nicht möglich, durch eine Kombination verschiedener Kunststoffe eine passive Kompensation zu erreichen. Durch eine Kombination von Kunststofflinsen mit ein bis zwei Glaselementen kann eine passive Athermalisierung erzielt werden [43, 44], allerdings nur, sofern eine homogene Temperaturänderung des gesamten Systems vorliegt. Beim Einsatz von Laserstrahlung würden sich die Kunststoff- und Glaslinsen unterschiedlich stark erwärmen, sodass keine passive Kompensation möglich wäre.

2.3 Simulation thermooptischer Effekte

Voraussetzung für die Auslegung von thermisch stabilen optischen Systemen ist eine präzise Simulation der auftretenden thermooptischen Effekte. Die Berechnung des temperaturabhängigen Brechungsindexprofils sowie thermisch induzierter Oberflächendeformationen erfordert eine multiphysikalische Betrachtung des Systems. Dabei sind thermische und mechanische Randbedingungen wie thermische Lasten durch Absorption von Laserstrahlung, Konvektion und Wärmestrahlung sowie Kühlung und Halterung der Optiken zu berücksichtigen. Ein möglicher Ansatz besteht in der Kopplung von thermomechanischer Finite-Elemente-Analyse (FEA) und Ray-Tracing. Im Folgenden wird ein Überblick über diese Herangehensweise und weitere Ansätze in Wissenschaft und Technik sowie deren jeweilige Vor- und Nachteilen gegeben. Zudem befassen sich

Doyle et al. ausführlich mit optomechanischen und thermooptischen Effekten [45].

2.3.1 Simulation basierend auf der Kopplung von FEA und Strahlenoptik

Kommerzielle Ray-Tracing-Programme wie *Zemax OpticStudio* [46] oder *CODE V* [47] ermöglichen keine multiphysikalische Analyse von optischen Systemen. Lediglich homogene Temperaturänderungen einzelner Optiken oder des gesamten Systems können berücksichtigt werden. *OpticStudio* bietet die Möglichkeit, Höhenprofile für Oberflächen sowie Brechungsindexprofile für Volumenkörper zu importieren. Allerdings müssen die Daten auf äquidistanten Gittern vorliegen. Diese Bedingung erfüllen die Temperatur- und Deformationsdaten einer FEA nur in den seltensten Fällen, da die Netzstrukturen in der Regel nicht uniform sind.

Innerhalb der Finiten Elemente liegen die physikalischen Größen, z. B. die Temperatur, als stetig differenzierbare Funktion vor, deren Form von den verwendeten Basisfunktionen abhängt [48]. An den Grenzen zwischen benachbarten Elementen sind die physikalischen Größen jedoch nur stetig, nicht aber stetig differenzierbar. Darüber hinaus hat der Nutzer einer FE-Software i. d. R. keinen Zugriff auf den Funktionsverlauf innerhalb der Finiten Elemente, sondern nur auf die Funktionswerte an den Knotenpunkten. Letztere können exportiert werden, müssen für das Ray-Tracing jedoch geeignet aufbereitet werden.

Neben verschiedenen Ansätzen in Forschung und Entwicklung gibt es wenige kommerzielle Lösungen, die eine gekoppelte thermooptische Analyse ermöglichen. Dazu zählt die Software *SigFit* der Fa. Sigmadyne [49], die eine Schnittstelle zwischen verschiedenen FE-Programmen und *OpticStudio* sowie *CODE V* bildet. Darüber hinaus bietet die Fa. OpenEngineering für ihre FE-Software *OOFELIE::Multiphysics* [50] eine automatisierte Schnittstelle zu *OpticStudio* an. Strahlen- und wellenoptische Berechnungen innerhalb der FE-Umgebung ermöglicht *COMSOL Multiphysics* mittels entsprechender Module [51].

Temperaturabhängiges Brechungsindexprofil

Die physikalisch exakte Lösung zur Strahlpropagation durch ein Medium mit einem temperaturabhängigen Brechungsindexprofil besteht in der Lösung der differentiellen Strahlgleichung **2.2**. Dafür muss der Brechungsindex als stetig differenzierbare Funktion vorliegen. Folglich müssen die diskreten Temperaturdaten der FEA mit Hilfe numerischer Algorithmen entweder approximiert oder interpoliert und so in eine Funktion für den Brechungsindexverlauf überführt werden.

SigFit ermöglicht (bisher ausschließlich in Verbindung mit *CODE V*) die Approximation des Brechungsindexprofils $n(\vec{r})$ mit Polynomen und die Weitergabe des lokalen Brechungsindex und des Brechungsindexgradienten mittels einer dynamischen Programmbibliothek (engl. *dynamic-*

link library, DLL). Die differentielle Strahlgleichung **2.2** wird numerisch in *CODE V* gelöst. Als Modell für den Brechungsindex stehen das lineare (Formel **2.3**) und das erweiterte Modell gemäß Formel **2.5** zur Auswahl [52]. Die genaue Form der angewendeten Polynome ist unbekannt.

In *OOFELIE::Multiphysics* wird das Brechungsindexprofil durch ein globales quadratisches Polynom approximiert [53, 54]. Dies lässt auf vergleichsweise große Fehler schließen, da das Temperatur- und damit das Brechungsindexprofil i. d. R. eine komplexere Form aufweist (vgl. Abschnitt 3.3.1).

Gatej et al. nutzen für die Approximation der diskreten Temperaturdaten zwei numerische Algorithmen aus dem Bereich der Computergrafik: einen Weighted-Least-Squares-Algorithmus (WLS-Algorithmus) und einen Multilevel-B-Spline-Approximationsalgorithmus (MBA-Algorithmus) [13, 55, 56]. Beim WLS-Algorithmus werden lokale Polynome (i. d. R. vom Grad vier) angepasst und mittels Gewichtungsfunktionen zu einer globalen, stetig differenzierbaren Funktion überlagert (vgl. Bild 4). Eine lokale Verfeinerung der Stützstellen in Abhängigkeit vom lokalen Fehler führt zu einer präzisen Approximation der Temperaturdaten, auch bei komplexen Elementen wie Prismen [13].

Der MBA-Algorithmus nutzt Splines als Basisfunktionen. Die Multilevel-Erweiterung minimiert dabei Oszillationen [13]. Beide Algorithmen können wahlweise in 2D oder 3D angewendet werden, sodass rotations- und nicht rotationssymmetrische Brechungsindexprofile modelliert werden können. Der Brechungsindex wird wahlweise nach dem linearen oder dem erweiterten Modell aus den Temperaturdaten berechnet. Die Daten für das Brechungsindexprofil werden mittels einer benutzerdefinierten DLL an *OpticStudio* übergeben.

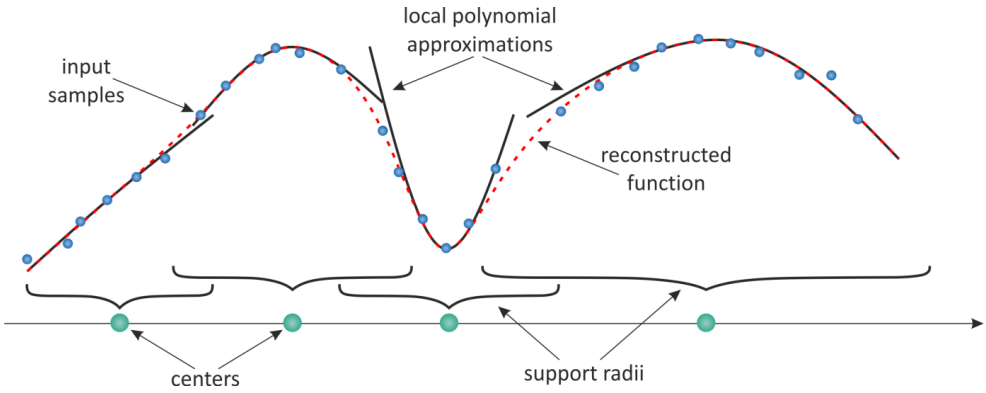


Bild 4: Schematische Darstellung der Funktionsweise des WLS-Algorithmus in 1D. Nachgedruckt mit Genehmigung durch [55], International Society for Optics and Photonics.

Gatej analysiert ausführlich das numerische Verhalten von WLS- und MBA-Algorithmus [13]. Dazu kommen ausschließlich Testdaten, die auf einem äquidistanten Gitter definiert sind, zum Einsatz, jedoch keine Testdaten, die auf einem realen FE-Netz definiert sind. Darüber hinaus wird die optische Leistung lediglich auf Basis der Fokuslage beurteilt und

mit der analytischen Referenz verglichen. Die Wellenfront, die Aufschluss über thermisch induzierte Aberrationen gibt, wird nicht analysiert.

Einen vereinfachten Ansatz zur Modellierung des Einflusses des temperaturabhängigen Brechungsindexprofils verfolgt *SigFit* in Verbindung mit *OpticStudio* [57]. Für jedes optische Element wird der zusätzliche optische Weg

2.16

$$\Delta L = \frac{\mathrm{d}n}{\mathrm{d}T} \cdot \Delta T \cdot l = \Delta n \cdot l$$

aufgrund der Brechungsindexänderung berechnet. Dabei ist l der Strahlweg durch das optische Element und ΔT die mittlere Erwärmung. Für ein vorgegebenes Feld an Strahlen wird ΔL berechnet und mittels Zernike-Polynomen approximiert. Beim Ray-Tracing wird den Strahlen an der Eintrittsfläche des optischen Elements jeweils eine Phase entsprechend der Verlängerung des optischen Wegs aufgeprägt. Ein anderes Feld erfordert eine Neuberechnung. Außerdem treten bei großen Brechungsindexänderungen Abweichungen gegenüber einer exakten Lösung der differentiellen Strahlgleichung auf. Dies ist darin begründet, dass der Strahlverlauf bei großen Brechungsindexgradienten gekrümmt verläuft und folglich vom ursprünglichen Strahlweg, entlang dessen der zusätzliche optische Weg gemäß Formel **2.16** berechnet wird, abweicht.

Oberflächendeformation

Für die Modellierung der Oberflächendeformation stehen in der Software *SigFit* verschiedene Approximationsmethoden zur Verfügung, darunter Zernike-Polynome (vom Typ „Standard“ und „Fringe“) sowie asphärische Polynome [52, 58, 59]. Diese Polynome werden in der Optik häufig zur Beschreibung von Oberflächen eingesetzt und sind folglich in kommerziell verfügbaren Ray-Tracing-Programmen implementiert, sodass lediglich die Koeffizienten ermittelt und übergeben werden müssen. Dabei wird neben der axialen Komponente dz auch die radiale Komponente dr der Oberflächendeformation berücksichtigt. Da die Oberflächenform üblicherweise als Durchbiegung (engl. *sag*) in Richtung der optischen Achse (z-Richtung) definiert wird, erfolgt die Umrechnung gemäß [60, 61]

2.17

$$def(\tilde{r}) = dz + dz_{sag} = dz + [z(r) - z(\tilde{r})],$$

mit $\tilde{r} = r + dr$. Die Form der ursprünglichen sphärischen, asphärischen oder konischen Oberfläche ist durch [62]

2.18

$$z(r) = \frac{cr^2}{1 + [1 - (1 + k)c^2r^2]^{1/2}} + \sum_{i=1}^{8} \alpha_i r^{2i}$$

gegeben. Die Oberflächenkrümmung c entspricht dem inversen Radius $1/R$. k ist die konische Konstante und α_i sind die Koeffizienten des asphärischen Anteils. Die Umrechnung gemäß Formel **2.17** ist schematisch in Bild 5 dargestellt.

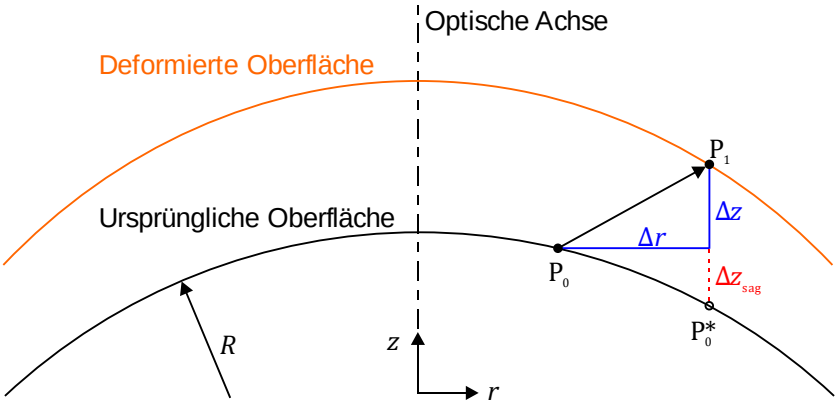


Bild 5: Umrechnung von axialer und radialer Oberflächendeformation in die Durchbiegung der Oberfläche in z-Richtung. Bild erstellt basierend auf [60, 63].

Auch in *OOFELIE::Multiphysics* werden Zernike-Polynome zur Beschreibung der Oberflächendeformation eingesetzt [53, 54, 64]. Details zur Vorgehensweise sind nicht veröffentlicht.

Die Beschreibung von Oberflächendeformationen durch Zernike-Polynome hat folgende Vorteile:

- Hohe Datenkompression: Die FE-Daten werden i. d. R. auf weniger als 100 Koeffizienten komprimiert.
- Zernike-Polynome werden von den meisten Ray-Tracing-Programmen unterstützt. Somit muss kein benutzerdefinierter Oberflächentyp implementiert werden.
- Globale Approximation: Die unterschiedlichen Polynomordnungen können zum Teil Aberrationen zugeordnet werden, z. B. einer Verkippung oder Defokussierung.

Dem stehen jedoch folgende Nachteile gegenüber:

- Hohe Ortsfrequenzen in den FE-Daten erfordern eine hohe radiale und azimutale Ordnung der Zernike-Polynome.
- Zernike-Polynome verlieren ihre Eigenschaft, ein orthogonales Funktionensystem zu bilden, wenn nicht-zirkulare Aperturen vorliegen, z. B. bei rechteckigen Zylinderlinsen, oder die zu approximierenden Daten auf einem nicht-uniformen Gitter definiert sind. FE-Netzstrukturen sind üblicherweise nicht uniform, sodass Erweiterungen wie z. B. das sogenannte *area weighting* erforderlich sind, um Fehler bei der Approximation zu vermeiden [60, 61].

Gatej verwendet zur Beschreibung der thermisch induzierten Oberflächendeformation ein globales asphärisches Polynom [13]. Dies beschränkt die Analyse auf rotationssymmetrische Systeme. Außerdem

wird der radiale Anteil der Oberflächendeformation nicht berücksichtigt. Wie eine Abschätzung in [63] zeigt, ist deren Beitrag jedoch signifikant.

Analyse transienter Effekte

Alle in diesem Abschnitt vorgestellten Ansätze zur Simulation thermooptischer Effekte auf der Basis einer Kopplung von FEA und Strahlenoptik weisen, soweit dies den Veröffentlichungen zu entnehmen ist, folgenden Nachteil auf: Jeder Zeitpunkt einer transienten Analyse erfordert eine separate Datei für das modifizierte Ray-Tracing-Modell in *OpticStudio* bzw. *CODE V*. Dies erschwert den Vergleich der optischen Eigenschaften für verschiedene Zeitpunkte. Außerdem wächst die Anzahl der zu verwaltenden Dateien stark an. Gleiches gilt für die Analyse verschiedener thermischer Lastfälle, beispielsweise eine variierende Laserleistung.

Ray-Tracing in der Finite-Elemente-Umgebung

Den umgekehrten Ansatz, der die optische Analyse in die FEA integriert, verfolgen Schrader et al. [65]. Dabei wird die Strahlpropagation durch die diskretisierten Volumina berechnet. Das Lösen der differentiellen Strahlgleichung **2.2** erfordert die Interpolation des lokalen Brechungsindex und dessen Gradienten. Nachteilig bei diesem Verfahren ist, dass nicht die üblichen Analysetools zur Beurteilung der optischen Eigenschaften sowie keine Optimierungsfunktionen zur Verfügung stehen.

Das kommerzielle *Ray Optics Module* für die FE-Software *COMSOL Multiphysics* [51] basiert ebenfalls auf Ray-Tracing innerhalb der FE-Umgebung. Dabei werden der Einfluss von mechanischen Spannungen sowie Temperaturänderungen auf den Brechungsindex und damit die Strahlengänge berücksichtigt. Thermisch induzierte Deformationen werden ebenfalls einbezogen. Lokale Wärmequellen, die durch die Absorption von Strahlung entstehen, werden auf Basis der Strahlengänge berechnet. Aufgrund dieser engen Kopplung von FEA und Ray-Tracing können selbstkonsistente Modelle von thermischen Linseneffekten erstellt werden [66]. Hierfür stehen grundlegende Analysetools zur Verfügung, jedoch keine Optimierungsfunktionen.

2.3.2 Simulation basierend auf wellenoptischen Methoden

Wellenoptische Methoden ermöglichen die Berechnung der Intensitätsverteilung in der Fokusregion eines optischen Systems, in der die Strahlenoptik keine Gültigkeit besitzt. Zudem kann die zeitliche und räumliche Form ultrakurzer Laserpulse simuliert werden.

Die Software *VirtualLab Fusion* der Fa. LightTrans [67] ermöglicht die Analyse optischer Systeme mittels wellenoptischer Methoden. Gegenüber Ray-Tracing stehen die vektoriellen Daten des komplexen elektrischen Felds zur Verfügung. Die Berücksichtigung von thermooptischen Einflüssen ist in *VirtualLab Fusion* jedoch nur eingeschränkt möglich. Für

optische Oberflächen kann ein Höhenprofil importiert werden. Dieses muss jedoch auf einem äquidistanten Gitter definiert sein, sodass ein direkter Import von nicht-uniformen FE-Daten nicht möglich ist. Darüber hinaus kann ein auf einem äquidistanten Gitter definiertes Brechungsindexprofil importiert und dem Volumen eines optischen Elements zugeordnet werden. Für Medien mit inhomogenem Brechungsindexprofil steht bei Verwendung des *Classic Field Tracing* ausschließlich der Split-Step-Propagationsoperator zur Verfügung. Da dieser Operator Methoden der paraxialen Strahlpropagation nutzt [68], können folglich nur paraxiale Systeme analysiert werden (Details in Abschnitt 3.6.1). Seit Programmversion 7 bietet *VirtualLab Fusion* den sogenannten *2nd-Generation-Field-Tracing*-Operator an. Dieser basiert auf einer Verallgemeinerung von Ray-Tracing, die eine Propagation des komplexen elektrischen Felds ermöglicht [69]. Zur Propagation in die Fokusregion werden wellenoptische Methoden eingesetzt. Bei Verwendung des neuen Operators entfällt für Medien mit inhomogenem Brechungsindexprofil die Beschränkung auf paraxiale Strahlpropagation. Allerdings besteht weiterhin die Einschränkung, dass die zu importierenden Daten auf äquidistanten Gittern definiert sein müssen.

Darüber hinaus existieren unterschiedliche Ansätze zur Kopplung thermomechanischer FEA und wellenoptischer Analyse. Das *Wave Optics Module* für *COMSOL* ermöglicht wellenoptische Berechnungen in der FE-Umgebung [70]. Die Finite-Elemente-Software *JCMsuite* der Fa. JCMwave [71] ermöglicht eine rigorose optische Analyse, allerdings nur auf kleiner Skala, sodass sich der Anwendungsbereich auf die Nanooptik beschränkt.

2.4 Messmittel zur Bestimmung der Fokusverschiebung

Zur experimentellen Charakterisierung von optischen Systemen hinsichtlich thermisch induzierter Fokusverschiebungen sowie zur Validierung thermooptischer Simulationen sind geeignete Messmittel erforderlich. Diese lassen sich in zwei Gruppen unterteilen: Geräte, die die ISO-Norm 11146-1 [72] zur Laserstrahlcharakterisierung erfüllen, bzw. Geräte, die diese Norm nicht erfüllen. Ein weiteres Unterscheidungsmerkmal ist, ob eine transiente Messung der Fokuslage bzw. der Strahlkaustik möglich ist. Im Folgenden werden ausgewählte kommerzielle Messgeräte kurz vorgestellt.

2.4.1 Messmittel nach ISO-Norm 11146

Ein kommerziell verfügbares Strahldiagnosegerät ist der *MicroSpotMonitor* der Fa. Primes, der in einer Version für mittlere Leistungen bis 10 kW bei hoher Brillanz erhältlich ist [73]. Gemäß der ISO-Norm 11146 wird das Strahlprofil in mehreren, in Propagationsrichtung aufeinanderfolgenden Ebenen gemessen. Dazu wird die Intensitätsverteilung der jewei-

ligen Messebene mit einem Objektiv auf eine CCD- bzw. CMOS-Kamera abgebildet. Zwischen Objektiv und Kamera wird der Laserstrahl mittels Reflexionsprismen sowie Filtern abgeschwächt. Da das Objektiv der vollen Laserleistung ausgesetzt ist, sind bei hohen mittleren Leistungen thermische Einflüsse des Messmittels durch eine Erwärmung des Objektivs zu erwarten. Darüber hinaus kann die Strahlkaustik nur im statischen Fall, d. h. im thermischen Gleichgewicht, charakterisiert werden, da eine Messung > 1 min dauert.

Auf einem alternativen Messverfahren basiert der *FocusMonitor* der Fa. Primes [73]. Zur Detektion des Strahlprofils wird der Laserstrahl in der jeweiligen Messebene mit einer Messspitze abgerastert. Die Messspitze koppelt einen Teil des Strahls aus, dessen Leistung mit einer Photodiode oder einem pyroelektrischen Detektor bestimmt wird. Aus den Messpunkten wird das Strahlprofil zusammengesetzt. Auch dieses Messverfahren ist für transiente Analysen ungeeignet. Der Leistungsbereich erstreckt sich von etwa 30 W bis 50 kW.

Ein kommerziell erhältliches Gerät, das eine transiente Messung der Laserstrahlkaustik nach ISO-Norm 11146 ermöglicht, ist das *MS-1780 Laser M2 Measuring System* der Fa. Ophir. Das patentierte Messverfahren [74] bildet das Strahlprofil in zehn Ebenen in Propagationsrichtung auf eine CCD Kamera mittels teilreflektierender optischer Elemente ab. Da die Strahlteilung nicht angepasst werden kann, muss die Rayleighlänge des Laserstrahls im Bereich von 12 mm bis 18 mm liegen, um die Anforderungen der ISO-Norm zu erfüllen, oder aber mittels abbildender optischer Elemente angepasst werden [75]. Dieses Messgerät ist nur für mittlere Leistungen im mW-Bereich geeignet und erfordert andernfalls eine externe Strahlabschwächung.

Aktuell wird kein Messmittel kommerziell angeboten, das eine transiente Charakterisierung der Laserstrahlkaustik im Mulit-Kilowatt-Bereich gemäß der ISO-Norm 11146 ermöglicht.

2.4.2 Weitere Messmittel

Eine Möglichkeit zur transienten Detektion von Fokuslage und -durchmesser bei Laserleistungen im Multi-Kilowatt-Bereich bietet das Messgerät *BeamWatch* der Fa. Ophir [76]. Das Messverfahren beruht auf der Detektion von Rayleigh-Streuung der Laserstrahlung an Gasmolekülen. Senkrecht zur Strahlpropagation befinden sich zwei Sensoren, die das gestreute Licht detektieren. Bei angenommener Strahlpropagation in z-Richtung befinden sind die Sensoren in der x-z- und y-z-Ebene. Deren Messsignal ist proportional zur entlang der y- bzw. x-Richtung integrierten Intensitätsverteilung des Laserstrahls. Dies hat zur Folge, dass ein Astigmatismus des Laserstrahls nicht eindeutig detektiert werden kann, wie im Anhang 8.3 gezeigt wird. Eine Entfaltung des Messsignals setzt Annahmen über das Strahlprofil (z. B. gaußförmig) voraus. Vorteilhaft bei diesem Messverfahren ist, dass der Laserstrahl auf keine opti-

schen Elemente trifft, sondern ausschließlich die gestreute Strahlung. Daher ist die Laserleistung nach oben hin nicht limitiert (100 kW wurden demonstriert [77]) und das Messergebnis wird nicht durch thermische Einflüsse des Messgeräts beeinflusst. In der Version *BeamWatch AM* sind, je nach Fokusdurchmesser des Laserstrahls, Messungen im Leistungsbereich von etwa 30 W bis zu 1 kW möglich.

Das Strahlprofil in einer Ebene kann mit einer Strahlprofilkamera, der eine geeignete Strahlabschwächung vorangestellt ist, gemessen werden [16]. Der Strahlabschwächer *LBS-300* der Fa. Ophir [78] basiert auf Keilplatten und Neutraldichtefiltern. An den optional AR-beschichteten Keilplatten wird jeweils ein geringer Teil der Laserleistung (1 % bis 4 %) reflektiert und in Richtung der Kamera gelenkt. Bei Verwendung von Keilplatten aus Quarzglas ist von einem vernachlässigbaren thermischen Einfluss des Messmittels auszugehen, da das Material einen geringen Volumenabsorptionskoeffizienten aufweist und sich bei Erwärmung kaum ausdehnt (vgl. Tabelle 1). Dieses Verfahren ermöglicht eine transiente Messung des Strahlprofils in einer Ebene, jedoch nicht eine transiente Messung der Strahlkaustik. Der zeitliche Verlauf der Spitzenintensität auf der Kamera kann jedoch Aufschluss über die Zeitkonstante einer transienten Fokusverschiebung geben [16].

Darüber hinaus hat sich der Einsatz von Wellenfrontsensoren, beispielsweise nach dem Prinzip von Hartmann-Shack, zur Bestimmung der thermisch induzierten Fokusverschiebung sowie von Aberrationen etabliert [79–81]. Die Messung der Wellenfront erfolgt transient in einer festen Ebene. I. d. R. wird die Wellenfront durch Zernike-Polynome approximiert. Aus dem Defokusterm kann die Distanz zum Fokus und folglich die transiente Fokusverschiebung bestimmt werden. Der Einsatz eines Wellenfrontsensors erfordert wie die Verwendung einer Strahlprofilkamera eine geeignete Strahlabschwächung.

Alle bis hier vorgestellten Messgeräte setzen einen unbewegten Laserstrahl voraus. Folglich ist eine Messung der transienten winkelabhängigen Fokusverschiebung in Scanner-basierten Laserbearbeitungsanlagen nicht möglich. Ein neuartiges Messverfahren speziell für SLM-Anlagen ermöglicht die transiente Messung der Scanvektoren (Start- und Endpunkt sowie Scangeschwindigkeit) sowie des Fokusdurchmessers in der Bearbeitungsebene [82, 83]. Das Verfahren basiert auf der Streuung von Laserstrahlung in einer im Volumen strukturierten Glasplatte. Das gestreute Licht wird durch Photodioden detektiert. Bisher ist dieses Messgerät nicht kommerziell verfügbar.

2.5 Bestimmung des Absorptionsgrads

Voraussetzung für eine präzise Simulation der thermooptischen Effekte ist die Kenntnis des Absorptionsgrads der optischen Komponenten. Da-

bei müssen sowohl der Volumenabsorptionskoeffizient für die verschiedenen Materialien als auch der Absorptionsgrad von optischen Vergütungen, wie z. B. Antireflexbeschichtungen (kurz AR-Beschichtung), bekannt sein. Neben der Angabe des Volumenabsorptionskoeffizienten hat sich in der Optik die Angabe des internen Transmissionsgrads T_{int} etabliert. Der interne Transmissionsgrad ist die Summe aus dem gesamten Transmissionsgrad T einer Probe und den Reflexionsverlusten R durch Fresnelreflexion an den Oberflächen. Somit gilt

2.19

$$T_{int}(\lambda) = T(\lambda) + R(\lambda).$$

Auf Basis der Gesetzmäßigkeit nach Lambert-Beer kann bei gegebener Materialdicke d der interne Transmissionsgrad in den Volumenabsorptionskoeffizienten mittels

2.20

$$\alpha_{abs}(\lambda) = -\frac{\ln[T_{int}(\lambda)]}{d} = -\frac{\ln[T(\lambda) + R(\lambda)]}{d}$$

umgerechnet werden. Im Folgenden werden die geläufigsten Messverfahren mit ihren Vor- und Nachteilen vorgestellt.

2.5.1 Spektrale Photometrie

Spektrale Photometrie ermöglicht eine spektral aufgelöste Messung des Transmissionsgrads [15, 84]. Das Gerät *Lambda1050* der Fa. PerkinElmer, welches am Fraunhofer ILT für Messungen zur Verfügung steht, erzielt mittels zwei Monochromatoren auf der Basis von Reflexionsgittern eine spektrale Auflösung von etwa 1 nm. Der monochrome Lichtstrahl wird in einen Messstrahl, in den die Probe platziert wird, und einen Referenzstrahl aufgeteilt. Mit einer Ulbrichtkugel wird das transmittierte Licht integriert und auf die Detektoren gelenkt. Durch Vergleich der Leistungen in Mess- und Referenzstrahl wird der Transmissionsgrad der Probe ermittelt. Der Messbereich erstreckt sich von 200 nm bis 2,5 µm Wellenlänge. Darüber hinaus kann der Reflexionsgrad einer Probe relativ zu einem Reflexionsnormal, z. B. Spektralon oder einem Referenzspiegel, bestimmt werden. Beide Messanordnungen sind schematisch in Bild 6 dargestellt. Auf Basis der Messung von Transmissions- und Reflexionsgrad folgt der Volumenabsorptionskoeffizient der Probe gemäß Gleichung **2.20**.

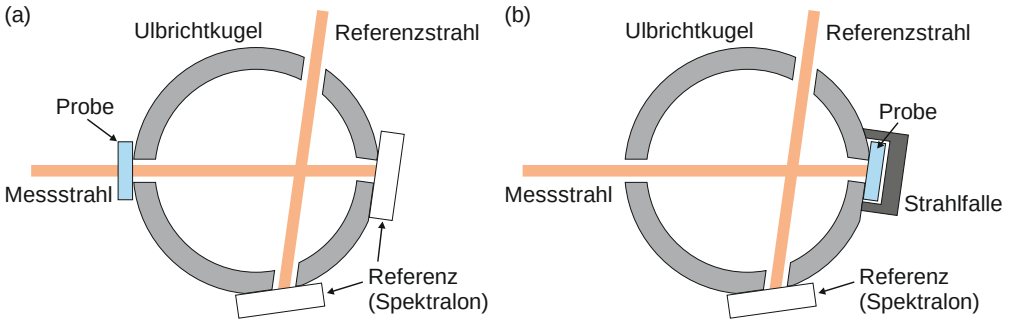


Bild 6: Schema zur spektralen Photometrie mittels Ulbrichtkugel. Messanordnung zur Bestimmung des Transmissionsgrads (a) sowie des Reflexionsgrads (b).

Die Messung des Reflexionsgrads erfordert die genaue Kenntnis des Reflexionsgrads der Referenz. Um mögliche systematische Messfehler durch die Referenz auszuschließen, kann bei genauer Kenntnis des wellenlängenabhängigen Brechungsindex der interne Transmissionsgrad aus dem gemessenen Transmissionsgrad berechnet werden. Unter Berücksichtigung von Vielfachreflexionen an einer planparallelen Platte gilt bei senkrechtem Einfall [15]

2.21

$$T_{int}(\lambda) = T(\lambda)\frac{n^2(\lambda)+1}{2n(\lambda)}.$$

Dem Vorteil einer spektral aufgelösten Bestimmung des Absorptionsgrads steht eine geringe Messgenauigkeit von etwa ±0,2% gegenüber. Für angenommene Werte von T = 0,92, d = 10 mm und n = 1,45 folgt ein Messfehler für den Volumenabsorptionskoeffizienten von 0,2 %/cm. Somit ist dieses Messverfahren für die Charakterisierung von gering absorbierenden Materialien ungeeignet. Darüber hinaus kann der Absorptionsgrad nicht ortsaufgelöst gemessen werden. Folglich kann nicht zwischen Absorption von Strahlung in optischen Vergütungen und im Volumen unterschieden werden.

2.5.2 Photothermale Messverfahren

Bei photothermalen Messverfahren wird der Absorptionsgrad eines optischen Materials indirekt über die Änderung der optischen Eigenschaften bei Bestrahlung mit einem Pumplaserstrahl ermittelt. Im Folgenden werden zwei experimentelle Realisierungen vorgestellt.

Photothermale Absorptionsmessung über laserinduzierte Wellenfrontdeformation

Schäfer, Stubenvoll et al. [30, 85, 86] induzieren mit einem kollimierten Pumplaserstrahl einer definierten Wellenlänge thermooptische Effekte in einer Glasprobe. Diese wird unter einem Winkel von 90° mit einem Probelaserstrahl gekreuzt, wie die schematische Darstellung in Bild 7 zeigt. Das induzierte Temperaturprofil in der Probe verursacht eine Brechungsindexänderung, Oberflächendeformationen sowie spannungsinduzierte Effekte, die in ihrer Summe eine Deformation der Wellenfront hervorrufen.

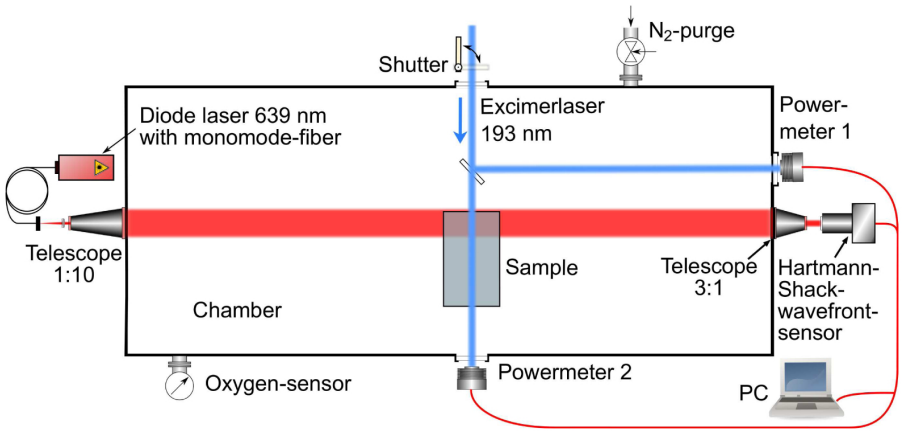


Bild 7: Schematische Darstellung des Messaufbaus zur Absorptionsmessung über die laserinduzierte Wellenfrontdeformation. Nachgedruckt mit Genehmigung durch [86], Optics Express.

Mittels Simulationen werden die zu erwartenden Formen der Wellenfrontdeformationen bei Absorption von Laserstrahlung ausschließlich an den Oberflächen sowie ausschließlich im Volumen berechnet. Diese beiden Ergebnisse werden überlagert und mittels Skalierung an die Messdaten angepasst. Auf diese Weise lassen sich der absolute Absorptionsgrad der Oberflächen sowie der Volumenabsorptionskoeffizient ermitteln [30]. Im Idealfall ist der relative Messfehler < 1 %. Falls sich die Anteile absorbierter Laserenergie sehr ungleich auf die Oberflächen und das Volumen aufteilen, kann der relative Messfehler der geringeren Absorption auf 50 % anwachsen [30]. Voraussetzung für dieses Messverfahren ist ein spezieller Wellenfrontsensor mit einer Auflösung von $\lambda/10000$. Kommerzielle Sensoren weisen jedoch nur eine Auflösung von etwa $\lambda/200$ auf. Außerdem müssen vier Flächen der quaderförmigen Probe optisch poliert sein. Darüber hinaus erfordert die Simulation der Wellenfrontdeformation die Kenntnis diverser Materialdaten, u. a. der elasto-optischen Koeffizienten, die nicht für alle Materialen in der Literatur zu finden sind.

Photothermale Common-Path-Interferometrie

Die Photothermale Common-Path-Interferometrie (PCI) ermöglicht eine ortsaufgelöste Messung des Absorptionsgrads mit hoher Genauigkeit [87]. Dabei kann zwischen der Absorption im Volumen und an der Oberfläche einer Probe unterschieden werden. Die Empfindlichkeit eines am Fraunhofer ILT vorhandenen Interferometers beträgt etwa 1 ppm/cm im Volumen und 0,1 ppm an der Oberfläche[1] [88]. Die konkreten Werte hängen vom Probenmaterial ab. Üblicherweise wird das Verfahren zur Charakterisierung von Laserkristallen eingesetzt [89]. Der Messaufbau ist schematisch in Bild 8 dargestellt. Die Probe wird periodisch mit einem fokussierten Laserstrahl mit 1030 nm oder 515 nm Wellenlänge bestrahlt. Die punktuelle Erwärmung der Probe ruft eine periodische Störung der Wellenfront des Probelaserstrahls hervor, die auf folgende thermooptische Effekte zurückzuführen ist: eine Brechungsindexänderung mit der Temperatur, eine thermische Ausdehnung des Materials

[1] Der Volumenabsorptionskoeffizient gering absorbierender Materialien wie z. B. Quarzglas sowie der Absorptionsgrad optischer Vergütungen wird üblicherweise in der Einheit ppm/cm bzw. ppm angegeben, wobei 1 ppm = $1 \cdot 10^{-6}$ ist.

sowie photoelastische Effekte [87]. Die Störung der Wellenfront führt zur Selbstinterferenz des Probestrahls. Die resultierende periodische Intensitätsänderung des Probestrahls wird mit einer Photodiode detektiert und mit einem Lock-in-Verstärker verstärkt. Auf Basis eines Modells wird das Messsignal in eine Absorption umgerechnet. Diese Umrechnung erfordert die genaue Kenntnis diverser Materialparameter sowie ein Kalibrationsnormal. Andernfalls sind nur relative Messungen möglich.

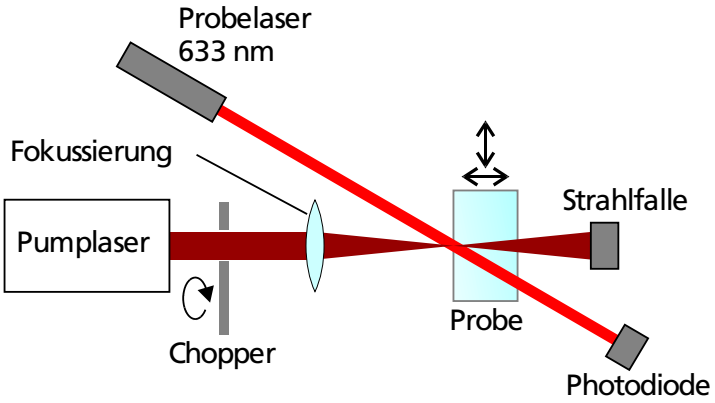


Bild 8: Schematische Darstellung des Aufbaus eines photothermalen Common-Path-Interferometers.

Eine Verschiebung der Probe in lateraler Richtung ermöglicht eine zweidimensionale Messung an der Oberfläche oder im Volumen. Dies setzt jedoch aufgrund des gekreuzten Strahlengangs von Pump- und Probestrahl planparallele Oberflächen voraus. Insbesondere können Linsen nicht vermessen werden. Die hohe Empfindlichkeit sowie die Ortsauflösung machen das Messverfahren für die Charakterisierung von Quarzgläsern sowie optischen Vergütungen interessant. Gegenüber spektraler Photometrie kann der Absorptionsgrad bzw. der Volumenabsorptionskoeffizient nicht spektral aufgelöst, sondern nur bei den zur Verfügung stehenden Pumplaserwellenlängen bestimmt werden.

2.5.3 Kalorimetrie

Kalorimetrie stellt ein weiteres etabliertes Verfahren zur Bestimmung des Absorptionsgrads von optischen Elementen dar [90, 91]. Eine zylinderförmige Probe wird axial mit einem Pumplaserstrahl bestrahlt. Der resultierende transiente Temperaturverlauf an der Oberfläche wird während des Aufwärm- und Abkühlvorgangs beispielsweise mit einem Platinmesswiderstand aufgezeichnet. Durch Anpassung eines Temperaturmodells an die Messdaten wird der Absorptionsgrad der Probe bestimmt. Das genaue Vorgehen ist in der ISO-Norm 11551 [92] beschrieben. Nachteil der kalorimetrischen Messungen ist, dass nicht zwischen Absorption im Volumen und an Oberflächen unterschieden werden kann. Daher ist ggf. eine kalorimetrische Messung vor und nach der Beschichtung erforderlich.

2.6 Ultrakurze Laserpulse

Bei der Verwendung ultrakurzer Laserpulse treten aufgrund der erhöhten Bandbreite bei der Propagation durch refraktive Optiken dispersive Effekte auf. Das Zeit-Bandbreite-Produkt für einen gaußförmigen Puls beträgt [93]

2.22
$$\tau \cdot \Delta\nu = \frac{2\ln 2}{\pi} \approx 0{,}411.$$

Dabei sind τ die Pulsdauer und $\Delta\nu$ die spektrale Breite im Frequenzraum (jeweils die Halbwertsbreite). Die spektrale Breite im Wellenlängenraum folgt zu

2.23
$$\Delta\lambda = \frac{2\ln 2}{\pi}\frac{\lambda_0^2}{c_0}\frac{1}{\tau},$$

wobei λ_0 die Zentralwellenlänge und c_0 die Vakuumlichtgeschwindigkeit ist. $\Delta\lambda$ ist ebenfalls als Halbwertsbreite definiert. Für einen bandbreitebegrenzten gaußförmigen Puls mit 100 fs Pulsdauer und 1030 nm Zentralwellenlänge beträgt die spektrale Breite 15,6 nm.

2.6.1 Yb:YAG-basierte Lasersysteme

Ultrakurzpuls-Lasersysteme basieren häufig auf Yb:YAG (Ytterbium dotiertes Yttrium-Aluminium-Granat) als Lasermedium. Mit diesen Systemen können mittlere Ausgangsleistungen von mehreren 100 W erzielt werden [94]. Aufgrund der geringen Verstärkungsbandbreite von Ytterbium, die ca. 5 nm beträgt [94], ist die minimal erreichbare Pulsdauer auf etwa 300 fs limitiert. Um kürzere Pulsdauern, beispielsweise zur Erzeugung hoher Harmonischer zu erzielen, kann das Prinzip der nichtlinearen Pulskompression angewendet werden. Hierzu werden die Pulse zunächst spektral verbreitert und anschließend komprimiert. Zur Verbreitung des Spektrums wird häufig der Effekt der nichtlinearen spektralen Verbreiterung durch Selbstphasenmodulation aufgrund des Kerr-Effekts genutzt [95]. Die hierbei auftretende zeitliche Modulation der Frequenz wird als Chirp bezeichnet. Durch eine Selbstphasenmodulation von $\tilde{\phi}_{NL} = 4\pi$ kann die spektrale Breite eines bandbreitebegrenzten gaußförmigen Pulses mit 800 fs Pulsdauer von 2,0 nm auf 24,7 nm vergrößert werden (vgl. Bild 9 a). Die Berechnung des verbreiterten Spektrums kann im Anhang 8.4 nachvollzogen werden. Nach der Komprimierung des gechirpten Pulses, entweder mit Hilfe von gechirpten Spiegeln oder einem Gitter- bzw. Prismenkompressor, resultiert im Idealfall eine Pulsdauer von 92,5 fs. Gegenüber einem gaußförmigen Puls treten Nebenmaxima auf (vgl. Bild 9 b).

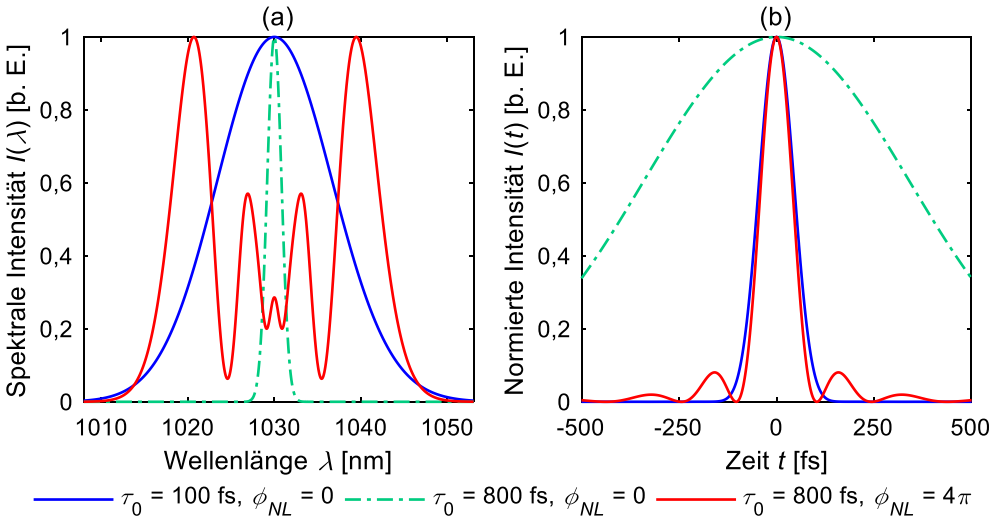


Bild 9: Spektrale Intensität (a) eines bandbreitebegrenzten gaußförmigen Pulses mit 100 fs bzw. 800 fs Pulsdauer. Für den 800-fs-langen Puls außerdem das verbreiterte Spektrum durch eine nichtlineare Phase von 4π. Der zeitliche Verlauf der Pulse ist in (b) dargestellt.

In der Praxis konnten Weitenberg et al. durch nichtlineare Pulskompression (Aufprägen einer nichtlinearen Phase von ca. 4π in einer Multipass-Zelle und anschließende Komprimierung mit gechirpten Spiegeln) Pulse mit einer Pulsdauer von 860 fs auf 115 fs bei 300 W mittlerer Leistung sowie Pulsenergien von 7,5 µJ komprimieren [95].

2.6.2 Dispersive Effekte

Die spektralen Anteile eines ultrakurzen Pulses sammeln bei der Propagation durch ein dispersives Medium die spektrale Phase [96]

2.24

$$\phi(\omega) = k(\omega) \cdot l = \frac{\omega}{c_0} n(\omega) \cdot l$$

auf, die gleich dem Produkt von Kreiswellenzahl k und Propagationslänge l ist. ω bezeichnet die Kreisfrequenz, n den Brechungsindex und c_0 die Vakuumlichtgeschwindigkeit. Zur Klassifizierung der auftretenden Effekte eignet sich die Entwicklung der spektralen Phase um die Trägerfrequenz des Pulses ω_0 [96]

2.25

$$\begin{aligned}\phi(\omega) &= \phi(\omega_0) + \left.\frac{\partial\phi}{\partial\omega}\right|_{\omega_0} (\omega - \omega_0) + \left.\frac{1}{2}\frac{\partial^2\phi}{\partial\omega^2}\right|_{\omega_0} (\omega - \omega_0)^2 + \ldots \\ &= \phi^{(0)} + \phi^{(1)}\tilde{\omega} + \frac{1}{2}\phi^{(2)}\tilde{\omega}^2 + \ldots\,, \qquad \tilde{\omega} = \omega - \omega_0\,.\end{aligned}$$

Hierbei sind $\phi^{(i)}$ die Koeffizienten der Taylor-Entwicklung, deren Bedeutung in Tabelle 2 aufgeführt ist.

Tabelle 2: Terme der Taylor-Entwicklung der spektralen Phase um die Trägerfrequenz [96].

Entwicklung	Formelzeichen	Abkürzung	Bezeichnung
$\phi(\omega_0)$	$\phi^{(0)}$		Phase für Trägerfrequenz
$\left.\frac{\partial\phi}{\partial\omega}\right\|_{\omega_0}$	$\phi^{(1)}$	GD	Gruppenlaufzeit (engl. *group delay*)
$\left.\frac{\partial^2\phi}{\partial\omega^2}\right\|_{\omega_0}$	$\phi^{(2)}$	GDD	Gruppenlaufzeit-Dispersion (engl. *group delay dispersion*)
$\left.\frac{\partial^3\phi}{\partial\omega^3}\right\|_{\omega_0}$	$\phi^{(3)}$	TOD	Dispersion dritter Ordnung (engl. *third order dispersion*)

$\phi^{(0)}$ gibt die Phase an, die die Trägerfrequenz bei der Propagation aufsammelt. Die Trägerfrequenz und somit die Phasenfront propagieren im Medium mit der Phasengeschwindigkeit

2.26
$$v_P = \frac{\omega_0}{\phi^{(0)}} l = \frac{\omega_0}{k(\omega_0)} = \frac{c_0}{n_0}.$$

Dispersion erster Ordnung tritt auf, wenn der lineare Phasenterm $\phi^{(1)} \neq 0$ ist. Der Schwerpunkt der Puls-Einhüllenden, der der Pulsfront entspricht, propagiert mit der Gruppengeschwindigkeit [97]

2.27
$$v_G = \frac{l}{\phi^{(1)}} = \frac{1}{\frac{\mathrm{d}k}{\mathrm{d}\omega}} = \frac{c_0}{n_0 + \omega_0 \frac{\mathrm{d}n}{\mathrm{d}\omega}} = \frac{c_0}{n_0 - \lambda_0 \frac{\mathrm{d}n}{\mathrm{d}\lambda}}.$$

In Medien mit normaler Dispersion, d. h. $\mathrm{d}n/\mathrm{d}\lambda < 0$, ist die Gruppengeschwindigkeit kleiner als die Phasengeschwindigkeit. Somit tritt eine Propagationszeitdifferenz (engl. *propagation time difference*, PTD) zwischen der Phasen- und der Pulsfront auf. Im Allgemeinen variiert die PTD über den Strahlquerschnitt und verursacht eine Deformation der Pulsfront [98].

Dispersion zweiter Ordnung tritt auf, wenn der quadratische Phasenterm $\phi^{(2)} \neq 0$ ist. In diesem Fall variieren die Laufzeiten für niedrige und hohe Frequenzen innerhalb des Spektrums. Dieser Effekt wird als Gruppenlaufzeit-Dispersion (engl. *group delay dispersion*, GDD) bezeichnet. In der Literatur findet sich außerdem der Begriff Gruppengeschwindigkeitsdispersion (engl. *group velocity dispersion*, GVD), die der GDD bezogen auf die Propagationslänge l im Medium entspricht. Für einen bandbreitebegrenzten Puls mit Pulsdauer τ_0 und gaußförmiger Pulsform beträgt die Pulsdauer hinter einem dispersiven Medium [96]

2.28
$$\tau = \tau_0 \sqrt{1 + \left(4\ln(2)\frac{\phi^{(2)}}{\tau_0^2}\right)^2}.$$

Da $\phi^{(2)}$ quadratisch in Formel **2.28** eingeht, führt GDD bei einem anfänglich bandbreitebegrenzten Puls grundsätzlich zu einer Verlängerung der Pulsdauer.

Mittels strahlenoptischer Methoden können die GD bzw. PTD sowie die GDD über den Strahlquerschnitt berechnet werden [99, 100]. Dispersion dritter und höherer Ordnung spielt bei Pulsdauern > 10 fs keine signifikante Rolle, da $\phi^{(3)}$ für optische Gläser typischerweise 30 fs³/mm beträgt [96].

2.6.3 Erzeugung hoher Harmonischer

Zur Erzeugung zeitlich und räumlich kohärenter extrem ultravioletter (EUV) Strahlung existieren unterschiedliche Ansätze. Neben Großanlagen wie Freie-Elektronen-Laser haben sich kompakte Laboraufbauten zur Frequenzkonversion in den EUV-Bereich etabliert, die auf der Erzeugung hoher Harmonischer (engl. *high harmonic generation*, HHG) beruhen [9, 10]. Der HHG-Prozess nutzt die Wechselwirkung ultrakurzer Laserpulse (Pulsdauer etwa 30 fs bis 120 fs) mit Edelgasen. Durch Multiphotonenabsorption werden Elektronen durch Tunnelionisation aus der Elektronenhülle entfernt und beschleunigt. Ein kleiner Anteil der ionisierten Elektronen relaxiert unter Aussendung eines hochenergetischen Photons in einen Grundniveauzustand im Atom [11]. Sofern die Phase des treibenden Laserfelds und der ausgesendeten Photonen angepasst werden [101], entsteht räumlich und zeitlich kohärente EUV-Strahlung im Wellenlängenbereich von 30 nm bis 100 nm. Da der Prozess hoch nichtlinear ist, sind Intensitäten im Bereich von 10^{13} W/cm² bis 10^{15} W/cm² erforderlich [10]. Kohärente EUV-Strahlung besitzt zahlreiche wissenschaftliche Anwendungen, u. a. die zeitaufgelöste Photoelektronen-Spektroskopie [102] oder die EUV-Frequenzkamm-Spektroskopie [103].

Beim HHG-Prozess wird zwischen der Resonator-unterstützten Erzeugung [104] und der Single-Pass-Erzeugung hoher Harmonischer unterschieden. Beim zweiten Ansatz werden die ultrakurzen Pulse mit einem Lasersystem (Scheiben-, Faser- oder Innoslab-Laser) erzeugt, ggf. Resonator-extern zeitlich komprimiert und mit optischen Elementen in das Edelgas fokussiert [10]. In Bild 10 ist eine Realisierung zur Single-Pass-Erzeugung von Hädrich et al. schematisch dargestellt. Mit einer Optik werden die Pulse in den Gasjet (z. B. Xenon oder Krypton) in der Vakuumkammer fokussiert. Zur räumlichen Trennung der hohen Harmonischen von der infraroten Laserstrahlung werden zwei SiO_2-Substrate (eins davon ist für 1030 nm AR-beschichtet) verwendet. Hinter zwei Aluminium-Filtern wird die EUV-Strahlung mit einer Photodiode (PD) bzw. einem Spektrometer charakterisiert.

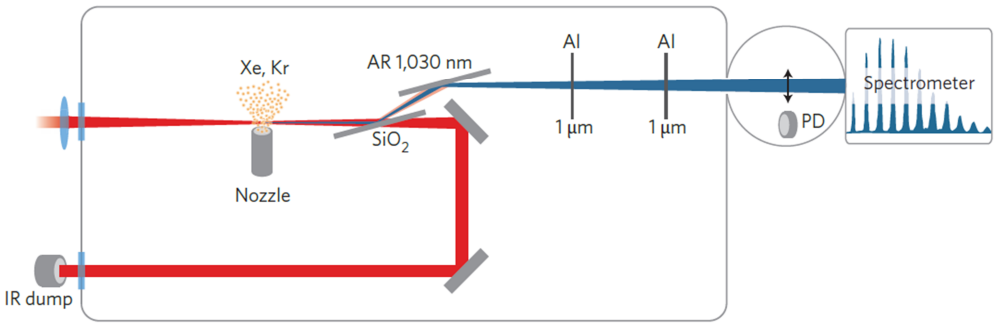


Bild 10: Schematischer Aufbau zur Single-Pass-Erzeugung hoher Harmonischer. Nachgedruckt mit Genehmigung durch [9], Springer Nature.

Da für viele Anwendungen Repetitionsraten > 10 MHz erforderlich sind [102], bedarf es hoher mittlerer Leistungen > 200 W und kleiner Fokusradien < 10 µm, um die notwendigen Intensitäten[2] zu erzielen.

In Tabelle 3 sind die Vor- und Nachteile von sphärischen Spiegeln, Parabolspiegeln und Objektiven zur Fokussierung ultrakurzer Laserpulse hoher mittlerer Leistung einander gegenübergestellt.

Tabelle 3: Vor- und Nachteile unterschiedlicher Methoden zur Fokussierung ultrakurzer Laserpulse hoher mittlerer Leistung.

Methode zur Fokussierung	Vorteile	Nachteile
Sphärische Spiegel	• Keine chromatische Aberration • Geringe thermische Effekte	• Starker Astigmatismus, insbesondere bei kleinen Foki
Off-Axis Parabolspiegel	• Keine chromatische Aberration • Geringe thermische Effekte	• Aufwendig in Fertigung und Justage
Objektiv (Doublet)	• Einfache Kompensation sphärischer Aberration • Achromatisierung durch geeignete Materialwahl	• Eingeschränkte Materialauswahl bei hoher Leistung • Größere thermische Effekte

Die Verwendung von Objektiven zur Fokussierung ultrakurzer Laserpulse stellt neue Herausforderungen an das Optikdesign. Insbesondere die Materialauswahl zur Achromatisierung ist bei hohen Laserleistungen stark eingeschränkt. Darüber hinaus ist der Einfluss thermooptischer Effekte auf die Intensitätsverteilung im Fokus zu berücksichtigen, um die erforderlichen Intensitäten für den HHG-Prozess erzielen zu können.

[2] Bei einer angenommenen mittleren Leistung von 200 W, einer Repetitionsrate von 10 MHz und einer Pulsdauer von 100 fs ist ein Fokusradius von 9,4 µm erforderlich, um eine Pulsspitzenintensität von 10^{14} W/cm² auf der Strahlachse bei einer Strahlqualitätskennzahl von M^2 = 1,2 zu erzielen.

2.7 Defizite im Stand von Wissenschaft und Technik

Der Stand von Wissenschaft und Technik weist im Bereich der Simulation thermooptischer Effekte folgende Defizite auf:

- Die Verwendung von Zernike-Polynomen zur Beschreibung thermisch induzierter Oberflächendeformationen birgt Einschränkungen bei der Approximation nicht-äquidistanter FE-Daten sowie bei nicht-zirkularen Aperturen.
- Bei der Kopplung von FEA und Ray-Tracing ist der Einfluss von Auflösung und Struktur des FE-Netzes auf die thermooptische Analyse unbekannt.
- Die gleichzeitige Analyse thermischer und dispersiver Effekte in optischen Systemen und insbesondere deren Einfluss auf die räumliche und zeitliche Form ultrakurzer Laserpulse gehören nicht zum Stand von Wissenschaft und Technik.
- Eine Analyse transienter Effekte sowie unterschiedlicher Lastfälle erfordert für jeden Zeitschritt bzw. jeden Lastfall eine separate modifizierte Datei im Ray-Tracing-Modell. Bei vielen Zeitschritten ist dieser Ansatz ineffizient und erschwert den Vergleich der optischen Eigenschaften.

Das Potential von Kunststoffen für Laseroptiken kann aufgrund folgender Aspekte bisher nicht erschlossen werden:

- Thermooptische Effekte in Kunststofflinsen, die durch eine inhomogene Erwärmung durch Absorption von Laserstrahlung hervorgerufen werden, können nicht durch eine geeignete Materialkombination kompensiert werden.
- Für Kunststoffe sind der thermooptische Koeffizient sowie der Absorptionskoeffizient bei typischen Laserwellenlängen im IR-Bereich häufig unbekannt, sodass die auftretenden thermooptischen Effekte nicht simuliert und somit nicht bei der Auslegung berücksichtigt werden können.

Darüber hinaus existieren derzeit keine kommerziellen Messmittel, um bei hochdynamischen Scanner-basierten Laserbearbeitungsprozessen wie dem SLM die thermisch induzierte Fokusverschiebung transient messen zu können.

Auf Basis dieser Defizite werden im Bereich der Simulation thermooptischer Effekte folgende Forschungsgegenstände und Arbeitsschritte abgeleitet:

- Approximation diskreter FE-Daten für die Oberflächendeformation mittels numerischer Algorithmen sowie deren Verifikation; — Abschnitte 3.2 bis 3.4

- Systematische Analyse des Einflusses der FE-Netzstruktur auf die Kopplung von FEA und Ray-Tracing; Abschnitt 3.5
- Multiphysikalische Simulationsmethoden zur gleichzeitigen Berücksichtigung thermischer und dispersiver Effekte; Abschnitt 3.6
- Erweiterung der Schnittstellensoftware, um transiente Effekte sowie unterschiedliche thermische Lastfälle effizient analysieren zu können. Abschnitt 3.7

Auf Basis der erarbeiteten Simulationsmethoden werden exemplarisch folgende praxisrelevante Anwendungsfälle betrachtet:

- Analyse thermooptischer Effekte beim SLM, insbesondere der transienten Fokusverschiebung in Abhängigkeit von der Belichtungsreihenfolge und Scanstrategie; Abschnitt 5.1
- Simulation und experimentelle Analyse thermooptischer Effekte in Kunststoffoptiken sowie Klärung der Frage, ob thermisch induzierte Aberrationen durch eine angepasste Linsenform kompensiert werden können; Abschnitt 5.2
- Multiphysikalische Analyse von Optiken zur Fokussierung ultrakurzer Laserpulse bei hoher mittlerer Leistung zur Erzeugung hoher Harmonischer. Abschnitt 5.3

3 Methoden zur thermooptischen Simulation

Die thermooptischen Simulationen für die vorliegende Arbeit beruhen auf der Kopplung von Finite-Elemente-Analyse (FEA) und optischer Analyse. Die Vorgehensweise zur Durchführung dieser Simulationen ist in Bild 11 dargestellt. Zunächst wird mittels einer FEA eine thermomechanische Analyse des zu untersuchenden optischen (Start-)Systems durchgeführt. Unter Berücksichtigung thermischer Lasten sowie thermischer und mechanischer Randbedingungen (vgl. Abschnitt 3.1) folgen die Temperaturverteilung in den optischen Elementen sowie die thermisch induzierten Oberflächendeformationen. Wie bereits in Abschnitt 2.3.1 dargelegt, müssen die diskreten Daten aus der FEA in stetig differenzierbare Funktionen für den Brechungsindexverlauf $n(\vec{r})$ und die Oberflächendeformation $def(x,y)$ überführt werden. Hierfür wird die von Gatej et al. [56] entwickelte Schnittstellensoftware *TOP Simulation* verwendet. Die Software wird, wie in Abschnitt 3.2 beschrieben, erweitert, um neben dem Brechungsindexverlauf Oberflächendeformationen präzise berücksichtigen zu können.

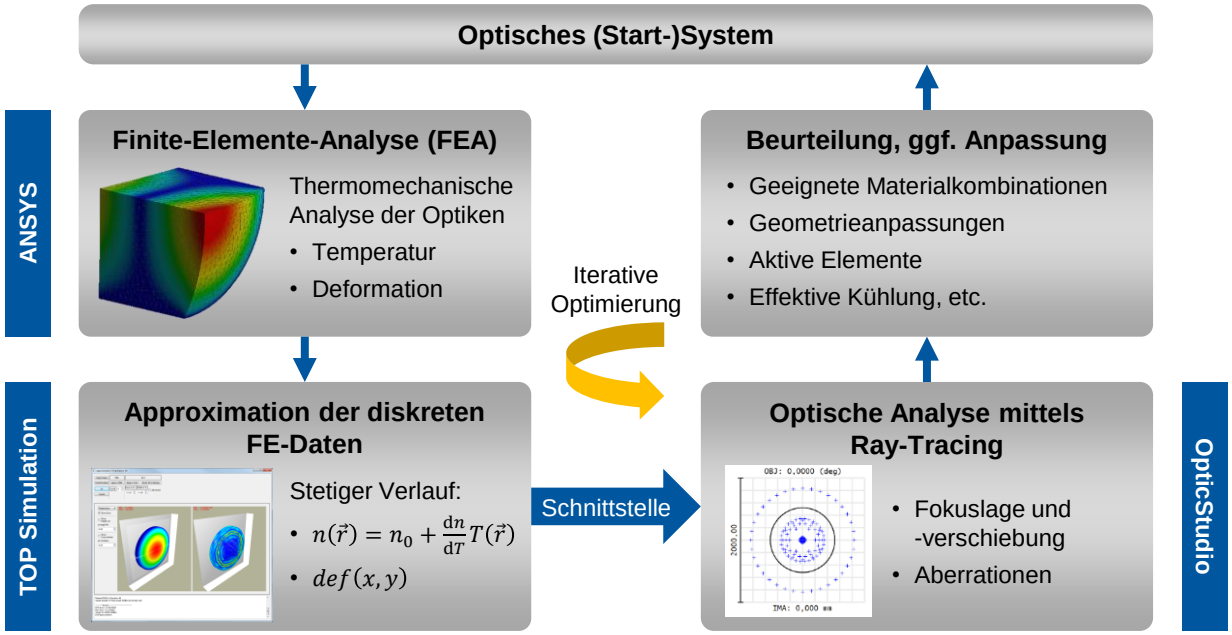


Bild 11: Vorgehensweise zur gekoppelten thermooptischen Simulation. In den blauen Rechtecken wird die verwendete Software genannt. Zur Optimierung eines optischen Systems wird die Analyse iterativ wiederholt. Bild erstellt basierend auf [105].

Zudem wird die Kopplung von *TOP Simulation* und der Ray-Tracing-Software *Zemax OpticStudio* [46] funktionell erweitert und teilweise automatisiert, um verschiedene thermische Lastfälle sowie das transiente Verhalten effizient analysieren zu können (vgl. Abschnitt 3.7). Das thermisch belastete optische System wird analysiert und beurteilt, insbesondere hinsichtlich der Fokusverschiebung und thermisch induzierter Aber-

rationen. Auf dieser Basis wird das System ggf. angepasst, wobei die in Abschnitt 2.2 beschriebenen Methoden und Ansätze zur Kompensation thermooptischer Effekte angewendet werden. Die Analyse und Optimierung wird solange iterativ wiederholt, bis die Zielvorgaben an das optische System erfüllt werden.

Die Algorithmen zur Approximation der Oberflächendeformation werden anhand eines analytischen Referenzmodells verifiziert (vgl. Abschnitt 3.3 und 3.4). Zur tiefergehenden Analyse des Simulationsansatzes wird der Einfluss der verwendeten FE-Netzstruktur auf die thermooptische Analyse systematisch untersucht (vgl. Abschnitt 3.5).

Um gleichzeitig den Einfluss thermischer und dispersiver Effekte auf die räumliche und zeitliche Form ultrakurzer Laserpulse analysieren zu können, wird die Kopplung von FEA und optischer Analyse um wellenoptische Methoden erweitert. Dazu wird die Simulationsumgebung *VirtualLab Fusion* [67] genutzt (vgl. Abschnitt 3.6, insb. Bild 26). Auf diese Weise kann die Intensitätsverteilung ultrakurzer Pulse in Abhängigkeit von den thermooptischen Effekten orts- und zeitaufgelöst berechnet werden.

3.1 Definition thermischer Lasten und Randbedingungen

Ein wichtiger Schritt bei der Durchführung einer thermomechanischen FEA ist die Definition der thermischen Lasten, die durch die Absorption von Laserstrahlung im Volumenmaterial sowie in optischen Vergütungen hervorgerufen werden. Außerdem müssen die thermischen und mechanischen Randbedingungen möglichst realistisch abgeschätzt und definiert werden.

3.1.1 Thermische Lasten durch Absorption von Laserstrahlung

In Bild 12 ist die Vorgehensweise zur Definition thermischer Lasten für verschiedene Anwendungsfälle dargestellt. Um die Lasten in der Temperaturfeldanalyse in *ANSYS Workbench* zu implementieren, werden Erweiterungen mittels APDL (engl. *ANSYS Parametric Design Language*) erstellt.

Für rotationssymmetrische Lastprofile wird die Last auf Basis des Intensitätsprofils des Laserstrahls (Gaußstrahl oder Super-Gauß-Moden) zunächst auf einem äquidistanten Gitter berechnet. Die Auflösung des Gitters sollte größer als die des FE-Netzes sein. Diese Last wird dann auf das Volumenmaterial bzw. die Oberflächen angewendet. *ANSYS* interpoliert die Last auf die Konten des FE-Netzes.

Komplexe, nicht rotationssymmetrische thermische Lasten[3] werden entweder mittels nicht-sequentiellem Ray-Tracing ermittelt oder numerisch mit einem externen Programm berechnet. Im ersten Fall wird die pro Volumen bzw. Fläche absorbierte Leistung auf Basis der Strahlengänge in *OpticStudio* ermittelt. Dazu ist eine entsprechend hohe Anzahl an Strahlen erforderlich. Die Lasten werden jeweils als Matrix exportiert, dann mittels APDL importiert und in der FEA angewendet.

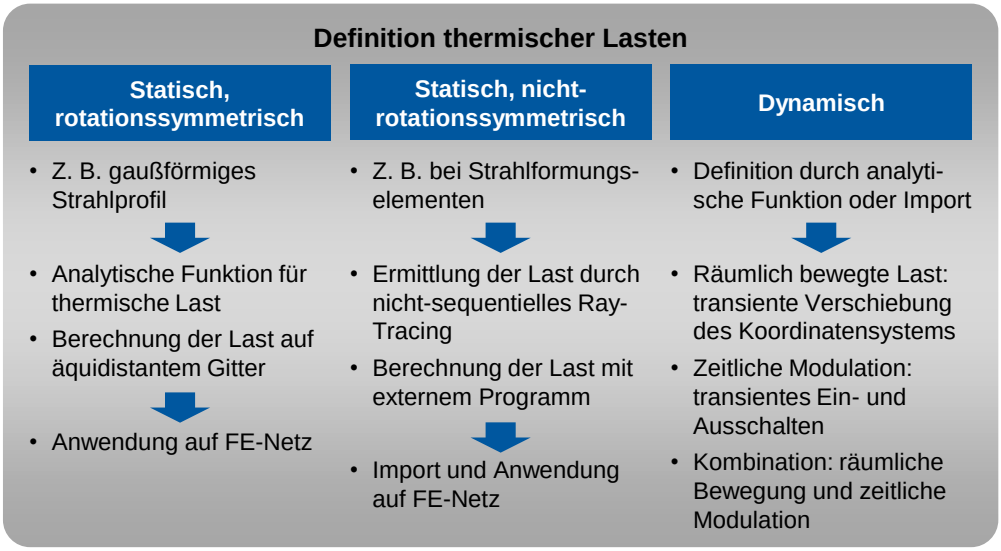


Bild 12: Anwendungsspezifische Definition der thermischen Lasten.

Dynamische thermische Lasten können wie folgt unterteilt werden:

- Räumlich bewegte Last, deren Profil invariant ist;
- Zeitlich modulierte Last, deren Profil invariant ist;
- Räumlich bewegte und zeitlich modulierte Last, deren Profil invariant ist;
- Lasten, deren Profil sich in Raum und Zeit ändert.

Eine räumlich bewegte Last mit invariantem Profil wird in APDL mit dem Befehl *„local“* zeitabhängig entlang einer definierten Trajektorie verschoben. Der verwendete APDL-Code ist in Auszügen im Anhang 8.5 zu finden. Eine zeitliche Modulation einer thermischen Last kann in APDL durch Aktivieren und Deaktivieren der Last realisiert werden. Eine Kombination von räumlicher Bewegung und zeitlicher Modulation der thermischen Last ist ebenfalls mit APDL realisierbar. Anwendung findet diese Kombination bei der Analyse transienter thermooptischer Effekte beim SLM (vgl. Abschnitt 5.1.2). Thermische Lasten, deren Profil sich in Raum und Zeit ändert, werden in dieser Arbeit nicht verwendet.

Bei hochdynamischen Prozessen wie dem SLM ist die Zeitskala der räumlichen Bewegung des Laserstrahls sehr viel kleiner als die gesamte Prozessdauer. Mit den zur Verfügung stehenden Rechenkapazitäten kann die thermische Last nicht über die gesamte Prozessdauer zeitlich aufge-

[3] Die zeitliche Mittelung eines bewegten Gaußstrahls wie in Abschnitt 5.1.2 stellt eine komplexe thermische Last dar.

löst werden. Daher wird die FEA unterteilt in eine Analyse mit grober Zeitauflösung und eine darauf aufbauende Analyse mit feiner Zeitauflösung. Details zu diesem Vorgehen finden sich in Abschnitt 5.1.2.

3.1.2 Thermische und mechanische Randbedingungen

Die absorbierte Wärmeleistung wird zum einen über die mechanische Halterung der optischen Komponenten und zum anderen über Konvektion und Wärmestrahlung an die Umgebung abgegeben.

Bei einer nur geringen Auflagefläche zwischen Optik und Halter, z. B. bei der Verwendung von Ringen zur Linsenhalterung, kann die Kontaktfläche in der FEA von der realen Auflagefläche abweichen. In diesem Fall ist es erforderlich, den Wärmeübergangskoeffizient zwischen Optik und Halter in der Simulation anzupassen. Dies setzt jedoch die Kenntnis der realen Temperaturverteilung der Linse voraus, die experimentell mittels Thermografie bestimmt werden kann. Der Einfluss der thermischen Kopplung auf die FEA sowie die daraus resultierende Fokusverschiebung werden in Abschnitt 5.1.1 analysiert.

Um den Wärmeabfluss über Konvektion und Wärmestrahlung in der FEA zu berücksichtigen, sind Annahmen über den Konvektionskoeffizienten sowie den Emissionsgrad der optischen Materialien zu treffen. Der Konvektionskoeffizient für freie Konvektion in Gasen liegt im Bereich von 2 W/(m^2 K) bis 25 W/(m^2 K) [106]. Im Folgenden wird ein Wert von 5 W/(m^2 K) bis 10 W/(m^2 K) angenommen. Genauere Angaben ließen sich über eine Fluidsimulation erzielen, die jedoch aufwendig ist und ihrerseits Annahmen über die Luftströmung erfordert. Der Emissionsgrad von Glas im Spektralbereich von 8 µm bis 14 µm beträgt ca. 0,8 bis 0,95 [107]. Konkrete Werte für die verwendeten Gläser werden experimentell ermittelt (vgl. Abschnitte 4.2 und 5.1.1).

Zur Berechnung der Oberflächendeformationen wird das Temperaturprofil auf eine Strukturanalyse übertragen. Die Deformation liegt in der Regel im Bereich weniger Mikrometer. Somit ist – mit Ausnahme von Mikrooptiken – eine Rückkopplung zur Temperaturfeldanalyse nicht erforderlich, da die Deformation deutlich kleiner ist als die Dimension der optischen Elemente. Da die mechanische Halterung Einfluss auf die thermische Ausdehnung und damit auf die Oberflächendeformation hat, sollte der Halter möglichst realitätsnah in der FEA nachgebildet werden.

3.2 Thermische Oberflächendeformation

Bei der Verwendung von Zernike-Polynomen bzw. globalen asphärischen Polynomen zur Beschreibung thermischer Oberflächendeformationen treten Limitierungen und Defizite auf (vgl. Abschnitt 2.3.1). Um diese zu

überwinden, werden in dieser Arbeit der WLS- und der MBA-Algorithmus zur Approximation der diskreten Deformationsdaten verwendet.

3.2.1 Aufbereitung der Finite-Elemente-Daten

Bevor die diskreten FE-Daten approximiert werden können, müssen sie aufbereitet werden. Zuerst erfolgt eine Transformation der Daten in das lokale Koordinatensystem der jeweiligen Oberfläche im Ray-Tracing-Modell. Dazu werden die Deformationsvektoren $\mathbf{dr_g}$ an den Knotenpunkten r_g mittels einer Translation und ggf. Rotation in das lokale Koordinatensystem überführt. Es resultieren die Deformationsvektoren $\mathbf{dr} = (dx, dy, dz)$ an den Punkten $\mathbf{r} = (x, y, z)$, wobei die z-Achse der optischen Achse der Oberfläche entspricht. Anschließend erfolgt die Berechnung der thermisch bedingten Durchbiegung der Oberfläche auf Basis der Deformationsvektoren und der ursprünglichen Linsenoberfläche $z(x, y)$. Für sphärische, konische und asphärische Oberflächen ist diese durch

3.1
$$z(x,y) = \frac{c(x^2+y^2)}{1+[1-(1+k)c^2(x^2+y^2)]^{1/2}} + \sum_{i=1}^{8} \alpha_i (x^2+y^2)^i$$

gegeben. Dabei sind $c = 1/R$ die Krümmung der Linse und k die konische Konstante. Die Summe in Formel **3.1** beschreibt den asphärischen Anteil durch die Koeffizienten α_i.

Die radialen Anteile der Deformation dx und dy tragen in der Regel signifikant zur Durchbiegung der Oberfläche bei [63]. Dieser Einfluss ist schematisch in Bild 13 dargestellt. Die ursprüngliche und die deformierte Oberfläche sind jeweils in blau und rot eingezeichnet. Der Knotenpunkt $\mathrm{P_0}$ wird um $\mathbf{dr}$ zum Knotenpunkt $\mathrm{P_1}$ verschoben. Analog kann ein virtueller Punkt $\mathrm{P_0^*}$ eingeführt werden, der ausschließlich axial, d. h. parallel zur optischen Achse, verschoben wird. Die Distanz von $\mathrm{P_0^*}$ zu $\mathrm{P_1}$ entspricht der thermisch induzierten Durchbiegung der Oberfläche (engl. *sag*) und ist durch [108]

3.2
$$def(\tilde{x},\tilde{y}) = dz + dz_{sag} = dz + [z(x,y) - z(\tilde{x},\tilde{y})]$$

gegeben. Dabei gilt $\tilde{x} = x + dx$ und $\tilde{y} = y + dy$. Formel **3.2** basiert auf der Arbeit von Coronato und Juergens [60, 61], die den rotationssymmetrischen Spezialfall betrachten. Die zusätzliche axiale Verschiebung dz_{sag} wird auf Basis der ursprünglichen Oberfläche (Formel **3.1**) berechnet.

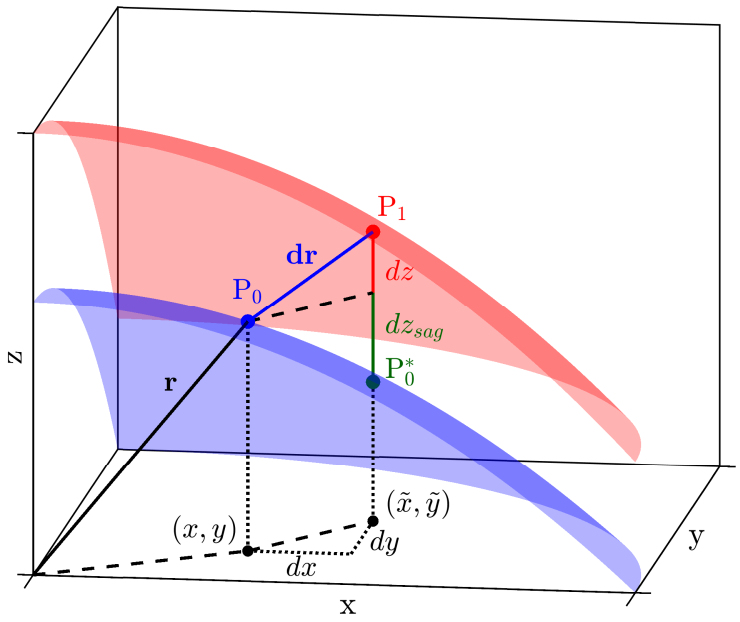


Bild 13: Darstellung der Umrechnung des Deformationsvektors **dr** in die Durchbiegung der Oberfläche $def = dz + dz_{sag}$.

3.2.2 Approximation der Deformationsdaten

Aufbauend auf den Arbeiten von Gatej [13], der den WLS- und MBA-Algorithmus zur Approximation diskreter Temperaturdaten verwendet (vgl. Abschnitt 2.3.1), werden die Algorithmen angepasst, um die Deformationsdaten aus der FEA in stetig differenzierbare Funktionen zu überführen. Die Schnittstellensoftware *TOP Simulation* wird modifiziert, sodass die FE-Daten importiert und anschließend automatisiert gemäß dem in Abschnitt 3.2.1 geschilderten Vorgehen aufbereitet werden können. Im Allgemeinen wird die Oberflächendeformation von Vorder- und Rückseite einer Linse jeweils durch eine Funktion $def(x, y)$ der Dimension 2D beschrieben. Für den Fall, dass die zu analysierende Optik sowie das Laserstrahlprofil rotationssymmetrisch sind und zudem die thermischen und mechanischen Randbedingungen diese Symmetrie aufweisen, reduziert sich die Dimension der angepassten Funktion $def(r)$ auf 1D. Die grafische Benutzeroberfläche von *TOP Simulation* wird erweitert, sodass die importierten Deformationsdaten, die approximierte Funktion sowie deren Gradient visualisiert werden können. So können mögliche Abweichungen oder Oszillationen der approximierten Funktion erkannt und die Approximationsparameter angepasst werden. Außerdem wird die Schnittstelle in Form von DLLs zum Ray-Tracing-Programm *OpticStudio* erweitert, um neben dem Brechungsindexprofil die thermisch induzierte Durchbiegung der Oberfläche zu übergeben.

Insgesamt sind sowohl der WLS- als auch der MBA-Algorithmus besser für die Approximation diskreter FE-Daten für die Oberflächendeformation geeignet als Zernike-Polynome (vgl. Abschnitt 2.3.1). Ein geringfügiger Nachteil besteht darin, dass die Koeffizienten nicht spezifischen optischen Aberrationen zugeordnet werden können. Darüber hinaus ist eine benutzerspezifische DLL zur Weitergabe der approximierten Oberflä-

chendeformation an das Ray-Tracing-Programm notwendig. Jedoch ist bereits zur Berücksichtigung des Brechungsindexprofils eine DLL erforderlich, sodass diese erweitert werden kann. Die Datenkompression beim WLS- und MBA-Algorithmus ist geringer als bei der Verwendung von Zernike-Polynomen, aber dennoch ausreichend hoch, um die Daten auch für mehrere Lastfälle oder eine transiente Analyse effizient verarbeiten zu können. So resultieren bei Verwendung des WLS-Algorithmus für eine 1D-Funktion, bestehend aus vier lokalen Polynomen, 34 Koeffizienten und für eine 2D-Funktion, die aus 64 lokalen Polynomen zusammengesetzt ist, ca. 1200 Koeffizienten. Der Polynomgrad beträgt jeweils vier. Wird der MBA-Algorithmus mit Level 5 verwendet, ergeben sich 206 bzw. ca. 1800 Koeffizienten für eine 1D- bzw. 2D-Funktion.

3.3 Analytisches Modell

Um den WLS- und MBA-Algorithmus auf Eignung zur Approximation der thermisch induzierten Oberflächendeformation zu erproben (vgl. Abschnitt 3.4) sowie den Einfluss der FE-Netzstruktur zu untersuchen (vgl. Abschnitt 3.5), ist ein analytisches Referenzmodell erforderlich. Dazu werden im Folgenden analytische Ausdrücke für das Temperaturprofil in einem zylinderförmigen Testkörper aus Glas sowie die resultierende Oberflächendeformation hergeleitet.

3.3.1 Temperaturprofil

Da Laserstrahlen typischerweise ein gaußförmiges Intensitätsprofil aufweisen, wird ein analytisches Temperaturmodell für eine gaußförmige Last hergeleitet [109]. Im Fall von Rotationssymmetrie lautet die stationäre Wärmeleitungsgleichung in Zylinderkoordinaten [106]

3.3
$$\nabla_r^2 T + \nabla_z^2 T = \frac{1}{r}\frac{\partial}{\partial r}\left(r\frac{\partial T}{\partial r}\right) + \frac{\partial^2 T}{\partial z^2} = -\frac{Q(r,z)}{\kappa}.$$

Dabei sind Q die thermische Last und κ die thermische Leitfähigkeit. Unter der Annahme, dass Wärmeleitung ausschließlich in radialer Richtung stattfindet[4], kann Gleichung **3.3** für jede Ebene in z mit

3.4
$$Q(r,z) = \alpha_{abs} I(r,z) = \alpha_{abs} I_0 \exp\left(-\frac{2r^2}{w^2}\right)\exp(-\alpha_{abs} z)$$

gelöst werden. Dabei sind α_{abs} der Volumenabsorptionskoeffizient und $I(r,z)$ das Intensitätsprofil des Gaußstrahls mit Strahlradius w^2. Der Exponentialterm gibt die Abnahme der Intensität im Material gemäß dem

[4] Für den Fall von Wärmeleitung in alle drei Raumrichtungen kann die stationäre Wärmeleitungsgleichung nicht analytisch gelöst werden. Die Beschränkung des analytischen Modells auf Wärmeleitung ausschließlich in radialer Richtung beeinflusst nicht die Verifikation der Algorithmen bzw. die Untersuchungen zum Einfluss der FE-Netzstruktur, da jeweils nur die Abweichung zum analytischen Modell betrachtet wird.

Gesetz nach Lambert-Beer an. Eine detaillierte Herleitung der Temperaturverteilung sowie des Temperaturgradienten findet sich im Anhang 8.6. Für die Erwärmung des zylinderförmigen Testkörpers und die Temperaturgradienten in radialer und axialer Richtung folgt

3.5

$$\Delta T(r,z) = \frac{\alpha_{abs} P}{4\pi\kappa} \exp(-\alpha_{abs} z) \cdot \begin{cases} E_1\left(\frac{2r_L^2}{w^2}\right) + \ln\left(\frac{2r_L^2}{w^2}\right) + \gamma, & r = 0 \\ E_1\left(\frac{2r_L^2}{w^2}\right) - E_1\left(\frac{2r^2}{w^2}\right) + \ln\left(\frac{r_L^2}{r^2}\right), & r > 0 \end{cases}$$

$$\nabla_r T(r,z) = -\frac{\alpha_{abs} P}{2\pi\kappa} \exp(-\alpha_{abs} z) \cdot \begin{cases} 0, & r = 0 \\ \frac{1 - \exp\left(-\frac{2r^2}{w^2}\right)}{r}, & r > 0 \end{cases}$$

$$\nabla_z T(r,z) = -\alpha_{abs}\, T(r,z).$$

Hierbei sind P die Leistung des Laserstrahls, r_L der Halbdurchmesser des zylinderförmigen Testkörpers und

3.6

$$E_1(x) = \int_{-\infty}^{x} \frac{\exp(t)}{t}\, dt$$

die Integralexponentialfunktion. Zudem tritt für den Grenzwert $r \to 0$ die Euler-Mascheroni-Konstante $\gamma \approx 0{,}577216$ auf [110].

In Bild 14 sind die analytischen Lösungen der Temperaturverteilungen für einen Gaußstrahl (Formel **3.5**) und ein homogenes Intensitätsprofil (Top-Hat-Intensitätsprofil) [111] einander gegenübergestellt. Die angenommenen Parameter finden sich in Tabelle 4. Für das homogene Intensitätsprofil verläuft die Temperatur innerhalb des Strahlradius parabolisch. Folglich weist der Gradient einen linearen Verlauf auf. Dieser Verlauf bewirkt, dass sich der Fokus nahezu ohne Aberrationen verschiebt. Beim Gaußstrahl variiert der Temperaturgradient hingegen deutlich über den Strahlquerschnitt und induziert folglich neben einer Fokusverschiebung auch Aberrationen. Somit erscheint dieses Modell geeigneter für die Verifikation der Approximationsalgorithmen.

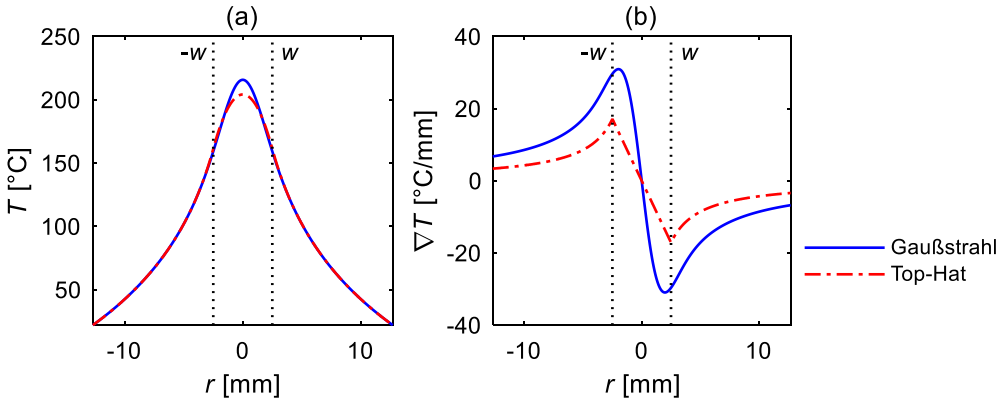


Bild 14: Vergleich von Temperaturverteilung und -gradient in radialer Richtung für die thermische Last eines Gaußstrahls und eines homogenen Intensitätsprofils.

Tabelle 4: Parameter für den Testzylinder und Laserstrahl im analytischen Modell.

Parameter	Wert
Länge L [mm]	10,0
Halbdurchmesser r_L [mm]	12,7
Strahlradius w [mm]	2,5
Laserleistung P [W]	5000

3.3.2 Oberflächendeformation

Da der Durchmesser des Testzylinders größer als die Länge ist, wird angenommen, dass die gesamte Materialdicke zur Deformation beiträgt. Außerdem wird angenommen, dass der Schwerpunkt des Zylinders bei $z = L/2$ ortsfest ist. Folglich trägt die vordere Hälfte des Zylinders zur Deformation der Vorderseite und die hintere Hälfte zur Deformation der Rückseite bei. Zudem wird vereinfachend angenommen, dass sich der Testzylinder rein axial mit dem Ausdehnungskoeffizienten α_{th} ausdehnt. Für die Deformation der Vorderseite folgt

3.7
$$def(r) = \alpha_{th} \int_{\frac{L}{2}}^{0} \Delta T(r,z)\, dz$$

sowie für die Rückseite

3.8
$$def(r) = \alpha_{th} \int_{\frac{L}{2}}^{L} \Delta T(r,z)\, dz.$$

Das Lösen der Integrale ergibt

3.9
$$def(r) = -\frac{\alpha_{th}}{\alpha_{abs}} \cdot \Delta T(r, z=0) \cdot \begin{cases} 1 - \exp\left(-\frac{\alpha_{abs} L}{2}\right) & \text{Vorderseite} \\ \exp(-\alpha_{abs} L) - \exp\left(-\frac{\alpha_{abs} L}{2}\right) & \text{Rückseite.} \end{cases}$$

Für den Gradienten in radialer Richtung folgt

3.10
$$\nabla_r\, def(r) = \frac{\alpha_{th}}{\alpha_{abs}} \cdot \nabla_r T(r, z=0) \cdot \begin{cases} 1 - \exp\left(-\frac{\alpha_{abs} L}{2}\right) & \text{Vorderseite} \\ \exp(-\alpha_{abs} L) - \exp\left(-\frac{\alpha_{abs} L}{2}\right) & \text{Rückseite} \end{cases}$$

mit $\nabla_r T$ gemäß Formel **3.5**.

Die resultierende Oberflächendeformation für die Rückseite des Zylinders ist für die beiden Lastfälle in Bild 15 dargestellt. Der Verlauf des Gradienten stimmt qualitativ mit dem der Temperaturverteilung überein. Folglich induziert der Gaußstrahl größere Aberrationen als das homogene Strahlprofil.

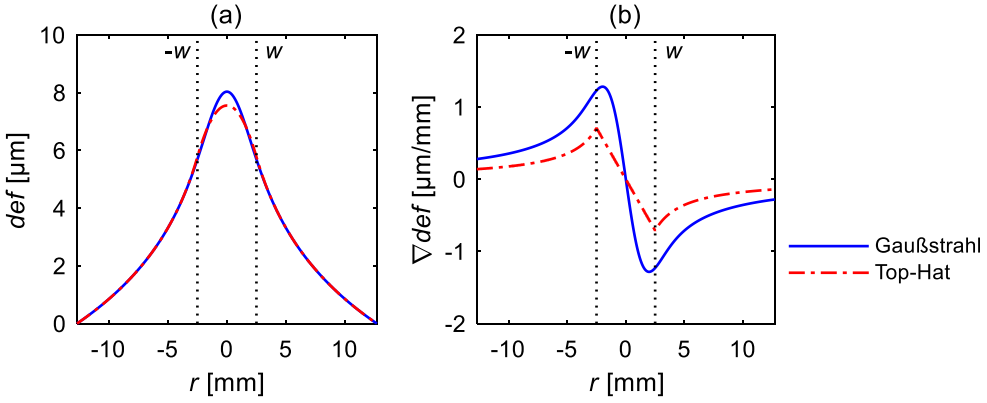


Bild 15: Vergleich der Oberflächendeformation und -gradienten in radialer Richtung für die thermische Last eines Gaußstrahls und eines homogenen Intensitätsprofils.

Die analytischen Gleichungen für die von der Temperaturverteilung abgeleitete Brechungsindexverteilung sowie die Oberflächendeformation werden in einer benutzerdefinierten DLL für *OpticStudio* implementiert. Für die Analysen in den Abschnitten 3.4 und 3.5 werden die in Tabelle 4 aufgeführten Parameter verwendet. Als Material für den Testzylinder wird N-BK7 angenommen. Die Materialdaten sind Tabelle 1 (vgl. Kapitel 2.2) zu entnehmen. Für den thermooptischen Koeffizienten[5] wird abweichend $\mathrm{d}n/\mathrm{d}T$ = 1,5·10^{-6}/K verwendet, da sich das Glas auf bis zu 215 °C erwärmt (vgl. Bild 14).

3.4 Verifikation der Algorithmen

Zur Erprobung des WLS- und MBA-Algorithmus auf Eignung zur Approximation von Oberflächendeformationen wird eine Fallstudie auf Basis des in Abschnitt 3.3 hergeleiteten analytischen Modells durchgeführt. Die Vorgehensweise der Fallstudie ist in Bild 16 dargestellt und an die Analysen von Gatej et al zur Verifikation der Approximation einer Temperaturverteilung [56] angelehnt.

Die analytische Funktion für die Oberflächendeformation (Formel **3.9**) wird auf einem 2-dimensionalen äquidistanten Gitter in x und y gesampelt. Dabei gilt $r = \sqrt{x^2 + y^2}$. Die Anzahl der Gitterpunkte N variiert zwischen 81 und 7525. In allen Fällen wird das identische Gitter für die Vorder- und Rückseite des Testzylinders verwendet. Der Einfluss des temperaturabhängigen Brechungsindexprofils wird im Folgenden nicht berücksichtigt.

[5] Der thermooptische Koeffizient für den Temperaturbereich von 60 °C bis 80 °C wird verwendet, da für größere Temperaturen keine Daten in Quelle [19] vorliegen. Da im Folgenden jeweils nur die Abweichung zum analytischen Modell betrachtet wird, hat dies keinen Einfluss auf die Ergebnisse.

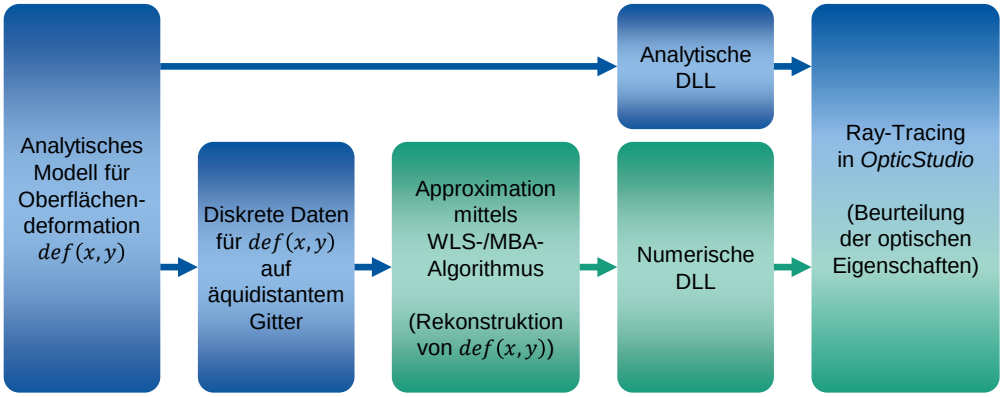


Bild 16: Ablaufdiagramm der Fallstudie zur Verifikation vom WLS- und MBA-Algorithmus.

Die generierten diskreten Datenpunkte werden zum einen mit dem WLS-Algorithmus und zum anderen mit dem MBA-Algorithmus approximiert. Über die numerische DLL (vgl. Abschnitt 3.2.2) wird die Oberflächendeformation an das Ray-Tracing-Programm *OpticStudio* übergeben. Dort werden die optischen Eigenschaften analysiert. Beim WLS-Algorithmus werden drei verschiedene Zielwerte für den mittleren quadratischen (engl. *root mean square*, RMS) Fehler verwendet: 1,0 %, 0,1 % und 0,01 %. Alle weiteren Einstellungen sind in Tabelle 18 im Anhang 8.7 aufgeführt. Der einzige Parameter des MBA-Algorithmus, das Level, wird in drei Schritten von 4 auf 7 erhöht.

3.4.1 RMS-Fehler der Approximation

Bild 17 zeigt den resultierenden RMS-Fehler der approximierten Deformation der Vorderseite des Testzylinders aufgetragen über der Anzahl der Gitterpunkte. Außerdem ist der RMS-Fehler für die Zwischenpunkte dargestellt, die mittig auf der Diagonalen des Gitters liegen.

Beim WLS-Algorithmus (vgl. Bild 17 a) ist der RMS-Fehler für einen RMS-Fehlerzielwert von 1 % nahezu unabhängig von der Anzahl der Gitterpunkte N. Für kleinere Zielwerte konvergiert der RMS-Fehler mit steigender Anzahl von Gitterpunkten. Für $N > 1900$ ist der Fehler unabhängig von der Auflösung. Er verringert sich näherungsweise linear bei einer Reduzierung des Zielwerts. Zwischen den Gitterpunkten und den Zwischenpunkten ist nahezu kein Unterschied ersichtlich. Dies deutet auf eine glatte Approximation hin. Im Fall von Oszillationen wäre der RMS-Fehler an den Zwischenpunkten gegenüber den Gitterpunkten deutlich erhöht. Je geringer der Fehlerzielwert ist, desto mehr Polynome werden aufgrund der adaptiven Verfeinerung zur Approximation verwendet. Unabhängig von der Anzahl der Gitterpunkte werden 16 Polynome für 1 % und 64 Polynome (ausgenommen $N = 81$) für einen Fehlerzielwert von 0,1 % verwendet. Um den Zielwert von 0,01 % zu erreichen sind bis zu 160 Polynome erforderlich.

Bei der Verwendung des MBA-Algorithmus (vgl. Bild 17 b) zeigt sich, dass sich der RMS-Fehler bei Erhöhung des Levels verringert. Ab Level 5 und $N > 1400$ ist der Fehler < 0,01 µm. Je größer das Level, desto später

konvergiert der Fehlerwert. Für Level 6 und 7 ist der RMS-Fehler an den Zwischenpunkten bis zu vier Größenordnungen größer als der Fehler an den Gitterpunkten. Die Verwendung eines solch hohen Levels führt insbesondere für < 2000 Gitterpunkte zu Oszillationen bei der Approximation und somit zu größeren Abweichungen an den Zwischenpunkten.

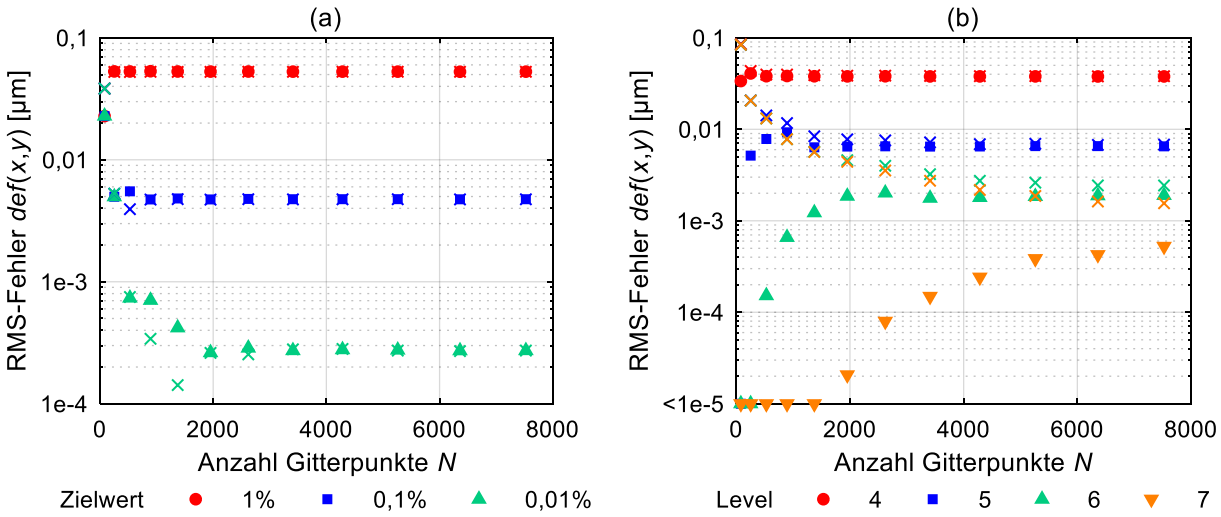


Bild 17: RMS-Fehler der approximierten Deformation bei Verwendung des WLS-Algorithmus (a) und des MBA-Algorithmus (b). Die flächigen Symbole geben die Werte für die Gitterpunkte an und die Kreuze für die Zwischenpunkte.

Die optischen Eigenschaften des Testzylinders werden im Ray-Tracing-Modell anhand der folgenden zwei Größen beurteilt:

- Relative Abweichung der Fokuslage vom Referenzwert,
- Abweichung der Wellenfront von der Referenzwellenfront.

3.4.2 Abweichung der Fokuslage

Die Fokuslage wird relativ zur Rückseite des Testzylinders gemessen und durch Minimierung des RMS-Spotradius (12 Ringe und 6 Arme, automatische Anzahl an Optimierungszyklen) mittels Ray-Tracing bestimmt. Bei Verwendung der analytischen DLL folgt der Referenzwert zu f_{ref} = 1464,4 mm. In Bild 18 ist die relative Abweichung der rekonstruierten Fokuslage zum Referenzwert $|f - f_{ref}|/f_{ref}$ über der Anzahl der Gitterpunkte aufgetragen.

Bei Verwendung des WLS-Algorithmus (vgl. Bild 18 a) mit einen RMS-Fehlerzielwert von 1 % bzw. 0,1 % und $N > 250$ beträgt die Abweichung der Fokuslage 18 % bzw. 1 %. Für den kleinsten Fehlerzielwert von 0,01 % nimmt die Abweichung mit steigender Anzahl von Gitterpunkten ab und beträgt für $N > 1400$ etwa 0,09 %. In allen Fällen liegt die relative Abweichung der Fokuslage um einen Faktor 8 bis 18 oberhalb des RMS-Fehlerzielwerts. Grund hierfür ist, dass die größte Abweichung zwischen approximierter und analytischer Oberflächendeformation im Bereich des Strahlradius auftritt, wo der Gradient am größten ist

(vgl. Bild 15). Nur dieser Bereich beeinflusst die optischen Eigenschaften des Testzylinders.

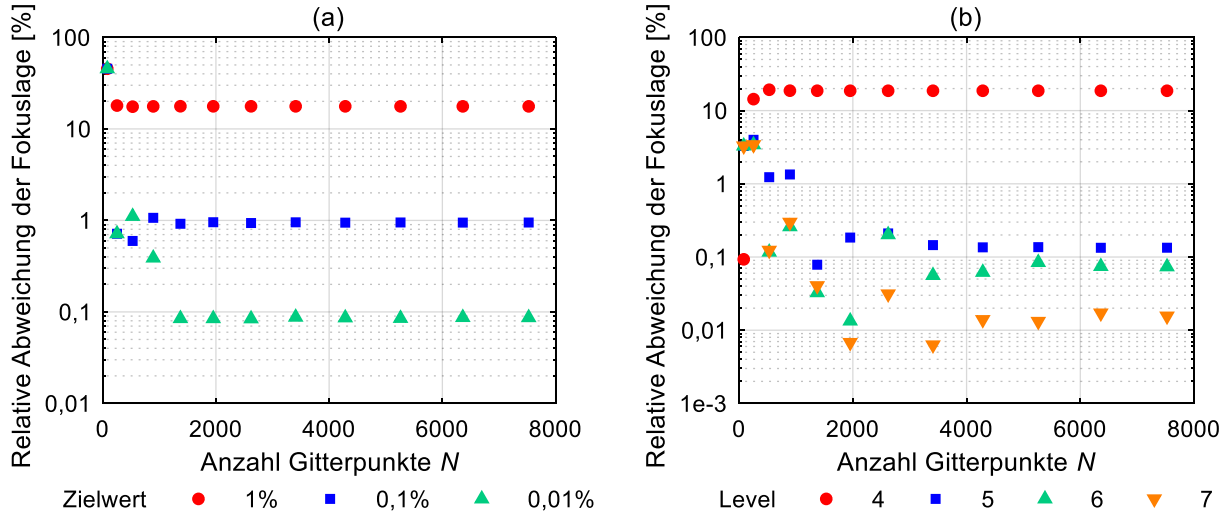


Bild 18: Relative Abweichung der Fokuslage vom Referenzwert bei Verwendung des WLS-Algorithmus (a) und des MBA-Algorithmus (b).

Für den MBA-Algorithmus (vgl. Bild 18 b) ergibt ein Level 4 unabhängig von der Anzahl der Gitterpunkte eine relative Abweichung der Fokuslage von etwa 20 %. Für $N > 1900$ und ein Level im Bereich von 5 bis 7 beträgt die relative Abweichung maximal 0,2 %. Folglich wird die Fokuslage mit hinreichender Genauigkeit rekonstruiert. Andere Unsicherheiten bei der thermooptischen Analyse wie z. B. Materialparameter haben einen größeren Einfluss auf die Fokuslage. So beträgt die Messunsicherheit der mittels PCI bestimmten Volumenabsorptionskoeffizienten von Quarzglas etwa 10 % (vgl. Tabelle 6 in Abschnitt 5.1.1). Die simulierte Fokusverschiebung skaliert näherungsweise linear mit dem Volumenabsorptionskoeffizienten.

3.4.3 Wellenfrontabweichung

Als zweite Größe zur Beurteilung der optischen Eigenschaften wird die Wellenfrontabweichung analysiert. Dazu wird die Wellenfront mit einer Auflösung von 256x256 Punkten berechnet und die Differenz zur Referenzwellenfront (vgl. Bild 20 d) bestimmt. Um einen skalaren Wert zu erhalten, wird der RMS-Fehler dieser Differenz in Einheiten der Wellenlänge gebildet. Die Wellenfronten werden jeweils in einer Referenzebene berechnet, die im Abstand von 1334,5 mm zur Rückseite des Testzylinders liegt. In dieser Ebene ist die Variation der Wellenfront für die analytische Oberflächendeformation minimal. Der Spitze-Tal-Wert und der RMS-Wert der Referenzwellenfront betragen 0,250 λ bzw. 0,069 λ.

Das Verhalten der Wellenfrontabweichung in Abhängigkeit von der Anzahl der Gitterpunkte (vgl. Bild 19) ist qualitativ mit dem Verhalten der relativen Abweichung der Fokuslage (vgl. Bild 18) vergleichbar. Für den WLS-Algorithmus und $N > 1400$ beträgt die Abweichung für die drei

RMS-Fehlerzielwerte etwa 0,25 λ, 0,017 λ bzw. 0,003 λ. Beim Vergleich dieser Werte mit dem Spitze-Tal-Wert der Referenzwellenfront sowie dem RMS-Wert wird deutlich, dass nur der RMS-Fehlerzielwert von 0,01 % eine präzise Rekonstruktion der Wellenfront ergibt. Für den MBA-Algorithmus resultiert für $N > 1400$ und ein Level von 6 oder 7 eine präzise Rekonstruktion der Wellenfont mit Abweichungen < 0,003 λ.

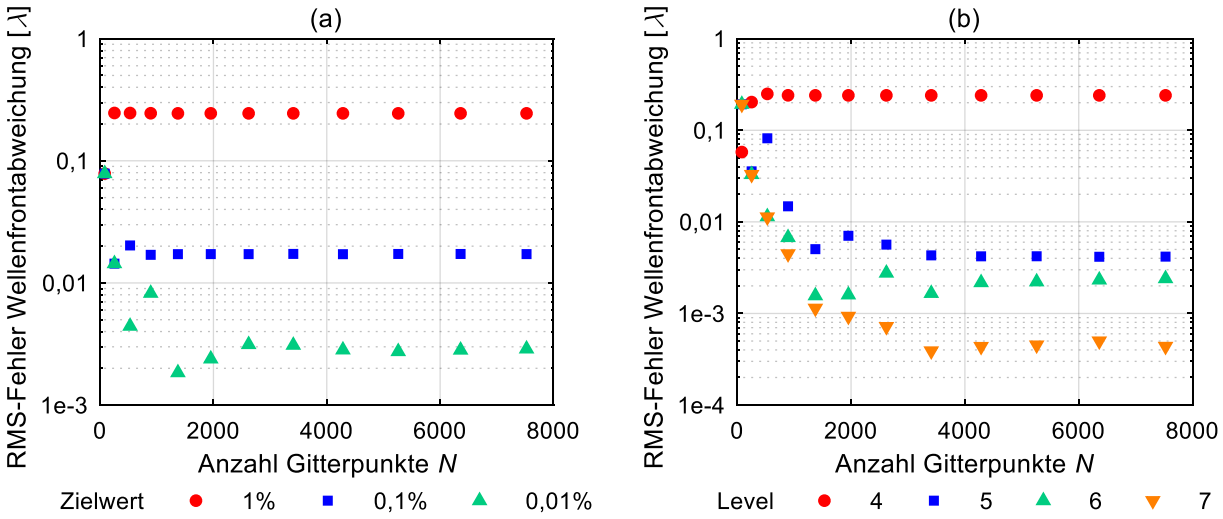


Bild 19: RMS-Fehler der Wellenfrontabweichung bei Verwendung des WLS-Algorithmus (a) und des MBA-Algorithmus (b).

Für eine feste Anzahl von Gitterpunkten $N = 3409$ sind in Bild 20 die rekonstruierten Wellenfronten der Referenz gegenübergestellt. Bei Verwendung des WLS-Algorithmus mit einem RMS-Zielwert von 1 % bzw. des MBA-Algorithmus mit Level 4 ist die Rekonstruktion der Wellenfront unzureichend. Für einen Zielwert von 0,1 % treten nicht-rotationssymmetrische Artefakte auf, die auf die Überlagerung der lokal angepassten Polynome zurückzuführen sind. Erst ab einem RMS-Fehlerzielwert von 0,01 % ist für den WLS-Algorithmus nahezu kein Unterschied zur Referenz zu erkennen. Ab Level 5 ergibt der MBA-Algorithmus eine präzise Rekonstruktion der Wellenfront.

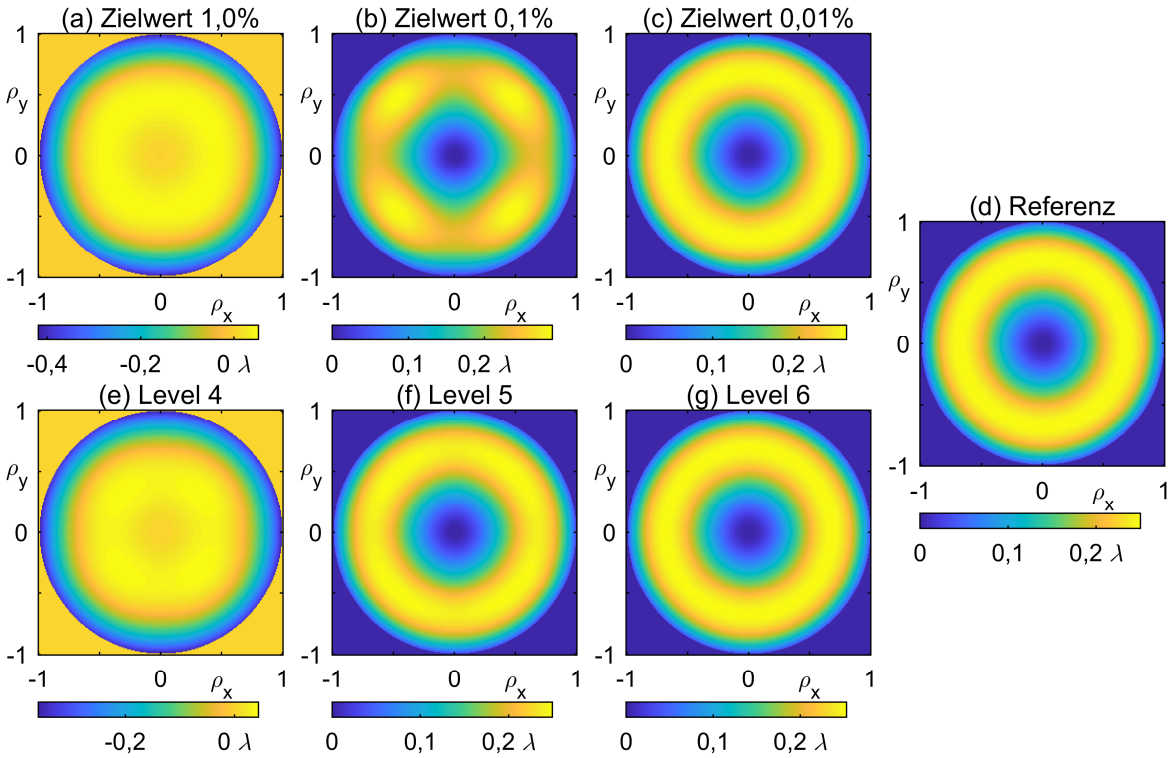


Bild 20: Wellenfronten bei Verwendung des WLS-Algorithmus (a-c) mit verschiedenen RMS-Fehlerzielwerten sowie bei Verwendung des MBA-Algorithmus (e-g) bei unterschiedlichen Leveln. Die Anzahl der Gitterpunkte beträgt jeweils N = 3409. Die Referenzwellenfront ist in (d) gezeigt.

Insgesamt zeigt die Fallstudie, dass sowohl der WLS- als auch der MBA-Algorithmus zur Approximation von Oberflächendeformationen geeignet sind. Die folgenden Aussagen gelten für > 1900 Gitterpunkte auf einer Fläche von 507 mm². Dies entspricht etwa 3,7 Gitterpunkten/mm² bzw. durchschnittlich 73 Gitterpunkten innerhalb des Strahlradius von 2,5 mm.

- Beim WLS-Algorithmus ist ein ausreichend kleiner RMS-Zielwert zu wählen, um eine präzise Rekonstruktion der Oberflächendeformation zu erhalten. Für einen RMS-Zielwert von 0,1 % ist die relative Abweichung der Fokuslage < 1 %. Um eine präzise Wellenfront ohne Artefakte zu erhalten, ist ein RMS-Zielwert von 0,01 % erforderlich.
- Beim MBA-Algorithmus wird ab Level 5 die Oberflächendeformation präzise rekonstruiert, wobei die relative Abweichung der Fokuslage < 0,2 % und die Wellenfrontabweichung < 0,007 λ sind. Artefakte in der Wellenfront treten nicht auf.

Somit ist der MBA-Algorithmus vorzugsweise zu verwenden. Der Einfluss von nicht-idealen, d. h. fehlerbehafteten FE-Daten auf die Approximation und die anschließende optische Analyse wird im Rahmen der Analyse des Einflusses der FE-Netzstruktur auf die thermooptische Simulation untersucht (vgl. Abschnitt 3.5).

3.5 Einfluss der FE-Netzstruktur

Im Folgenden wird der Einfluss der verwendeten FE-Netzstruktur auf die thermooptische Simulation analysiert. Dazu wird wiederum eine Fallstudie durchgeführt. Abweichend zur Fallstudie in Abschnitt 3.4 werden sowohl die Oberflächendeformation als auch das temperaturabhängige Brechungsindexprofil berücksichtigt. Die analytischen Funktionen (Formeln **3.5** und **3.9**) werden nicht auf einem äquidistanten Gitter, sondern auf realen FE-Netzen gesampelt. Außerdem wird der Einfluss fehlerbehafteter Daten analysiert. Dazu werden die Werte für die Temperatur bzw. die Deformation, nicht aber die Koordinaten der FE-Knoten, mit normalverteiltem Rauschen beaufschlagt. Die Vorgehensweise ist in Bild 21 dargestellt.

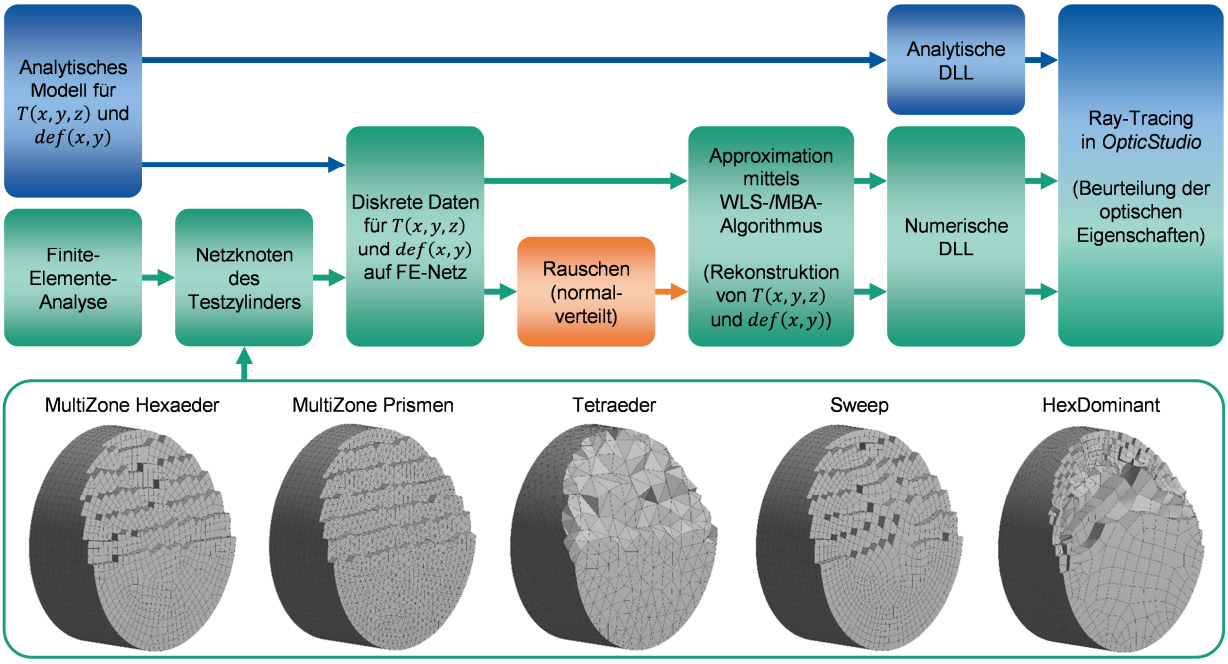


Bild 21: Ablaufdiagramm der Fallstudie zum Einfluss der FE-Netzstruktur auf die thermooptische Simulation. Unten im Kasten sind Schnittansichten des vernetzten Testzylinders für die unterschiedlichen Netzstrukturen, jeweils bei mittlerer Auflösung, gezeigt.

Für die Analyse werden fünf verschiedene Netzstrukturen in unterschiedlicher Auflösung verwendet, die mit *ANSYS Workbench* generiert werden. Eine Übersicht der verwendeten Netze sowie deren Auflösung und Qualität (siehe dazu Abschnitt 3.5.2) findet sich in Tabelle 5. Schnittansichten des vernetzten Testzylinders bei mittlerer Auflösung sind unten in Bild 21 dargestellt.

Netzstruktur	MultiZone Hexaeder	MultiZone Prismen	Tetraeder	Sweep	HexDominant
Verwendete Elementtypen	Hexaeder	Prismen	Tetraeder	Hexaeder, Prismen	Tetraeder, Hexaeder, Prismen, Pyramiden
Anzahl Knoten	3054 – 69222	4116 – 92995	910 – 52437	3405 – 61272	3842 – 90838
Anzahl Elemente	595 – 15834	1310 – 34244	430 – 33116	675 – 13958	1150 – 26909
Anzahl Knoten Vorderseite	394 – 3506	561 – 5005	150 – 2944	440 – 3102	201 – 2165
Anzahl Knoten Rückseite	394 – 3506	561 – 5005	150 – 2944	440 – 3102	233 – 2243
Mittlere orthogonale Qualität	0,96 – 0,98	0,97 – 0,99	0,67 – 0,79	0,92 – 0,94	0,52 – 0,61

Tabelle 5: Übersicht über die verwendeten Netzstrukturen und deren Auflösung sowie die orthogonale Qualität.

3.5.1 Klassifikation der Netzstrukturen

ANSYS bietet vier verschiedene Strukturansätze zur Vernetzung: MultiZone, Tetraeder, Sweep und HexDominant. Die Anzahl der Elemente und damit der Knoten des FE-Netzes wird über den Parameter *Relevance* gesteuert. Im Folgenden werden die zentralen Eigenschaften der unterschiedlichen Netzstrukturen kurz erläutert. Details zur Vernetzung in *ANSYS* finden sich in [112].

MultiZone

Die MultiZone-Vernetzung erstellt ein strukturiertes Netz, sofern die Geometrie des zu vernetzenden Volumens dies zulässt. Komplizierte Geometrien werden automatisch in mehrere Bereiche unterteilt. Im Gegensatz zu anderen Strukturen können neben Hexaedern auch Prismen zur Vernetzung verwendet werden. Im Folgenden wird der Testzylinder einmal mit Hexaedern und einmal mit Dreiecksprismen vernetzt. In beiden Fällen resultiert eine gleichmäßige, strukturierte Vernetzung, wie den Schnittansichten in Bild 21 zu entnehmen ist.

Tetraeder

Bei der Tetraeder-Vernetzung wird das erstellte Volumen aus tetraederförmigen Elementen zusammengesetzt. Zur Vernetzung des Testzylinders wird die flächenabhängige Vernetzung verwendet. Hierbei werden zunächst die Kanten gefolgt von den Oberflächen vernetzt. Schließlich wird das Volumen mit Tetraedern vernetzt. Auf diese Weise wird die Geometrie präzise wiedergegeben.

Sweep

Die Sweep-Vernetzung verwendet die Symmetrieeigenschaften des zu vernetzenden Volumens, um ein möglichst gleichmäßiges Netz zu erstellen. Dazu werden Quell- und Zielfläche, die die gleiche Topologie aufweisen müssen, definiert. Beim Testzylinder entsprechen die Vorder- und Rückseite der Quell- und Zielfläche. Die verwendeten Elementtypen zur Vernetzung des Volumens zwischen Quell- und Zielfläche sind Hexaeder und Prismen.

HexDominant

Bei Verwendung der HexDominant-Vernetzungsmethode wird die Oberfläche primär aus Hexaedern zusammengesetzt. Der Innenbereich des Volumens wird mit Hexaedern, Tetraedern, Prismen und Pyramiden vernetzt. Bei der Vernetzung des Testzylinders mit der HexDominant-Methode resultiert trotz der vorliegenden Rotationssymmetrie ein unregelmäßiges Netz. Die Netzauflösung im Innenbereich des Zylinders ist deutlich geringer als nahe der Mantelfläche.

3.5.2 Qualitätskriterien zur Beurteilung der Vernetzung

Neben der Anzahl der Elemente und Knoten bietet *ANSYS* mehrere charakteristische Größen zur Beurteilung der Qualität des erstellten Netzes. Dazu zählen verschiedene Qualitäts- und Seitenverhältnisgrößen, die Aufschluss über die zu erwartende Genauigkeit der FE-Simulation geben Im Folgenden wird die orthogonale Qualität betrachtet, da hierfür unabhängig von der Art der durchgeführten Simulation Empfehlungen gegeben werden können [113].

Die orthogonale Qualität Q_o ist ein Maß für die Regelmäßigkeit eines finiten Elements. Dabei ist 0 der kleinste und 1 der größte Wert, den Q_o annehmen kann. Die orthogonale Qualität wird über das Produkt normierter Skalarprodukte bestimmter Richtungsvektoren eines finiten Elements bestimmt. Als Empfehlung werden ein Minimalwert von 0,1 und ein Idealwert von $Q_o > 0{,}2$ angegeben [113]. In Bild 22 sind die relevanten Vektoren für die orthogonale Qualität exemplarisch an einem Hexaeder-Element gezeigt. Dabei sind

- $\vec{F}_i$ die Vektoren vom Schwerpunkt des Elements zu den Mittelpunkten der Seitenflächen,
- $\vec{C}_i$ die Vektoren vom Schwerpunkt des Elements zum jeweiligen Schwerpunkt des benachbarten Elements und
- $\vec{N}_i$ die Flächennormalen.

Mit diesen Vektoren berechnet sich die orthogonale Qualität eines Elements mit den zugehörigen Flächen i gemäß [113]

3.11

$$Q_o = \min_i \left(\frac{\vec{N}_i \cdot \vec{F}_i}{|\vec{N}_i||\vec{F}_i|}, \frac{\vec{N}_i \cdot \vec{C}_i}{|\vec{N}_i||\vec{C}_i|} \right).$$

Mit Ausnahme der HexDominant-Vernetzung erfüllen alle analysierten Netzstrukturen die Mindestanforderungen an die orthogonale Qualität. Bei Verwendung der HexDominant-Vernetzungsmethode beträgt die orthogonale Qualität im Mittel zwar 0,52 bis 0,61, allerdings ist die Standardabweichung mit 0,23 vergleichsweise groß. Für die mittlere Netzauflösung unterschreiten etwa 8 % der Elemente den Wert 0,2 für die orthogonale Qualität.

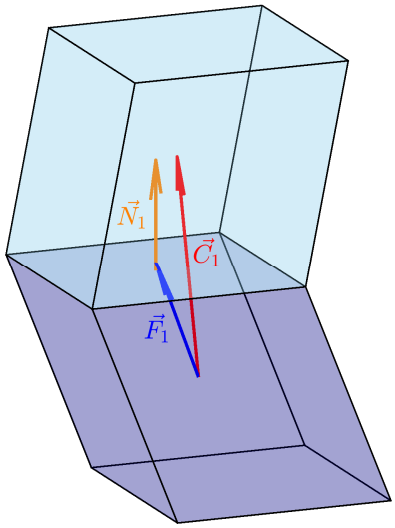


Bild 22: Relevante Vektoren zur Berechnung der orthogonalen Qualität eines Hexaeder-Elements.

3.5.3 Einfluss auf die optischen Größen

Die optischen Eigenschaften werden wie in Abschnitt 3.4 anhand der relativen Abweichung der Fokuslage vom Referenzwert sowie der Wellenfrontabweichung beurteilt. Unter Verwendung der Parameter in Tabelle 4 ergibt die analytische DLL einen Referenzwert für die Fokuslage von f_{ref} = 1078,1 mm. Die Referenzebene zur Analyse der Wellenfront liegt im Abstand von 982,4 mm zur Rückseite des Testzylinders. In dieser Ebene betragen der Spitze-Tal-Wert und der RMS-Wert der Referenzwellenfront 0,341 λ bzw. 0,094 λ.

Um den Parameterraum der Analyse einzugrenzen, werden bei der Approximation der diskreten Daten für die Temperaturverteilung und die Oberflächendeformation des Testzylinders folgende Parameter verwendet: Für den WLS-Algorithmus wird ein fester RMS-Fehlerzielwert von 0,1 % gewählt. Außerdem werden die Gewichtungsfunktionen *Wendland2* sowie *Interpolant* verwendet. Alle weiteren Parameter sind in Tabelle 18 im Anhang 8.7 aufgelistet. Bei Verwendung des MBA-Algorithmus wird Level 5 gewählt.

Bei Approximation der Daten mit dem WLS-Algorithmus unter Nutzung der Gewichtungsfunktion *Wendland2* (vgl. Bild 23 a) ist die relative Abweichung der Fokuslage für alle Netztypen – mit Ausnahme von HexDominant – und > 10000 Knotenpunkten < 0,5 %. Im Fall einer Beaufschlagung der Eingangsdaten mit 0,5 % normalverteiltem Rauschen nimmt die Abweichung der Fokuslage auf etwa 2 % bis 3 % zu. Die Gewichtungsfunktion *Interpolant* (vgl. Bild 23 b) führt zu leicht größeren Abweichungen bei idealen Eingangsdaten, jedoch weicht die Fokuslage mit einer Ausnahme < 1% vom Referenzwert ab, wenn die Eingangsdaten fehlerbehaftet sind.

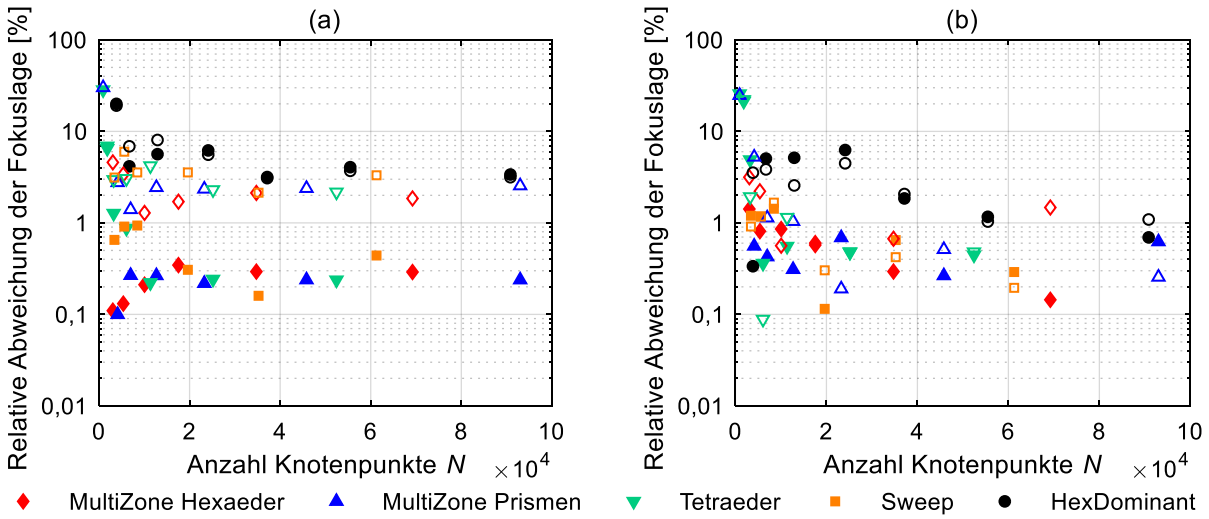


Bild 23: Relative Abweichung der Fokuslage bei Verwendung des WLS-Algorithmus: Gewichungsfunktion *Wendland2* (a) bzw. *Interpolant* (b). Die Umrisssymbole zeigen die Ergebnisse für fehlerbehaftete Eingangsdaten mit 0,5 % normalverteiltem Rauschen.

Bei idealen Eingangsdaten wird eine präzise Rekonstruktion der Wellenfront (vgl. Bild 24) nur bei Verwendung der Gewichtungsfunktion *Wendland2* und > 10000 Knotenpunkte erzielt, mit Ausnahme des Netztyps HexDominant. Im Fall fehlerbehafteter Daten beträgt der RMS-Fehler der Wellenfrontabweichung für beide Gewichtungsfunktionen etwa 0,1 λ bis 0,2 λ und liegt somit im Bereich des RMS-Werts der Referenzwellenfront.

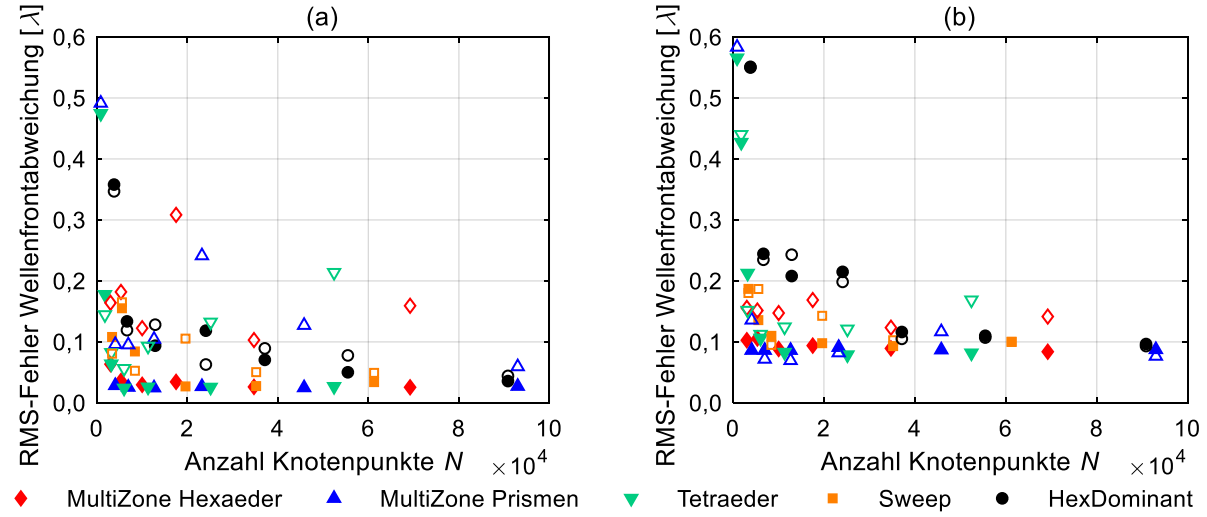


Bild 24: RMS-Fehler der Wellenfrontabweichung bei Verwendung des WLS-Algorithmus: Gewichungsfunktion *Wendland2* (a) bzw. *Interpolant* (b). Die Umrisssymbole zeigen die Ergebnisse für fehlerbehaftete Eingangsdaten mit 0,5 % normalverteiltem Rauschen.

Bei Verwendung des MBA-Algorithmus (vgl. Bild 25) mit Level 5 zeigt sich, dass die relative Abweichung der Fokuslage < 1,2% ist, sofern > 18000 Knotenpunkte vorliegen und nicht der Netztyp HexDominant verwendet wird. Die Rekonstruktion der Wellenfront ist, auch bei fehlerbehafteten Eingangsdaten, geringer als bei Verwendung des WLS-Algorithmus. Der RMS-Fehler der Wellenfrontabweichung beträgt 0,01 λ bis 0,05 λ bei > 18000 Knotenpunkten.

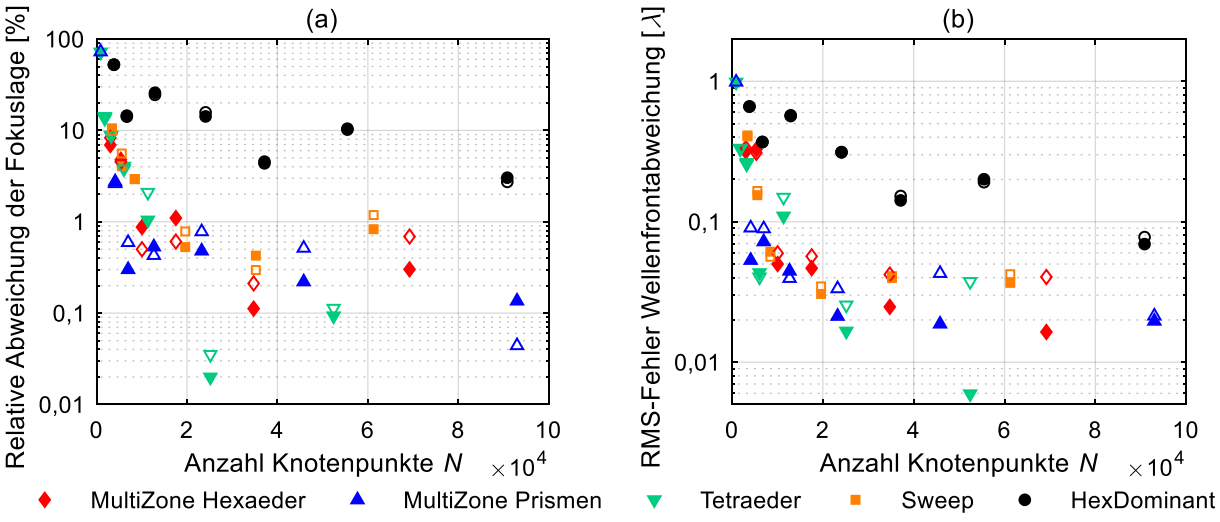


Bild 25: Relative Abweichung der Fokuslage (a) und RMS Fehler der Wellenfrontabweichung (b) bei Verwendung des MBA-Algorithmus mit Level 5. Die Umrisssymbole zeigen die Ergebnisse für fehlerbehaftete Eingangsdaten mit 0,5 % normalverteiltem Rauschen.

Zusammenfassend lässt sich feststellen, dass beim WLS-Algorithmus im Fall fehlerbehafteter Eingangsdaten die Gewichtungsfunktion *Interpolant* der Funktion *Wendland2* vorzuziehen ist. Die genauste Rekonstruktion der Wellenfront wird bei Verwendung des MBA-Algorithmus erzielt. Dies deckt sich mit den Ergebnissen aus Abschnitt 3.4.3. Die Analysen zeigen

außerdem, dass die relative Abweichung der Fokuslage mit Ausnahme des Netztyps HexDominant in allen Fällen kleiner ~3 % ist, sofern > 18000 Knotenpunkte vorliegen. Dies entspricht bei einem Volumen des Testzylinders von 5067 mm^3 mindestens 3,6 Knotenpunkten/mm^3. Da Parameter wie beispielsweise der Absorptionsgrad von optischen Vergütungen eine deutlich größere Unsicherheit in die thermooptische Simulation einbringen, können die Approximationsalgorithmen als geeignet betrachtet werden. Als bevorzugter Netztyp ist MultiZone zu nennen, da dieser ein gleichmäßiges Netz über das gesamte Volumen ergibt. Dies ist von Vorteil, da so eine hinreichend genaue Auflösung der thermischen Last sowohl auf den Oberflächen als auch im Volumen sichergestellt werden kann.

3.6 Gleichzeitige Berücksichtigung thermischer und dispersiver Effekte

Für die gleichzeitige Analyse von thermischen und dispersiven Effekten in optischen Systemen wird ein multiphysikalischer Simulationsansatz erarbeitet. Dazu werden eine thermomechanische FEA und eine optische Analyse auf der Basis von strahlen- und wellenoptischen Methoden gekoppelt. Im Anschluss werden die Simulationsergebnisse ausgewertet, um die Fokuslage, den Fokusdurchmesser und die Strahlqualität zu bestimmen.

3.6.1 Multiphysikalischer Simulationsansatz

Der Inhalt dieses Abschnitts wurde teilweise bereits in [108] veröffentlicht. Die Vorgehensweise des multiphysikalischen Simulationsansatzes ist in Bild 26 dargestellt. Neben der Analyse von ultrakurzen Laserpulsen eignet sich dieser Ansatz zur Berechnung der Intensitätsverteilung in der Fokusregion von thermisch belasteten Optiken bei kontinuierlicher und somit monochromatischer Laserstrahlung. Am Anfang der Simulationskette steht ein strahlenoptisches Modell des zu analysierenden optischen Systems im Ray-Tracing-Programm *OpticStudio*. Die sich daran anschließende thermomechanische FEA wird unter Anwendung der in den Abschnitten 3.1 und 3.2 beschriebenen Methoden durchgeführt. Die resultierenden disktreten Daten für Temperatur und Oberflächendeformation werden mittels *TOP Simulation* approximiert und über DLLs an das Ray-Tracing Programm übergeben. Sofern die erforderlichen Materialdaten vorliegen, wird das Modell in Formel **2.5** für die Berechnung des temperatur- und wellenlängenabhängigen Brechungsindex verwendet, andernfalls das Modell gemäß Formel **2.3**.

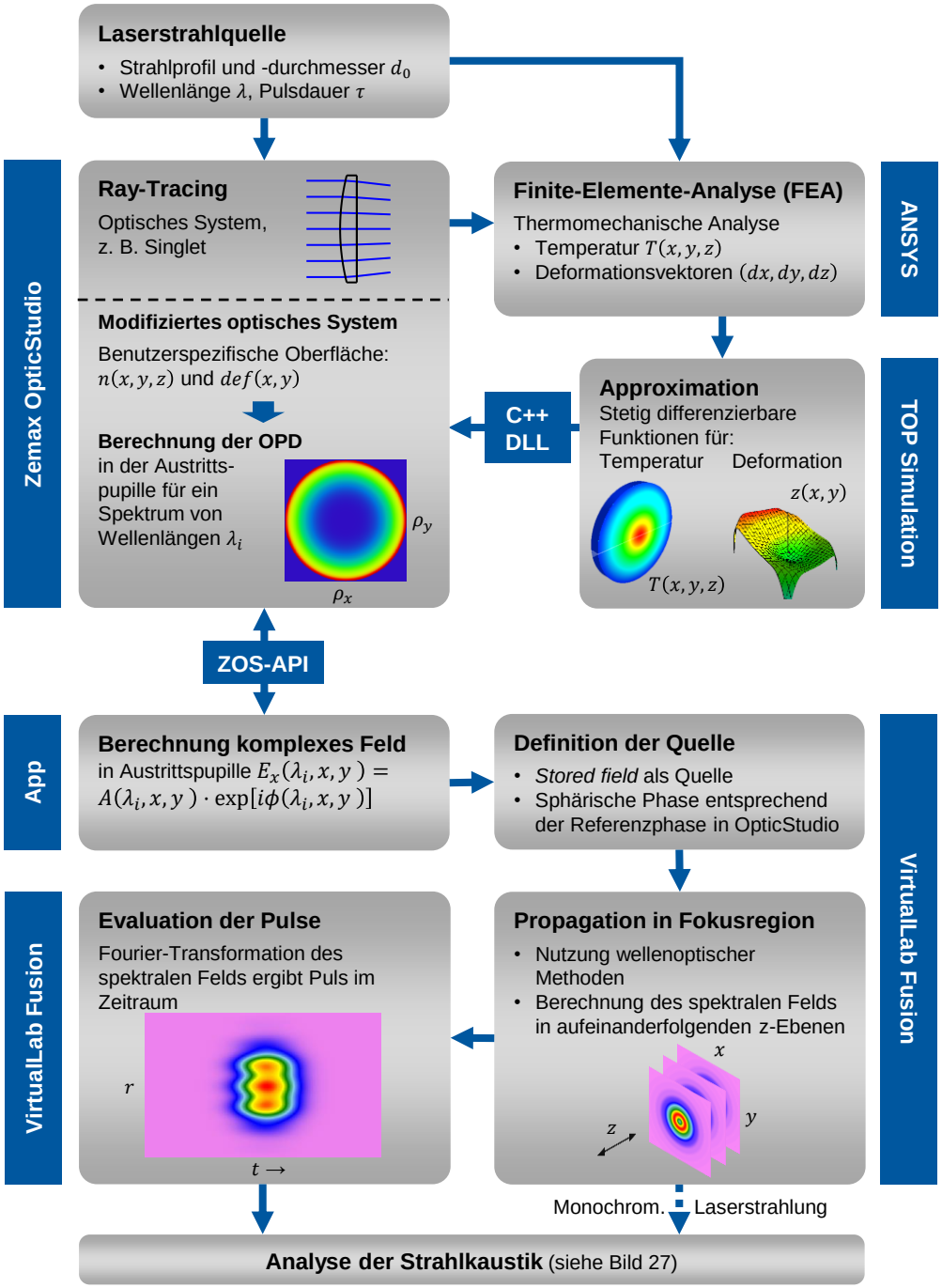


Bild 26: Vorgehensweise des multiphysikalischen Simulationsansatzes zur gleichzeitigen Analyse von thermischen und dispersiven Effekten in optischen Systemen.
Bild erstellt basierend auf [108].

Eine direkte Weitergabe der approximierten Funktionen für das Brechungsindexprofil und die Oberflächendeformation an *VirtualLab Fusion* unterliegt folgenden Einschränkungen [25]: In der Programmversion 7 ermöglicht die *Inhomogeneous Medium Component* (in Version 6 als *Double Interface Component* bezeichnet) zwar die Definition eines benutzerspezifischen Brechungsindexprofils $n(x,y,z)$ für das Volumen sowie einer benutzerspezifischen Oberflächenform $z(x,y)$ für die Vorder- und Rückseite. Bei Verwendung des *Classic Field Tracing*[6] ist die Berech-

[6] Das *Classic Field Tracing* ermöglicht u. a. die Nutzung des rigorosen Spektrum-ebener-Wellen-Propagationsoperators (engl. *Spectrum of Plane Waves*, SPW).

nung jedoch auf paraxiale Systeme und plane Substrate, die nur eine geringe Deformation aufweisen, beschränkt. Der Grund ist, dass die verwendete *Split-Step-Beam-Propagation*-Methode nur für Medien mit kleinen Brechungsindexvariationen und paraxialen Bedingungen gültig ist [68, 114]. Darüber hinaus wird die Brechung an den Oberflächen mit der *Thin Element Approximation* berechnet, die ebenfalls paraxiale Bedingungen erfordert [114].

Da die in Abschnitt 5.3 analysierten optischen Systeme nicht paraxial betrachtet werden können, wird in dieser Arbeit eine Kombination aus Ray-Tracing und wellenoptischen Methoden eingesetzt [108]. Dieser Ansatz wurde bereits von Fuchs et al. im Jahr 2005 verwendet, um die Propagation ultrakurzer Pulse durch dispersive optische Elemente zu simulieren [115, 116]. Die Propagation ultrakurzer Laserpulse kann durch Zerlegen des komplexen elektrischen Felds in seine spektralen Anteile und deren Propagation berechnet werden [96]. In der Zielebene wird das komplexe Feld durch Superposition der spektralen Anteile und einer inversen Fourier-Transformation rekonstruiert. Für einen bandbreitebegrenzten gaußförmigen Puls mit der Pulsdauer τ (definiert als Halbwertsbreite) ist die spektrale Amplitude durch

3.12
$$A_0(\nu) = \exp\left[-2\ln(2)\left(\frac{\nu-\nu_0}{\Delta\nu}\right)^2\right], \qquad \Delta\nu = \frac{2\ln(2)}{\pi}\cdot\frac{1}{\tau} \approx \frac{0{,}441}{\tau}$$

gegeben. Die Propagation von der Eintrittspupille des optischen Systems in die Austrittspupille bei z_{ex} erfolgt mittels Ray-Tracing. Für ein diskretes Spektrum von Wellenlängen λ_i wird das komplexe elektrische Feld in der Austrittspupille gemäß

3.13
$$E_x(\lambda_i, x, y, z_{ex}) = A(\lambda_i, x, y, z_{ex}) \cdot \exp[i\phi(\lambda_i, x, y, z_{ex})]$$

berechnet. Das Feld setzt sich aus der spektralen Amplitude $A(\lambda_i, x, y, z_{ex})$ und der spektralen Phase $\phi(\lambda_i, x, y, z_{ex})$ zusammen. Dabei wird linear in x-Richtung polarisiertes Licht angenommen. Folglich gilt für die y-Komponente des Felds $E_y = 0$. Zudem wird die z-Komponente E_z vernachlässigt, da das elektrische Feld relativ zur Referenzsphäre in der Austrittspupille berechnet wird. Folglich ist E_z etwa drei Größenordnungen kleiner als E_x. Dies gilt unabhängig von der numerischen Apertur des optischen Systems, solange die auftretenden Aberrationen nicht zu groß sind.

Die spektrale Phase wird auf Basis der optischen Weglängendifferenz (engl. *optical path difference*, OPD) berechnet. In *OpticStudio* wird die OPD relativ zur Referenzsphäre in der Austrittspupille angegeben. Dabei entspricht der Radius der Referenzsphäre dem Abstand der Austrittspupille vom paraxialen Fokus. Mithilfe einer C++ Anwendung auf Basis der Schnittstelle ZOS-API (*Zemax OpticStudio Application Programming Interface*) wird die OPD für das Spektrum an Wellenlängen automatisiert extrahiert. Die resultierende spektrale Phase in der Austrittspupille ist durch

3.14

$$\phi(\lambda_i, x, y, z_{ex}) = \frac{2\pi}{\lambda} OPD(\lambda_i, x, y, z_{ex}) + \phi_{Offset}(\lambda_i, z_{ex})$$

gegeben. Das Phasenoffset wird durch Dispersion hervorgerufen und folgt aus der Differenz der optischen Wege des Hauptstrahls für die Wellenlänge λ_i relativ zum optischen Weg für die Zentralwellenlänge λ_0. Aufgrund der Berechnung der spektralen Phase relativ zur Referenzphase ist der Spitze-zu-Tal-Wert der Phase typischerweise $< 10\pi$, sodass eine laterale Auflösung von 256x256 Punkten für die OPD ausreicht, um die spektrale Phase und damit das komplexe Feld E_x exakt aufzulösen.

Die C++ Anwendung extrahiert zudem den Strahldurchmesser d_i in der Austrittspupille für alle Wellenlängen. Die spektrale Amplitude wird gemäß

3.15

$$A(\lambda_i, x, y, z_{ex}) = A_0(\lambda_i) \cdot \exp\left[-4\left(\frac{x^2 + y^2}{d_i}\right)^2\right]$$

berechnet, wobei die Amplitude A_0 nach Formel **3.12** berechnet wird. Eine notwendige Annahme ist, dass die laterale Form der spektralen Amplitude in der Eintritts- und Austrittspupille übereinstimmt und lediglich der Strahldurchmesser d_i abweicht. Wie von Fuchs et al. dargestellt, ist diese Annahme plausibel [116]. Die gemäß Formel **3.13** ermittelten komplexen Felddaten werden schließlich in Form von Textdateien exportiert.

Mit Hilfe einer benutzerspezifischen Erweiterung werden die komplexen Felder $E_x(\lambda_i, x, y, z_{ex})$ in *VirtualLab Fusion* geladen und zu einem sogenannten Set harmonischer Felder (engl. *Harmonic Field Set*, HFS) kombiniert. Das HFS wird einer Quelle vom Typ *Stored Field* zugeordnet. Um die fehlende Referenzphase zu kompensieren, wird auf alle Felder eine sphärische Phase angewendet. Deren Radius entspricht dem der Referenzphase in der Austrittspupille. Für die Propagation des Felds in die Fokusregion wird der Fernfeld-Operator (engl. *Far Field Operator*) verwendet. Falls der Fehler durch die Näherung > 1 % sein sollte, wird der rigorose Spektrum-ebener-Wellen-Propagationsoperator (engl. *Spectrum of Plane Waves*, SPW) verwendet. Dieser Operator unterliegt keinen Näherungen, ist jedoch sehr rechenintensiv.

Wie in Abschnitt 2.3.2 dargestellt, verfügt *VirtualLab Fusion* seit Programmversion 7 über den *2nd-Generation-Field-Tracing*-Operator[7]. Hierbei entfällt die Einschränkung auf paraxiale Strahlpropagation in Medien mit inhomogenem Brechungsindexprofil. Daher könnten die approximierten Funktionen für das temperaturabhängige Brechungsindexprofil sowie die Oberflächendeformationen direkt mittels benutzerspezifischer DLLs an *VirtualLab Fusion* übergeben werden (vgl. Bild 63 im Anhang

[7] Der *2nd-Generation-Field-Tracing*-Operator bietet dem Anwender keine Kontrolle bzw. Rückmeldung über die verwendete Auflösung bei der Propagation des Felds.

8.8). Für die Analysen in dieser Arbeit wird jedoch der hier beschriebene Ansatz verwendet, der in Teilen bereits vor der Veröffentlichung von Version 7 erarbeitet wurde.

3.6.2 Auswertung der Strahlkaustik

Die verwendeten Methoden zur Analyse der Strahlkaustik sind schematisch in Bild 27 dargestellt und können sowohl auf monochromatische Laserstrahlung als auch auf ultrakurze Laserpulse angewendet werden.

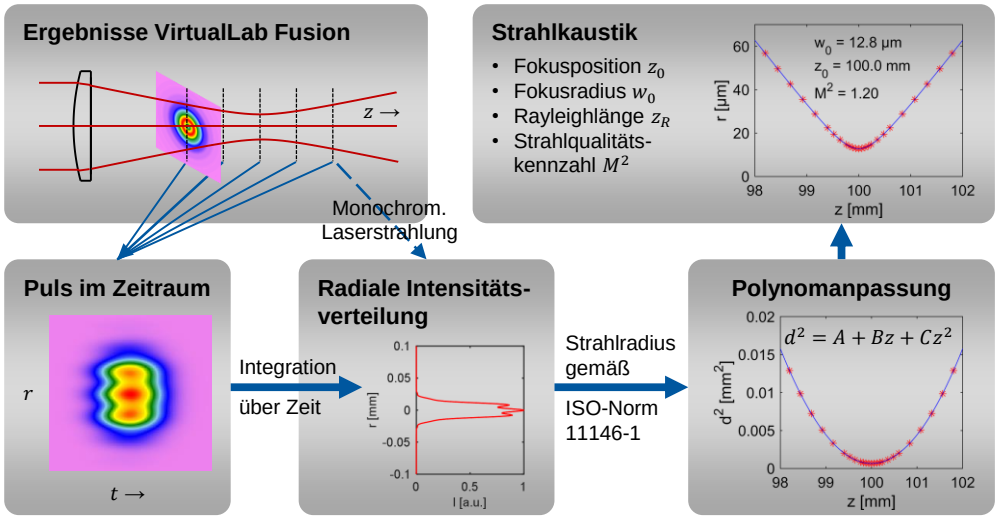


Bild 27: Vorgehensweise zur Bestimmung der Strahlkaustik und davon abgeleiteter Parameter.

Die ISO-Norm 11146-1 [72] fordert die Analyse des Intensitätsprofils in mindestens fünf Ebenen innerhalb einer Rayleighlänge um den Fokus sowie in mindestens fünf weiteren Ebenen außerhalb von zwei Rayleighlängen. Mithilfe des sogenannten *Parameter Run* in *VirtualLab Fusion* wird das komplexe Feld in mehreren aufeinanderfolgenden Ebenen in Propagationsrichtung berechnet. Im Folgenden werden 25 Ebenen verwendet, die über einen Bereich von etwa $-3z_R$ bis $+3z_R$ um die Fokuslage verteilt sind. Um die Fokuslage und den Fokusradius präzise bestimmen zu können, wird innerhalb einer Rayleighlänge um die Strahltaille ein geringerer Abstand der Ebenen gewählt (vgl. Bild 27).

Aus der spektralen Amplitude folgen mittels einer inversen Fourier-Transformation die Pulse im Zeitraum. Um das Verfahren der Momente zweiter Ordnung zur Berechnung des Strahlradius auf ultrakurze Laserpulse anwenden zu können, wird die Intensitätsverteilung zunächst entlang der Zeitkoordinate t integriert und normiert. Dabei wird ein Zeitfenster von $\pm 10\,\tau$ um den Schwerpunkt des Pulses gewählt. Dieses Vorgehen entspricht der zeitlichen Integration eines ultrakurzen Laserpulses durch den Bildsensor eines Strahldiagnosegeräts. Es folgt die radiale Intensitätsverteilung $I(r, z)$. Im Fall monochromatischer Laserstrahlung wird die radiale Intensitätsverteilung direkt für die z-Ebenen extrahiert.

Da als Anwendungsbeispiele (vgl. Abschnitt 5.3) ausschließlich rotationssymmetrische Systeme betrachtet werden, ist die Analyse der radialen Intensitätsverteilung ausreichend. Der Schwerpunkt einer rotationssymmetrischen Intensitätsverteilung liegt bei $r = 0$. Folglich ist das erste Moment $\langle r \rangle$ gleich null. Das zweite Moment der Intensitätsverteilung $\langle r^2 \rangle$ wird gemäß

3.16
$$\langle r^2(z) \rangle = \frac{1}{2} \frac{\sum_i r_i^3 I(r_i, z)}{\sum_i r_i I(r_i, z)}$$

aus den diskreten Daten berechnet. Die Herleitung von Gleichung **3.16** auf Basis der Definition des zweiten Moments gemäß der ISO-Norm 11146-1 findet sich im Anhang 8.9. Strahldurchmesser und -radius betragen

3.17
$$d(z) = \frac{w(z)}{2} = 4\sqrt{\langle r^2(z) \rangle}.$$

Um den Einfluss numerischer Ungenauigkeiten, insbesondere durch den Untergrund, auf die Berechnung des Strahldurchmessers zu reduzieren bzw. zu vereinheitlichen, wird der Strahldurchmesser iterativ berechnet. Zunächst werden die gesamten Daten für $I(r, z)$ verwendet. Ab dem zweiten Iterationsschritt wird nur der radiale Bereich von $\pm 3w$ um den Schwerpunkt $\langle r \rangle = 0$ berücksichtigt. Insgesamt werden fünf Iterationsschritte durchlaufen. Für die Änderung des Strahldurchmessers in Propagationsrichtung gilt [117]

3.18
$$d^2(z) = d_0^2 + (z - z_0)^2 \theta^2 = A + Bz + Cz^2,$$

wobei z_0 die Fokuslage und θ der Divergenzwinkel (Vollwinkel) sind. Durch Anpassung eines Polynoms von Grad zwei folgen aus den angepassten Koeffizienten A, B und C die gesuchten Größen zu [117]

3.19
$$z_0 = -\frac{B}{2C},$$
$$d_0 = \frac{w_0}{2} = \sqrt{A - \frac{B^2}{4C}},$$
$$\theta = \sqrt{C}.$$

Für die Strahlqualitätskennzahl M^2 und die Rayleighlänge gilt:

3.20
$$M^2 = \frac{w_0 \theta}{2} \frac{\pi}{\lambda},$$
$$z_R = \frac{\pi w_0^2}{\lambda}.$$

Bei der Polynomanpassung wird der relative Fehler zwischen dem simulierten, quadratischen Strahldurchmesser d^2 und dem Modell (Formel **3.18**) minimiert.

Der erarbeitete multiphysikalische Simulationsansatz ermöglicht die Analyse von ultrakurzen Laserpulsen in thermisch belasteten optischen Systemen unter Berücksichtigung dispersiver und thermischer Effekte. Anwendung findet dieser Ansatz bei der Analyse von Fokussieroptiken zur Erzeugung hoher Harmonischer (vgl. Abschnitt 5.3).

3.7 Transiente Analyse und thermische Lastfälle

Um unterschiedliche thermische Lastfälle, beispielsweise verschiedene Laserleistungen oder Scanwinkel, sowie das transiente thermooptische Verhalten eines optischen Systems effizient analysieren zu können, wird die Schnittstellensoftware *TOP Simulation* funktionell erweitert und teilweise automatisiert. Dazu wird ein zusätzlicher Parameter *Step* eingeführt, der die Zuordnung von bis zu 99 unterschiedlichen Temperatur- und damit Brechungsindexprofilen sowie Oberflächendeformationen zu einer optischen Oberfläche ermöglicht. Die approximierten Daten werden in einer Datei abgespeichert. Die benutzerdefinierten DLLs zur Definition von Brechungsindexprofil und Oberflächendeformation in *OpticStudio* lesen diese Datei ein. Durch die Eingabe des Parameters *Step* direkt in *OpticStudio* kann zwischen den Zeitschritten bzw. Lastfällen gewechselt werden. Auf diese Weise können die optischen Eigenschaften direkt verglichen werden, z. B. relativ zum thermisch nicht belasteten Zustand des optischen Systems.

4 Experimentelle Methoden

In diesem Kapitel werden die zur Charakterisierung thermisch belasteter optischer Systeme verwendeten experimentellen Methoden vorgestellt. Zu diesen Methoden zählen die photothermale Common-Path-Interferometrie, Thermografie sowie die Bestimmung der Fokuslage mit einem Strahldiagnosegerät oder einem Hartmann-Shack-Sensor. Außerdem werden die verwendeten experimentellen Aufbauten und Versuchsdurchführungen dargelegt.

4.1 Photothermale Common-Path-Interferometrie

Die photothermale Common-Path-Interferometrie (PCI) zählt zu den photothermalen Messverfahren und ermöglicht die ortsaufgelöste Messung des Volumenabsorptionskoeffizienten optischer Materialien sowie des Absorptionsgrads optischer Vergütungen. Das Messprinzip wird in Abschnitt 2.5.2 beschrieben.

Mit dem am Fraunhofer ILT zur Verfügung stehenden Interferometer werden zwei Planplatten aus Quarzglas (Corning C79-80 bzw. Heraeus Suprasil 3001) charakterisiert. Die Planplatten sind mit einer AR-Beschichtung[8] vergütet, die mittels Ionenstrahlsputtern (engl. *ion beam sputtering,* IBS) aufgebracht wurde. Die Materialien und AR-Beschichtungen entsprechen denen von Linsensatz 2 und 3 der variablen Fokussieroptik, die im Folgenden analysiert werden (vgl. Abschnitt 5.1.1). Der Beschichtungsvorgang der Planplatten erfolgte gemeinsam mit den Linsen.

Die Planplatten weisen eine Dicke von 12 mm auf. So ist gewährleistet, dass zwischen der Absorption von Laserstrahlung im Volumenmaterial und in der AR-Beschichtung von Vorder- bzw. Rückseite unterschieden werden kann. Bei Probendicken kleiner ca. 6 mm würden sich die Messsignale gegenseitig beeinflussen. Die Wellenlänge des Pumplasers beträgt 1030 nm und weicht damit um 40 nm von der Wellenlänge der in den folgenden Versuchen verwendeten Laserstrahlquellen ab[9]. Als mittlere Pumpleistung werden 5 W bis 7 W verwendet.

Der Volumenabsorptionskoeffizient α_{abs} und der Absorptionsgrad an der Oberfläche α_{Coat} werden jeweils über eine Fläche von 1,5x1,5 mm² mit einer lateralen Auflösung von 50 µm gemessen. Die Messungen erfolgen

[8] Die AR-Beschichtung ist für die Wellenlängen 808 nm, 1070 nm sowie den Bereich von 1500 nm bis 1700 nm, jeweils bei 0° Einfallswinkel, ausgelegt.

[9] Aufgrund regelmäßig am PCI-Messplatz stattfindender Charakterisierungen von Laserkristallen bei 1030 nm Wellenlänge war ein Austausch des Pumplasers gegen einen mit 1070 nm Wellenlänge nicht möglich.

relativ zu einem Volumen- bzw. Oberflächen-Kalibrationsnormal. Zur Abschätzung der statistischen Messunsicherheit werden die Messwerte für α_{abs} und α_{Coat} über die Messfläche gemittelt sowie die Standardabweichung gebildet.

4.2 Thermografie

Thermografie basiert auf der Detektion der emittierten Wärmestrahlung eines Körpers, i. d. R. im Spektralbereich von 2 µm bis 5 µm, und der Zuordnung einer entsprechenden Temperatur. Das Emissionsspektrum realer Körper weicht von dem eines idealen Schwarzen Strahlers ab. Die emittierte Strahlungsleistung wird durch das Stefan-Boltzmann-Gesetz [106]

4.1

$$P_S = \varepsilon(T)\sigma A T^4$$

mit dem temperaturabhängigen Emissionsgrad $\varepsilon(T)$ beschrieben. Dabei sind σ die Stefan-Boltzmann-Konstante und A die Oberfläche des Körpers.

Um präzise Ergebnisse für die Oberflächentemperatur zu erhalten, wird der Emissionsgrad für verschiedene optische Materialien experimentell bestimmt und zur Kalibration der verwendeten Thermografiekamera (*ImageIR 8390* der Fa. Infratec) verwendet. Darüber hinaus fließen die Werte für $\varepsilon(T)$ als Materialparameter für die emittierte Wärmestrahlung in die thermomechanischen Analysen ein.

Der experimentelle Aufbau ist schematisch in Bild 28 dargestellt. Die optischen Elemente (Planplatten bzw. Linsen) werden in einem Ofen auf eine definierte Temperatur zwischen 50 °C und 125 °C erwärmt. Die Temperatur der optischen Elemente wird mit drei Platinmesswiderständen vom Typ Pt100, die auf der Unterseite appliziert werden, erfasst. Der Aufheizvorgang erstreckt sich über 15 min bis 30 min. Der zeitliche Temperaturgradient, der mit den Platinmesswiderständen ermittelt wird, ist zum Ende des Aufheizvorgangs < 0,25 °C/min. Eine Ausnahme bilden die Messungen bei 125 °C, wo der Gradient bis zu 0,47 °C/min beträgt. Die erwärmten optischen Elemente werden mit einer Linearachse von der Aufheizposition (I) zur Messposition (II) gefahren und unmittelbar danach in einem Thermografiebild erfasst.

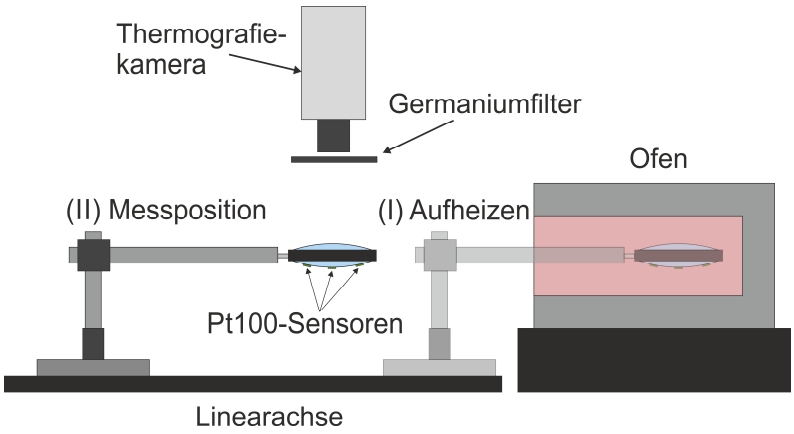


Bild 28: Schematische Darstellung der Versuchsanordnung zur Bestimmung des temperaturabhängigen Emissionsgrads.

Die Quarzgläser Corning C79-80 und Suprasil 3001 (jeweils AR-beschichtet) sowie das Glas N-BK7 (unbeschichtet sowie mit AR-Beschichtungen vom Typ B und Typ C der Fa. Thorlabs) werden bei den Temperaturen 50°C, 75°C, 100°C und 125°C charakterisiert. Aus der gemittelten Temperatur der drei Messwiderstände T_{Pt100} und der von der Thermografiekamera ausgegebenen Temperatur T_{Kamera} folgt der Emissionsgrad $\varepsilon(T)$ der Materialien gemäß

4.2

$$\varepsilon = \left(\frac{T_{Kamera}}{T_{Pt100}}\right)^4 .$$

Die Temperaturen sind in Formel **4.2** in der Einheit Kelvin einzusetzen. Die erfassten Thermografiedaten werden gemäß

4.3

$$T_{korr} = \sqrt[4]{\varepsilon} \cdot T_{Kamera}$$

korrigiert.

Die Kalibration der Thermografiedaten der Kunststofflinse aus PMMA wird wie folgt vorgenommen: Die Linse wird im Ofen auf 50 °C erwärmt und unmittelbar nach dem Herausholen aus dem Ofen ein Thermografiebild aufgenommen. Die Temperatur der Linse wird mit einem Pt100-Sensor ermittelt. Der Sensor ist auf ein 10x10 mm² großes Kupferplättchen aufgeklebt, welches auf die plane Rückseite der Linse appliziert wird. Die Messung wird bei Raumtemperatur wiederholt. Bei der Kalibration der Thermografiedaten wird linear zwischen den Kalibrationspunkten bei 20 °C und 50 °C interpoliert.

4.3 Bestimmung von Fokuslage und -verschiebung

Zur experimentellen Bestimmung der Fokuslage der variablen Fokussieroptik sowie der asphärischen Linse aus PMMA werden folgende Messgeräte eingesetzt:

Variable Fokussieroptik

Zur Bestimmung der Fokuslage im thermischen Gleichgewicht wird das Strahldiagnosegerät *HighPower-MicroSpotMonitor-HighBrilliance* der Fa. Primes verwendet. Dieses ermöglicht die Charakterisierung von Grundmode-Laserstrahlung bei bis zu 10 kW mittlerer Leistung. Weitere Informationen zum Messprinzip finden sich in Abschnitt 2.4.1. Mit dem Messgerät wird die Intensitätsverteilung in 21 Ebenen entlang der Propagationsrichtung des Laserstrahls erfasst. Die Berechnung der Strahlradien erfolgt nach dem Verfahren der Momente zweiter Ordnung (ISO-Norm 11146). Dazu wird die *LaserDiagnoseSoftware* der Fa. Primes verwendet, welche an die Messdaten Strahlkaustiken anpasst. Aus den Messungen bei verschiedenen Leistungen folgt die Fokusverschiebung in Abhängigkeit von der Laserleistung.

Asphäre aus PMMA

Zur Charakterisierung der asphärischen Linse aus PMMA wird das Strahldiagnosegerät *MicroSpotMonitor* der Fa. Primes verwendet. Das Messprinzip entspricht dem der High-Power-Variante. Abweichend von der Charakterisierung der variablen Fokussieroptik werden jeweils 25 Messebenen entlang der Propagationsrichtung des Laserstrahls verwendet.

Darüber hinaus wird ein Hartmann-Shack-Sensor eingesetzt, um das transiente Verhalten der Wellenfront zu bestimmen. Die Laserstrahlung wird mit zwei AR-beschichteten Keilplatten sowie Neutraldichtefiltern soweit abgeschwächt, dass der Sensor im Strahlengang platziert werden kann. Der eingesetzte Hartmann-Shack-Sensor (*WFS20-5C* der Fa. Thorlabs) ermöglicht Messungen mit etwa 30 Hz bei einer Auflösung der Wellenfront von 35x35 Pixeln. An die erfasste Wellenfront werden Zernike-Polynome bis zur Ordnung 15 angepasst (vgl. Bild 29). Das Polynom Z5 ist proportional zur Defokussierung, Z13 ist proportional zur sphärischen Aberration. Die Zernike-Koeffizienten sowie weitere Messdaten werden mit einer eigens entwickelten Programmerweiterung als Funktion der Zeit erfasst und zur weiteren Auswertung abgespeichert.

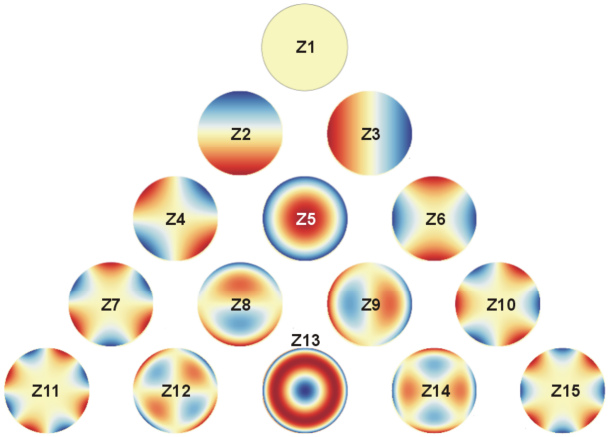


Bild 29: Übersicht über die an die Wellenfront angepassten Zernike-Polynome [118].

Aus dem Spitze-Tal-Wert der Wellenfront WF_{PV} und dem Pupillendurchmesser d_P folgt der Krümmungsradius der Wellenfront zu [118]

4.4
$$R_{WF} = \frac{d_P^2}{8WF_{PV}} + \frac{WF_{PV}}{2}.$$

Die transiente Fokusverschiebung wird gemäß

4.5
$$\Delta f(t) = R_{WF}(t = 0) - R_{WF}(t)$$

aus der zeitlichen Veränderung des Krümmungsradius berechnet. Da der Hartmann-Shack-Sensor hinter dem Fokus positioniert ist (vgl. Abschnitt 4.4.2), entspricht eine Verringerung des Krümmungsradius einer positiven Fokusverschiebung.

4.4 Versuchsaufbau und -durchführung

Im Folgenden werden die Versuchsaufbauten zur experimentellen Charakterisierung der variablen Fokussieroptik sowie der PMMA-Asphäre vorgestellt und die zentralen Aspekte der Versuchsdurchführung erklärt.

4.4.1 Charakterisierung der variablen Fokussieroptik

Die untersuchte variable Fokussieroptik besteht aus zwei Linsen, die in einer kommerziell verfügbaren Mechanik gehaltert werden. Über eine Steuerung werden die Linsen auf einen definierten Abstand von 67,5 mm zueinander positioniert. Es werden drei unterschiedliche Linsensätze charakterisiert (vgl. Tabelle 6 in Abschnitt 5.1.1).

Als Basis für die indirekte Bestimmung des Absorptionsgrads der AR-Beschichtungen sowie des Wärmeübergangs zwischen Linse und Halterung wird die Oberflächentemperatur der Rückseite der zweiten Linse mittels Thermografie gemessen. Der verwendete Versuchsaufbau ist in Bild 30 (a) schematisch dargestellt. Die Detektion der Wärmestrahlung erfolgt unter einem kleinen Winkel von etwa 5° mithilfe eines Silberspiegels. Eventuell auftretende gestreute Laserstrahlung wird mit einem Germaniumfilter geblockt. Als Strahlquelle wird ein 5-kW-Faserlaser mit 1070 nm Wellenlänge und einem gaußförmigen Intensitätsprofil eingesetzt. Für die Analysen wird eine Laserleistung von 2 kW verwendet. Der transiente Temperaturverlauf der Linsenrückseite wird über eine 180-sekündige Aufwärmphase bei Bestrahlung mit dem Laser und eine anschließende 300-sekündige Abkühlphase aufgezeichnet. Die Bildrate beträgt 2 Hz. Die so erhaltenen Temperaturdaten werden mit einem Emissionsgrad von $\varepsilon = 0{,}85$ korrigiert und mit den Simulationsergebnissen verglichen (vgl. Abschnitt 5.1.1, Bild 35).

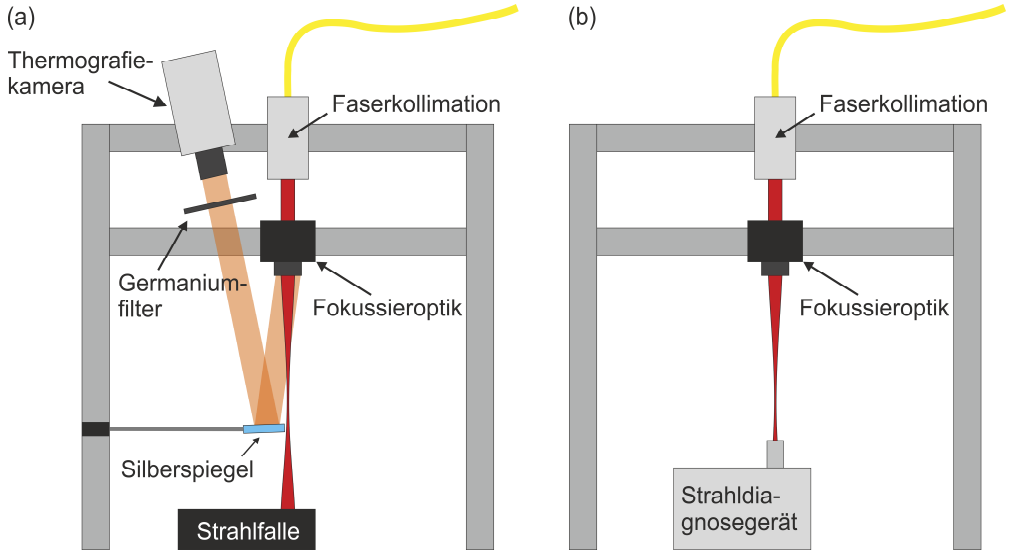


Bild 30: Schematische Darstellung der Versuchsaufbauten zur Charakterisierung der variablen Fokussieroptik.

In einer zweiten Messreihe wird die Fokuslage in Abhängigkeit von der Laserleistung bestimmt (vgl. Bild 30 b). Die verwendete Strahlquelle ist ein 4-kW-Faserlaser mit homogener Intensitätsverteilung im Rohstrahl[10]. Die Wellenlänge beträgt 1070 nm. Für die drei Linsensätze werden die Strahlkaustiken im thermischen Gleichgewicht, das sich etwa 240 s nach Einschalten des Lasers einstellt, mit dem Strahldiagnosegerät gemessen. Die Laserleistung wird zwischen 200 W und 4 kW variiert. Die Messergebnisse werden anschließend mit den Simulationsergebnissen verglichen (vgl. Abschnitt 5.1.1, Bild 36), um eventuelle Abweichungen zu identifizieren.

4.4.2 Charakterisierung der Kunststofflinse

Die asphärische Kunststofflinse aus PMMA (Artikel 48-172 der Fa. Edmund Optics) wird mit Hilfe eines kommerziellen Linsenhalters (LM1XY/M der Fa. Thorlabs) positioniert. Ein seitlich am Halter angebrachter Platinmesswiderstand (Typ Pt100) erfasst die Temperatur des Halters. So wird ermittelt, ob sich der Halter während der Messreihe erwärmt. Die Temperaturdaten fließen als thermische Randbedingung in die FEA ein (vgl. Abschnitt 5.2.1). Darüber hinaus wird die Oberflächentemperatur der Linsenvorderseite mittels Thermografie gemessen. Hierzu wird die Wärmestrahlung mit einem Silberspiegel zur Thermografiekamera gelenkt. Die Bildrate beträgt 10 Hz. Der Versuchsaufbau ist in Bild 31 schematisch dargestellt. Als Strahlquelle wird ein Faserlaser mit gaußförmigem Strahlprofil und einer Wellenlänge von 1064 nm verwendet. Der Strahldurchmesser beträgt auf der Linse 5,5 mm. Die Laserleistung wird zwischen 1 W und 10 W variiert.

[10] Zum Zeitpunkt als die zweite Messreihe durchgeführt wurde stand der 5-kW-Faserlaser mit gaußförmigen Intensitätsprofil nicht zur Verfügung.

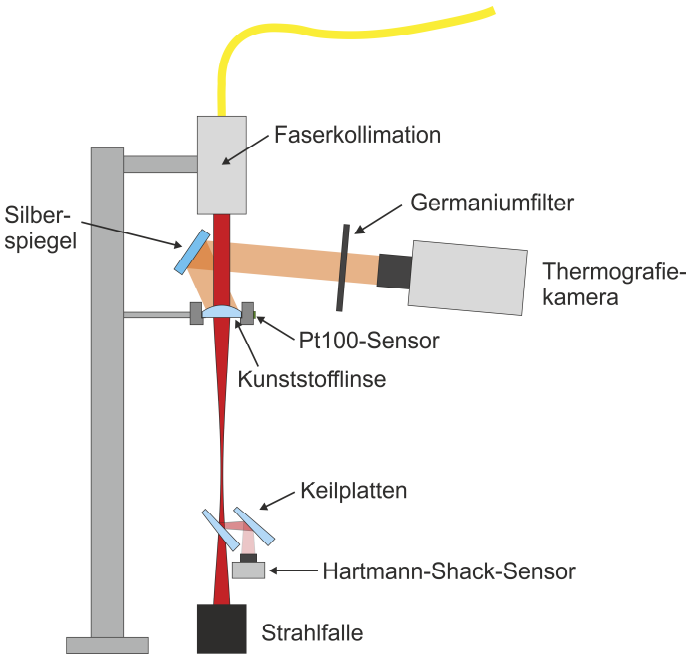


Bild 31: Schematische Darstellung des Versuchsaufbaus zur Bestimmung der transienten Fokusverschiebung einer Kunststofflinse.

Für jede Laserleistung werden der transiente Verlauf der Fokuslage mit dem Hartmann-Shack-Sensor gemessen sowie der Aufwärm- und Abkühlvorgang der Linse mit der Thermografiekamera erfasst. Um die Geräte zu synchronisieren, wird eine eigens gebaute elektronische Schaltung verwendet. Diese gibt ein Triggersignal aus, das die Messung der Thermografiekamera startet. Mit 5 s Verzögerung werden der Laser eingeschaltet und zeitgleich die Messung des Hartmann-Shack-Sensors gestartet. Nach 180 s Bestrahlung der Kunststofflinse mit dem Laser wird dieser ausgeschaltet und die Messung des Hartmann-Shack-Sensors gestoppt. Die Temperatur wird für weitere 180 s mit der Thermografiekamera aufgezeichnet. Die gewonnenen Messdaten werden ausgewertet und mit den Simulationsergebnissen verglichen (vgl. Abschnitt 5.2.1). Durch einen Abgleich von gemessener und simulierter Temperatur wird der Volumenabsorptionskoeffizient von PMMA indirekt bestimmt. Außerdem wird die Zeitkonstante der transienten Fokusverschiebung durch eine Modellanpassung ermittelt.

In einer zweiten Messreihe wird die Fokuslage im thermischen Gleichgewicht in Abhängigkeit von der Laserleistung mit Hilfe des Strahldiagnosegeräts *MicroSpotMonitor* (vgl. Abschnitt 4.3) bestimmt.

5 Analyse und Auslegung von thermisch belasteten Optiken

Die in den Kapiteln 3 und 4 erarbeiteten simulativen und experimentellen Methoden werden im Folgenden zur Analyse von thermisch belasteten Optiken bei drei praxisrelevanten Anwendungen genutzt. Zunächst werden thermooptische Effekte beim SLM untersucht: zum einen der Einfluss einer variablen Fokussieroptik und zum anderen die transiente Fokusverschiebung durch ein kontaminiertes Schutzglas in Abhängigkeit von der Belichtungsreihenfolge und der Scanstrategie. Im zweiten Anwendungsfall wird eine asphärische Linse aus Kunststoff sowohl experimentell als auch simulativ hinsichtlich thermooptischer Effekte charakterisiert. Als ein Lösungsansatz zur passiven Kompensation der Fokusverschiebung sowie thermisch induzierter Aberrationen wird die Linsenform für einen definierten Betriebspunkt iterativ optimiert. Als dritter Anwendungsfall werden sowohl thermooptische als auch dispersive Effekte, die bei der Fokussierung ultrakurzer Laserpulse hoher mittlerer Leistung auftreten, mit Hilfe des multiphysikalischen Simulationsansatzes (vgl. Abschnitt 3.6) analysiert. Auf diese Weise werden chromatisch korrigierte und nicht korrigierte Fokussieroptiken auf ihre Eignung zur Erzeugung hoher Harmonischer untersucht.

5.1 Optiken für das Selective Laser Melting (SLM)

Im Folgenden werden thermooptische Effekte simuliert, die beim Selective Laser Melting (SLM) auftreten. Zunächst wird eine variable Fokussieroptik, die der Nachführung der Fokuslage in Abhängigkeit vom Scanwinkel dient, separat charakterisiert. Die Simulationsergebnisse werden mit Thermografie- sowie Strahlkaustikmessungen verglichen. Daran anschließend werden transiente thermooptische Effekte, die durch das Schutzglas hervorgerufen werden, in Abhängigkeit von der verwendeten Belichtungsreihenfolge sowie der Scanstrategie simulativ untersucht.

5.1.1 Variable Fokussieroptik

Die variable Fokussieroptik besteht aus zwei Linsen, einer Meniskuslinse mit negativer Brennweite und einer bikonvexen Linse (vgl. Bild 33). Für den gewählten Abstand der Linsen beträgt die effektive Brennweite 305 mm. Es werden drei unterschiedliche Linsensätze analysiert und verglichen. Linsensatz 1 und 2 sind aus dem Quarzglas Corning C79-80 gefertigt, Linsensatz 3 aus dem synthetischen Quarzglas Heraeus Suprasil 3001. Außerdem unterscheiden sich die Linsensätze hinsichtlich der AR-Beschichtung: Linsensatz 1 weist eine Standardbeschichtung auf, Linsensatz 2 und 3 eine mittels IBS aufgebrachte Beschichtung.

Bestimmung des Absorptionsgrads mittels PCI

Zunächst werden mittels photothermaler Common-Path-Interferometrie (PCI) der Volumenabsorptionskoeffizient α_{abs} und der Absorptionsgrad der AR-Beschichtung α_{Coat} von zwei Planplatten bei 1030 nm Wellenlänge gemessen (vgl. Abschnitt 4.1). Die Materialien und Beschichtungen entsprechen denen von Linsensatz 2 und 3. Die Messergebnisse sind in Tabelle 6 aufgeführt. Die Messunsicherheit folgt aus der Mittelung über die jeweilige Messfläche.

Tabelle 6: Mittels PCI gemessener Volumenabsorptionskoeffizient und Absorptionsgrad der AR-Beschichtung, jeweils bei 1030 nm Wellenlänge.

	Planplatte 1	Planplatte 2
Material	Corning C79-80	Heraeus Suprasil 3001
Material identisch mit	Linsensatz 1 & 2	Linsensatz 3
AR-Beschichtung identisch mit	Linsensatz 2	Linsensatz 3
α_{abs} [ppm/cm]	23 ± 3	< 1,0
α_{Coat} [ppm]	2,3 ± 0,3	1,0 ± 0,3

Die Empfindlichkeit der PCI reicht nicht aus, um den Volumenabsorptionskoeffizienten von Suprasil 3001 zu messen. Als obere Grenze wird $\alpha_{abs} < 1$ ppm/cm abgeschätzt. Die Messergebnisse für α_{abs} in Tabelle 6 decken sich mit den Literaturwerten in Tabelle 1. Die ermittelten Absorptionsgrade für die AR-Beschichtung der Planplatten liegen im niedrigen einstelligen ppm-Bereich.

Emissionsgrad unterschiedlicher optischer Materialien

Als Basis für die Kalibration der Thermografiemessungen wird der Emissionsgrad experimentell für die Quarzgläser der variablen Fokussieroptik (C79-80 und Suprasil 3001) ermittelt. Zum Vergleich wird außerdem das Glas N-BK7 (unbeschichtet sowie mit AR-Beschichtungen vom Typ B und Typ C der Fa. Thorlabs) analysiert. Die Vorgehensweise ist in Abschnitt 4.2 beschrieben.

Die resultierenden Emissionsgrade (vgl. Bild 32) betragen bei 50 °C 0,85 bis 0,88 und nehmen mit steigender Temperatur ab. Für die Quarzgläser beträgt der Emissionsgrad bei 125 °C etwa 0,76, für AR-beschichtetes N-BK7-Glas hingegen 0,81. Grund für die Abnahme des Emissionsgrads mit steigender Temperatur ist, dass sich das Maximum der Strahlungsintensität zu kleineren Wellenlängen verschiebt[11] und somit das Emissionsspektrum teilweise in den Spektralbereich reicht, in dem die Materialien transparent sind. Da Quarzglas bis ca. 3,5 µm transparent ist wohingegen N-BK7 ab etwa 2,7 µm intransparent ist, weist Quarzglas den geringeren Emissionsgrad auf.

[11] Das Maximum der Strahlungsintensität verschiebt sich gemäß dem Wienschen Verschiebungsgesetz von 9,0 µm bei einer Temperatur von 50 °C zu 7,3 µm bei 125 °C.

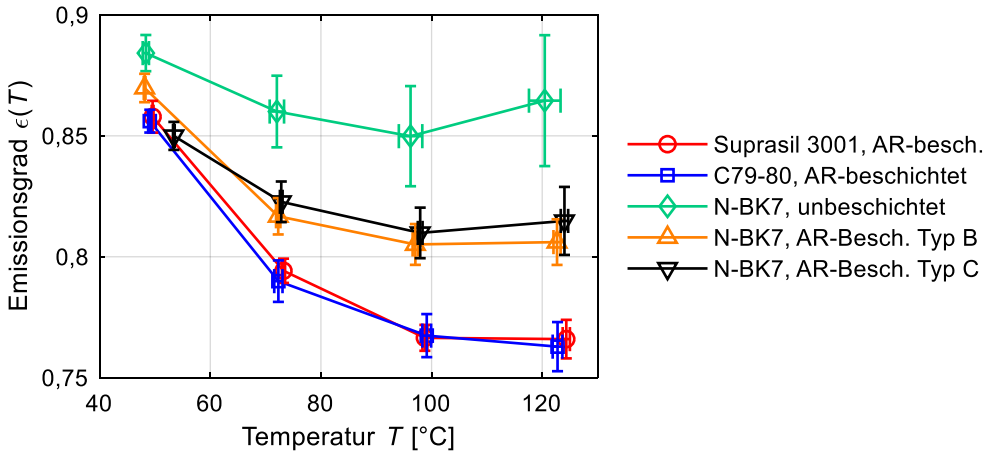


Bild 32: Emissionsgrad für verschiedene optische Materialien in Abhängigkeit von der Temperatur.

Im Folgenden wird für Quarzglas ein Emissionsgrad von 0,85 als Parameter für die emittierte Wärmestrahlung in den durchgeführten FEAs verwendet.

Indirekte Bestimmung von Absorptionsgrad und Wärmeübergang zwischen Linse und Halterung mittels Thermografie

Der Inhalt dieses Abschnitts wurde in Teilen bereits in [105] veröffentlicht. Die Temperatur der rückseitigen Oberfläche der bikonvexen Linse wird experimentell mittels Thermografie ermittelt. Die Vorgehensweise wird in den Abschnitten 4.2 und 4.4.1 beschrieben. Es kommt eine Laserstrahlquelle mit gaußförmigem Strahlprofil zum Einsatz. Der transiente Temperaturverlauf wird während der 180-sekündigen Aufwärmphase bei Bestrahlung mit dem Laser sowie der anschließenden 300-sekündigen Abkühlphase aufgezeichnet. Um die Messdaten mit den Simulationen vergleichen zu können, wird das Temperaturprofil in radialer Richtung, d. h. von der Linsenmitte zum Linsenrand, für alle Zeitschritte extrahiert. Die Meniskuslinse ist für die Thermografie wegen der Bauform der Optikhalterung nicht zugänglich.

Die bikonvexe Linse wird mit zwei Ringen in der Halterung der variablen Fokussieroptik fixiert (vgl. Bild 33). Die Ringe sind jeweils 0,5 mm breit. Die exakte Größe der Kontaktfläche zwischen den Ringen und der gekrümmten Linsenoberfläche ist unbekannt, bestimmt aber maßgeblich den Wärmeübergang zwischen Linse und Halter. Der Wärmeübergang zwischen der Linse und den Ringen wird daher indirekt über eine Variation des Wärmeübergangskoeffizienten in der FEA und einen Abgleich des zeitlichen Verlaufs von simulierter und gemessener Temperatur bestimmt. Dieses Vorgehen ist äquivalent zu einer Anpassung der Größe der Kontaktfläche zwischen der Linse und den Ringen. Analog kann der Absorptionsgrad der AR-Beschichtung indirekt ermittelt werden. In der FEA werden dazu beide Parameter gleichzeitig variiert, da der Absorptionsgrad der Beschichtung primär die Maximaltemperatur in der Linsenmitte beeinflusst und der Wärmeübergangskoeffizient zwischen Linse und Ringen in erster Linie den Temperaturverlauf am Linsenrand beein-

flusst. Da die Meniskuslinse eine deutlich größere Kontaktfläche zum Halter aufweist (vgl. Bild 33), wird angenommen, dass der Wärmeübergang korrekt in der FEA nachgebildet wird. In die FEA fließen außerdem die mittels Thermografie bestimmte Ausgangstemperatur der Fokussieroptik und die Umgebungstemperatur ein.

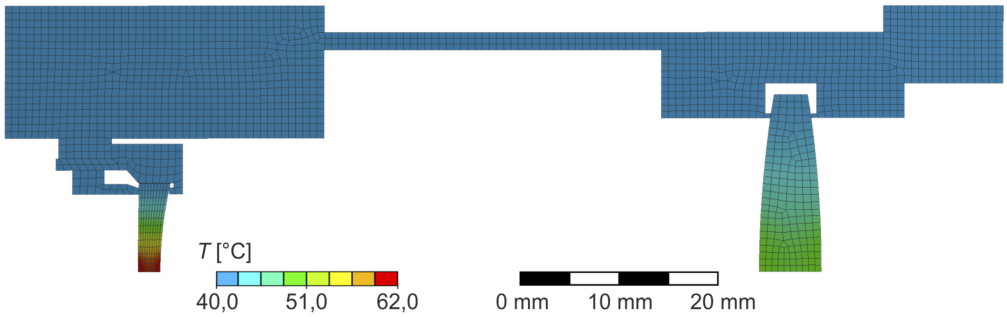


Bild 33: Simuliertes Temperaturprofil von Halter und Linsensatz 1 nach 180 s Bestrahlung mit 2 kW Laserleistung. Die Form des Halters ist geringfügig vereinfacht.

Bild 34 zeigt beispielhaft ein Thermografiebild sowie die zugehörige simulierte Temperaturverteilung von Linsensatz 1 nach 180 s Bestrahlung mit 2 kW Laserleistung. Da die Wärmestrahlung unter einem Winkel von etwa 5° detektiert wird, ist das Thermografiebild (vgl. Bild 34 a) asymmetrisch. Innerhalb des Messfehlers stimmen der gemessene und der simulierte Temperaturverlauf entlang eines radialen Schnitts von der Linsenmitte zum Linsenrand überein. Der angepasste Wärmeübergangskoeffizient beträgt 0,3 mW/(mm² K) und der Absorptionsgrad der Beschichtung 90 ppm.

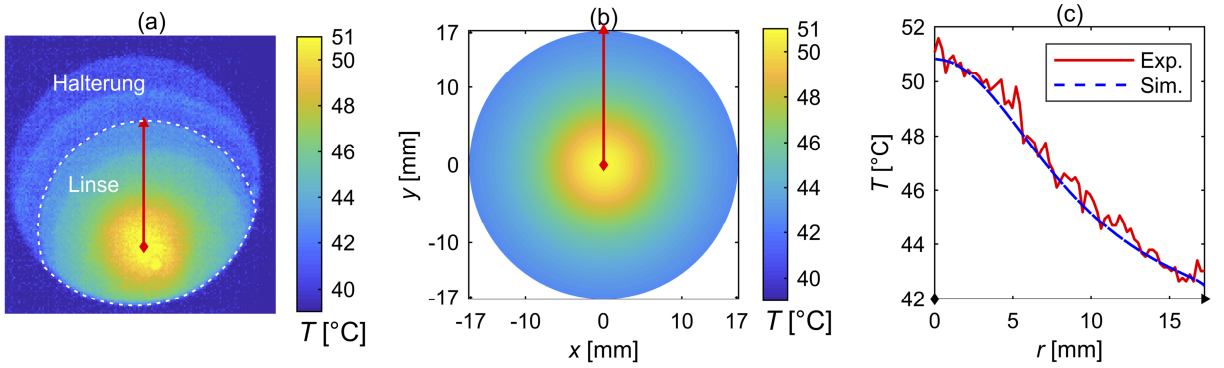


Bild 34: Thermografiebild (a) und simulierte Temperaturverteilung (b) der rückseitigen Oberfläche der bikonvexen Linse (Linsensatz 1) nach 180 s Bestrahlung mit 2 kW Laserleistung. In (c) sind zwei Schnitte in radialer Richtung (durch rote Linien in (a) und (b) gekennzeichnet) einander gegenübergestellt.

Der Einfluss des Wärmeübergangs zwischen der Linse und den Ringen auf den Temperaturverlauf ist Bild 35 zu entnehmen. Dargestellt sind die Temperatur in der Linsenmitte sowie am Linsenrand für einen (a) idealen Wärmeübergang, (b) einen angepassten Wärmeübergang sowie (c) den Fall, dass kein Wärmeübergang stattfindet. Die mittels Thermografie bestimmten Temperaturdaten sind mit einem Gauß-Filter über einen Bereich von ±6 Messpunkten geglättet, um den Vergleich mit den Simula-

tionsergebnissen zu vereinfachen. Für einen angepassten Wärmeübergangskoeffizienten von 0,3 mW/(mm² K) stimmen Simulation und Messung innerhalb des statistischen Messfehlers der nicht geglätteten Daten, der etwa 0,5 °C beträgt[12], überein. Der Absorptionsgrad der AR-Beschichtung beträgt in allen drei Fällen 90 ppm. Bei idealem Wärmeübergang erwärmt sich der Linsenrand nur unwesentlich. Wird der Wärmeübergang in der Simulation vollständig unterdrückt, liegt die Randtemperatur in der Abkühlphase der Linse etwa 1,5 °C über der gemessenen Temperatur.

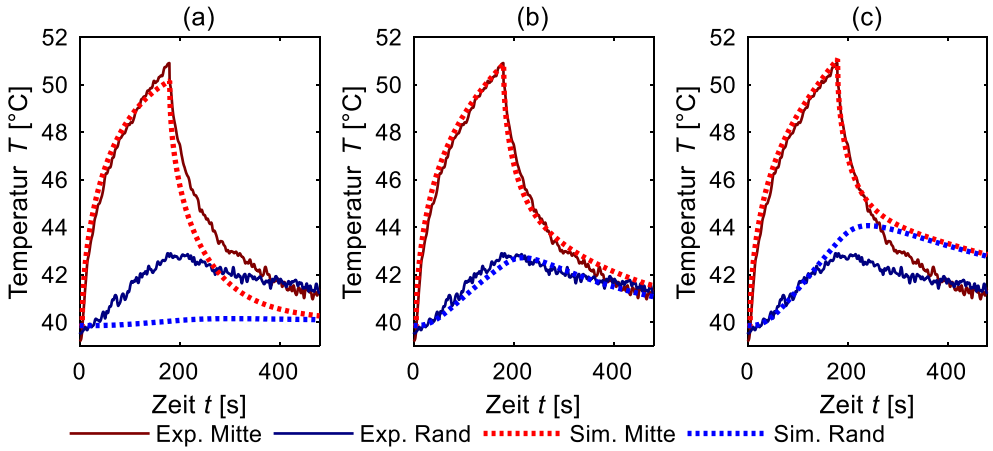


Bild 35: Vergleich des Temperaturverlaufs in der Linsenmitte sowie am Linsenrand für (a) einen idealen, (b) einen angepassten und (c) ohne Wärmeübergang. Gezeigt sind die Daten für Linsensatz 1 bei 2 kW Laserleistung.
Bild erstellt basierend auf [105].

Um den Einfluss des Wärmeübergangs zwischen Linse und Halterung auf die Fokusverschiebung zu quantifizieren, werden die simulierten Temperaturdaten ins optische Modell übertragen. Die resultierenden Fokusverschiebungen Δf nach 180 s Bestrahlung mit dem Laser sowie im thermischen Gleichgewichtszustand sind in Tabelle 7 aufgelistet. Außerdem sind die Maximaltemperatur der Linse $T_{\max}$ sowie die Temperaturdifferenz $\Delta T = T_{\max} - T_{\min}$ angegeben.

Tabelle 7: Einfluss des Wärmeübergangs zwischen Linse und Halter auf die Temperatur der Linse sowie die resultierende Fokusverschiebung.

Zeitpunkt	Wärmeübergang	ΔT [°C]	$T_{\max}$ [°C]	Δf [mm]
Nach 180 s Bestrahlung	Ideal	10,3	50,3	–10,3
	Angepasst	8,6	51,1	–10,0
	Ohne	8,0	51,5	–10,1
Im thermischen Gleichgewicht	Ideal	11,1	53,0	–10,7
	Angepasst	10,2	57,4	–11,0
	Ohne	8,4	71,4	–12,1

[12] Der statistische Messfehler wird abgeschätzt, indem die Standardabweichung der gemessenen Temperatur entlang des radialen Schnitts über acht Frames vor Einschalten des Lasers, wenn die Linse noch eine homogene Temperatur aufweist, gebildet wird.

Die FEA zeigt, dass die Fokusverschiebung nach 180 s Bestrahlung kaum vom Wärmeübergang zwischen Linse und Halterung abhängt. Die Werte liegen zwischen –10,0 mm und –10,3 mm. Die Maximaltemperaturen, die in der Linsenmitte auftreten, unterscheiden sich kaum. Im thermischen Gleichgewichtszustand beträgt die Maximaltemperatur der Linse bei unterdrücktem Wärmeübergang 71,4 °C. Die Fokusverschiebung ist mit –12,1 mm betragsmäßig um 1,4 mm größer als im Fall des idealen Wärmeübergangs, für den die Maximaltemperatur 53,0 °C beträgt.

Insgesamt zeigt die Analyse, dass der Wärmeübergang zwischen Linse und Halterung keinen signifikanten Einfluss auf die Fokusverschiebung hat. Die Variation der Fokusverschiebung beträgt maximal 13 %. Der Grund hierfür ist, dass die Wärme neben dem Wärmefluss in den Halter über Konvektion (Konvektionskoeffizient von 5 W/(m^2 K)) und Wärmestrahlung (ε = 0,85) an die Umgebung abgegeben wird.

Vergleich der ermittelten Absorptionsgrade

Die indirekt auf der Basis von Thermografie ermittelten Absorptionsgrade der AR-Beschichtungen betragen 90 ppm für Linsensatz 1 und 50 ppm für Linsensatz 2 und 3. Diese Werte liegen um einen Faktor 22 bis 50 über den mittels PCI ermittelten Werten für den Absorptionsgrad der Planplatten (vgl. Tabelle 6). Die Ergebnisse sind in Tabelle 8 einander gegenübergestellt. Folgende Ursachen könnten die signifikante Abweichung zwischen Linse und Planplatte bedingen: Zum einen könnte eine unterschiedliche Politur und damit eine differente Oberflächenbeschaffenheit von gekrümmter und planer Oberfläche das Schichtwachstum beeinflusst haben[13]. Zum anderen wurde der Absorptionsgrad der Beschichtung mittels PCI bei 1030 nm Wellenlänge bestimmt, die Laserwellenlänge beträgt jedoch 1070 nm. Wie in Abschnitt 4.1 erläutert wird, konnte jedoch kein Pumplaser mit 1070 nm Wellenlänge eingesetzt werden.

Tabelle 8: Vergleich des Absorptionsgrads der AR-Beschichtung von Planplatte und Linse.

	Linsensatz 1	Linsensatz 2	Linsensatz 3
Material	Corning C79-80	Corning C79-80	Heraeus Suprasil 3001
Planplatte α_{Coat} [ppm] (bei 1030 nm)	-	2,3 ± 0,3	1,0 ± 0,3
Linse* α_{Coat} [ppm] (bei 1070 nm)	90	50	50

*Indirekt durch Abgleich von Thermografiemessungen und Temperaturfeldanalyse ermittelt.

[13] Im Rahmen des Projekts „Thermisch kompensiertes F-theta Objektiv für das ‚Selective Laser Melting' - TFOS" [119] wurde gezeigt, dass sowohl die Politur als auch das Substratmaterial den Absorptionsgrad einer AR-Beschichtung beeinflussen. So variiert der Absorptionsgrad der AR-Beschichtung einer Quarzglasprobe je nach Polierverfahren um den Faktor fünf.

Fokusverschiebung bei Multimode-Laserstrahlung

Die Vorgehensweise zur experimentellen Bestimmung der Fokuslage ist in den Abschnitten 4.3 und 4.4.1 beschrieben. Die Fokusverschiebung wird relativ zur Fokuslage bei 200 W Laserleistung, d. h. der minimalen Ausgangsleistung des Lasersystems, ermittelt. Für die drei Linsensätze sind in Bild 36 die experimentell bestimmte und die simulierte Fokusverschiebung Δf über der Laserleistung aufgetragen. Für die Simulationen werden die indirekt bestimmten Werte für den Absorptionsgrad der AR-Beschichtung sowie für den Wärmeübergangskoeffizienten zwischen der bikonvexen Linse und dem Halter verwendet.

Experiment und Simulation zeigen näherungsweise einen linearen Anstieg der Fokusverschiebung mit der Laserleistung. Die größte Fokusverschiebung induziert Linsensatz 1, die kleinste Linsensatz 3. In Einheiten der Rayleighlänge ($z_R \approx 12{,}5$ mm) liegt die experimentell ermittelte Fokusverschiebung zwischen –0,25 z_R/kW für Linsensatz 1 und –0,15 z_R/kW für Linsensatz 3. Zwischen Simulation und Experiment liegt eine systematische Abweichung vor. Die Steigung der gemessenen Fokusverschiebung ist für alle drei Linsensätze etwa –0,07 z_R/kW größer als es die Simulationen vorhersagen. Diese Abweichung ist wahrscheinlich auf das Schutzglas, das als Staubschutz für die Kollimationsoptik verwendet wird, bzw. auf die Kollimationsoptik als solche zurückzuführen.

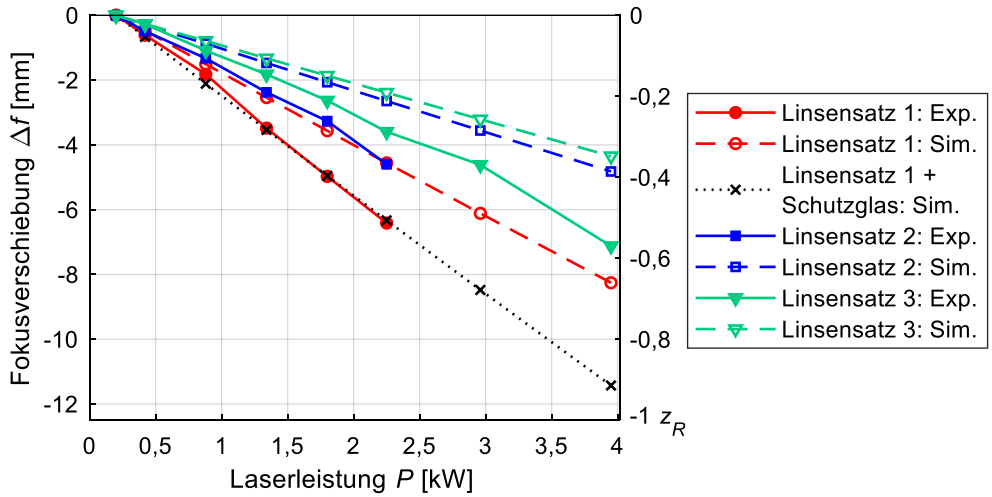


Bild 36: Vergleich von gemessener und simulierter Fokusverschiebung für die drei Linsensätze.

Zur Abschätzung des Einflusses des Schutzglases wird die Simulation für Linsensatz 1 um das Schutzglas der Kollimationsoptik erweitert. Das Schutzglas besteht aus 1,5 mm dickem Quarzglas und hat einen Durchmesser von 50 mm. Es wird angenommen, dass der Absorptionsgrad der AR-Beschichtung 90 ppm beträgt, wie für Linsensatz 1. Bei Berücksichtigung des Schutzglases deckt sich die simulierte Fokusverschiebung mit der experimentell gemessenen. Folglich ist die Annahme plausibel, dass die Abweichung zwischen Experiment und Simulation für alle drei Linsensätze auf die thermooptischen Effekte im Schutzglas zurückzuführen sind.

5.1.2 Transiente Fokusverschiebung beim SLM

Die transiente scanwinkelabhängige Fokusverschiebung bei SLM-Anlagen kann mit kommerziellen Messmitteln bisher nicht gemessen werden (vgl. Abschnitt 2.4). Daher werden thermooptische Simulationen genutzt, um die transiente Fokusverschiebung in Abhängigkeit von der verwendeten Belichtungsreihenfolge und Scanstrategie systematisch zu analysieren. Eine Kontamination des Schutzglases durch Rauch und aufgewirbeltes Metallpulver kann den Absorptionsgrad des Schutzglases während des SLM-Prozesses signifikant erhöhen [25]. Die damit verbundene Erwärmung des Schutzglases induziert thermooptische Effekte. Im Folgenden wird der Einfluss thermooptischer Effekte auf die axiale und laterale Fokuslage untersucht. Mögliche thermische Einflüsse der variablen Fokussieroptik werden dabei nicht berücksichtigt, sondern nur die des Schutzglases. Wesentliche Inhalte dieses Abschnitts wurden bereits in [120] veröffentlicht.

Optisches System, Laser- und Materialparameter

Das optische System besteht aus einer variablen Fokussieroptik (baugleich mit der in Abschnitt 5.1.1), einem Laserscanner und einem Schutzglas, das die Optikeinheit von der Baukammer trennt. Wie in Bild 37 dargestellt, werden zwei verschiedene Schutzgläser analysiert, deren Positionierung typisch für eine SLM-Laboranlage bzw. eine kommerzielle SLM-Anlage ist. Bei der Laboranlage befindet sich das Schutzglas ca. auf halber Distanz zwischen Laserscanner und Pulverbett. Bei der kommerziellen Anlage ist es im Abstand von 37 mm zum Scanner platziert. Beide Schutzgläser sind aus 2 mm dickem Quarzglas gefertigt. Die Durchmesser betragen 150 mm bzw. 100 mm. Im Weiteren werden diese Schutzglaspositionen mit L (Laboranlage) und K (kommerzielle Anlage) bezeichnet. Alle Parameter zu den Schutzgläsern finden sich in Tabelle 9. Der Laserscanner wird im Ray-Tracing-Modell als einzelner Spiegel idealisiert, der um eine beliebige Achse rotiert werden kann. So können Auslenkungen in x- und y-Richtung realisiert werden.

Tabelle 9: Parameter für die analysierten Schutzgläser.

Schutzglas	Laboranlage (L)	Kommerzielle Anlage (K)
Durchmesser [mm]	150	100
Dicke [mm]	2,0	2,0
Abstand zum Laserscanner [mm]	257	37
Abstand zum Pulverbett [mm]	260	478

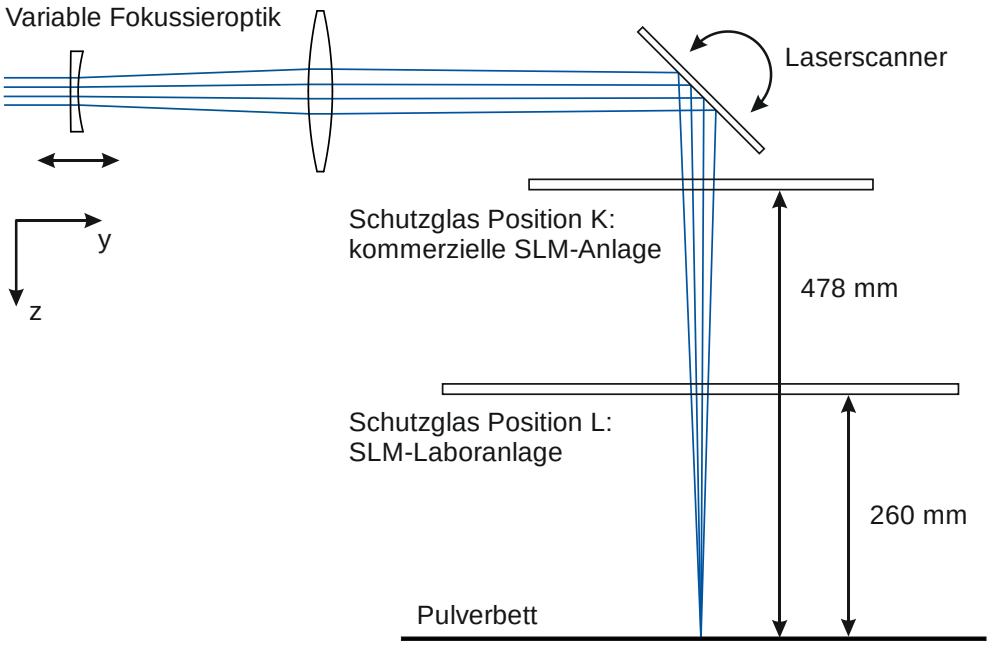


Bild 37: Skizze (nicht maßstabsgetreu) des optischen Aufbaus. Bild erstellt basierend auf [120].

Als Strahlquelle wird ein Laser mit gaußförmigem Strahlprofil, 8,0 mm Strahldurchmesser (1/e² Intensität), 1070 nm Wellenlänge und einer Strahlqualitätskennzahl von M^2 = 1,3 angenommen. Die mittlere Laserleistung beträgt 400 W. Die variable Fokussieroptik weist für die Nullposition des Laserscanners eine effektive Brennweite von 380 mm auf, sodass ein Fokusdurchmesser von 84 µm und eine Rayleighlänge z_R = 5,2 mm resultieren.

Für die FEA werden die Materialdaten für das Quarzglas C79-80 aus Tabelle 1 verwendet. Da für Verbrauchsoptiken wie Schutzgläser i. d. R. keine hochwertigen, z. B. mittels IBS hergestellten, Beschichtungen verwendet werden, wird angenommen, dass der Absorptionsgrad der AR-Beschichtung 100 ppm beträgt. Zusammen mit dem Volumenabsorptionskoeffizienten von 20 ppm/cm folgt, dass ein 2 mm dickes, sauberes Schutzglas lediglich 0,0204 % der Laserleistung absorbiert. Bei 400 W Laserleistung sind dies 0,082 W. Um in der Simulation den Einfluss einer Kontamination des Schutzglases zu berücksichtigen, wird ein zusätzlicher Absorptionsgrad von 0,5 % für die dem Pulverbett zugewandte Seite des Schutzglases angenommen [25]. Dadurch erhöht sich die absorbierte Laserleistung auf 2,08 W. Da thermisch induzierte Oberflächendeformationen bei Quarzglas nur 2 % bis 3 % der gesamten Fokusverschiebung verursachen (vgl. Tabelle 1), wird dieser Effekt in den thermooptischen Simulationen nicht berücksichtigt.

SLM-Prozessparameter, Belichtungsreihenfolge und Scanstrategie

Um einen realitätsnahen SLM-Prozess im Modell abzubilden, wird angenommen, dass Würfelstrukturen, wie sie beispielsweise für experimentelle Parameterstudien verwendet werden, aufgebaut werden. Die 37 Würfel weisen eine Kantenlänge von 10 mm auf. Der Abstand der Würfel-

mitten beträgt 22 mm. Im Folgenden werden zwei unterschiedliche Belichtungsreihenfolgen B1 und B2 verglichen, die in Bild 38 (a) dargestellt sind. Bei Reihenfolge B1 werden die Würfel nacheinander in einem mäanderförmigen Muster belichtet. Die Belichtungsreihenfolge B2 ist so gewählt, dass der räumliche Abstand in der Pulverbettebene zwischen zwei Würfeln, die nacheinander belichtet werden, auf einen mittleren Wert von 71 mm erhöht wird. Bei Belichtungsreihenfolge B1 beträgt dieser Abstand lediglich 23 mm. Der Abstand zum vorvorherigen Würfel wird für die Belichtungsreihenfolge B2 ebenfalls erhöht, und zwar von 41 mm auf 72 mm.

Als Prozessparameter werden solche angenommen, die bereits in Studien des Fraunhofer ILT zum SLM von Edelstahl (1.4404) verwendet wurden [121]. Die effektive Scangeschwindigkeit beträgt 1 m/s und der Spurabstand ist 100 µm. Folglich beträgt die Belichtungszeit für eine Würfelfläche 1 s und die für eine Ebene 37 s. Zwischen der Belichtung zweier Ebenen wird eine Totzeit des Lasers von 10 s angenommen, in der eine neue Pulverschicht aufgetragen wird. Die Belichtung der Hülle der Würfel wird vernachlässigt, da die Hülle lediglich 4 % zur gesamten Belichtungsdauer beiträgt. Dies vereinfacht die transiente FEA.

Im Folgenden werden zwei unterschiedliche Scanstrategien für die Belichtung der Würfelflächen analysiert. Entweder werden die Quadrate mäanderförmig abgescannt (Scanstrategie S1) oder in vier Quadranten unterteilt, die ebenfalls mäanderförmig abgescannt werden (Scanstrategie S2). Die Scanvektoren sind schematisch in Bild 38 (b-c) dargestellt. Die Länge der Scanvektoren beträgt 10 mm für Strategie S1 und 5 mm für Strategie S2.

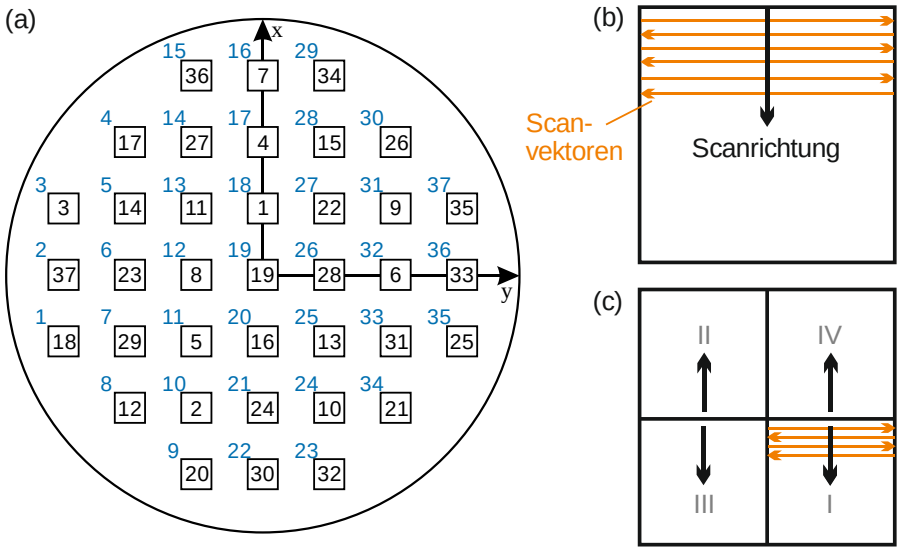


Bild 38: Darstellung der Belichtungsreihenfolge B1 (blaue Zahlen) und B2 (schwarze Zahlen) (a). Scanstrategie für die Belichtung der Würfelflächen: (b) ohne und (c) mit Unterteilung in Quadranten. Bild erstellt basierend auf [120].

Definition der thermischen Last und transiente FEA

Wie in Abschnitt 3.1.1 diskutiert, ist die Zeitskala der räumlichen Bewegung des Laserstrahls sehr viel kleiner als die SLM-Prozessdauer. Um dennoch eine effiziente FEA zu erreichen, wird diese in eine Analyse mit grober Zeitauflösung und eine darauf aufbauende Analyse mit feiner Zeitauflösung unterteilt.

Für die Analyse der transienten Temperaturverteilung im Schutzglas mit einer groben Zeitauflösung von etwa 0,1 s wird die thermische Last über die Belichtung einer Würfelfläche, also über 1 s, gemittelt (vgl. Bild 39 b, e). Diese Last wird gemäß der Belichtungsreihenfolge mittels *APDL* über das Schutzglas bewegt (vgl. Anhang 8.5). Die Analyse erstreckt sich über einen Zeitraum von 987 s. Dies entspricht einer Belichtung von 21 Ebenen.

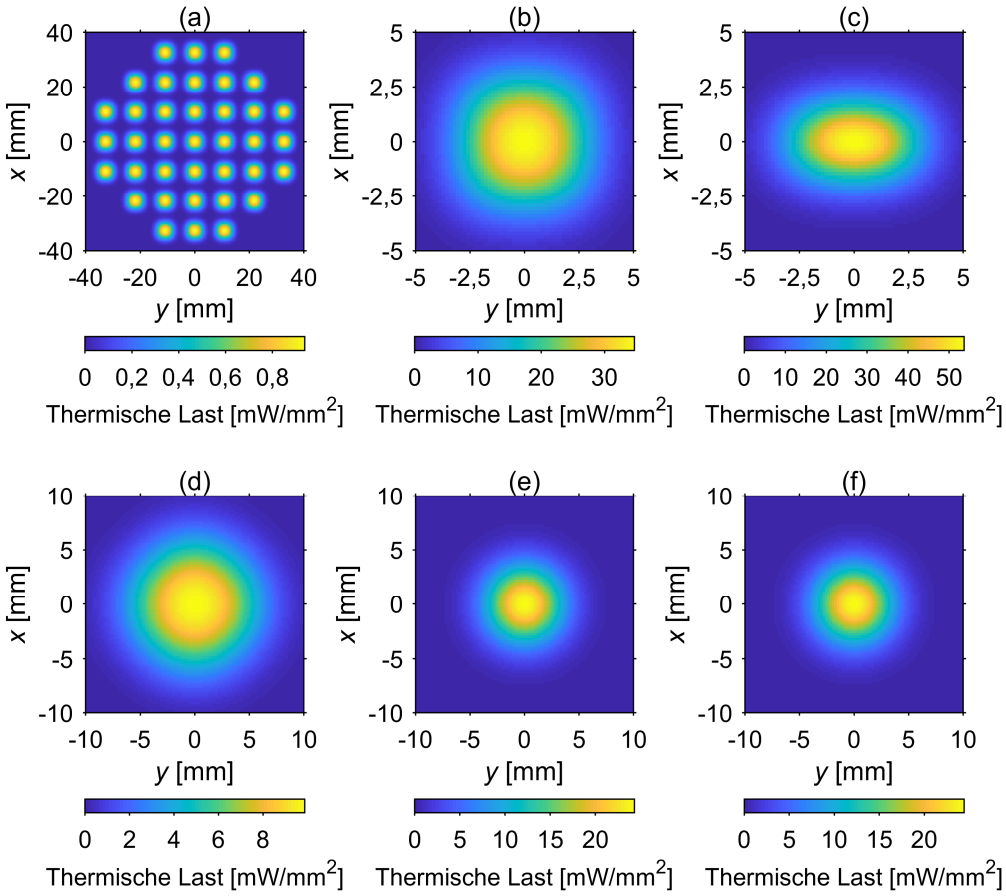


Bild 39: Thermische Last auf der kontaminierten rückseitigen Oberfläche des Schutzglases für Position L (obere Reihe) und Position K (untere Reihe). Die Lasten sind über die Belichtung einer Ebene (a, d), eines Würfels (b, e) bzw. eines Vektors (c, f) gemittelt.

In der Detailanalyse mit feiner Zeitauflösung (ca. 2,5 ms für Scanstrategie S1 bzw. 1,6 ms für Strategie S2) werden die einzelnen Scanvektoren zeitlich und räumlich aufgelöst. Die thermische Last wird über die Belichtung eines Vektors, d. h. über 10 ms bzw. 5 ms, gemittelt und über das Schutzglas bewegt. Die gemittelte thermische Last für den 10 mm langen Vektor ist in Bild 39 (c, f) dargestellt. Die Starttemperaturverteilung für die Detailanalyse entspricht jeweils der Temperaturverteilung zu dem

Zeitpunkt, an dem die Belichtung des vorherigen Würfels abgeschlossen ist. Auf diese Weise wird die Temperaturverteilung während der Belichtung einer Würfelebene zeitlich aufgelöst.

Die Unterteilung der FEA in zwei Analysen mit grober und feiner Auflösung reduziert die Anzahl der erforderlichen Zeitschritte für die Analyse von Scanstrategie S1 von knapp 400.000 auf etwa 10.300 Zeitschritte.

Die Position des Schutzglases hat einen signifikanten Einfluss darauf, wie sich die thermische Last gemittelt über die Belichtung einer Ebene, also über 37 s, verhält (vgl. Bild 39 a, d). Für die Laboranlage ergeben sich 37 lokal begrenzte Bereiche mit einer thermischen Last von bis zu 0,94 mW/mm^2. Für die kommerzielle Anlage resultiert hingegen eine näherungsweise gaußförmige thermische Last mit einem Maximalwert von 9,88 mW/mm^2. Die Kenntnis dieser gemittelten thermischen Last hilft im Folgenden bei der Interpretation der Simulationsergebnisse.

Bestimmung der axialen und lateralen Fokuslage

Im Folgenden werden die thermooptischen Effekte jeweils für den zentralen Würfel (Nummer 19) sowie einen Würfel am Rand des Pulverbetts (Nummer 36 für Belichtungsreihenfolge B1 bzw. Nummer 33 für Reihenfolge B2) analysiert. Die Temperaturverteilung wird für ausgewählte Zeitpunkte exportiert und mit *TOP Simulation* in den Brechungsindexverlauf überführt. Dabei wird nur jede zehnte Linie analysiert, also elf Linien je Würfel für Scanstrategie S1 bzw. sechs Linien pro Quadrant für Scanstrategie S2.

Die thermisch induzierte Fokusverschiebung wird folgendermaßen ermittelt: Zunächst werden die Position der ersten Linse der variablen Fokussieroptik und der Winkel des Laserscanners im Ray-Tracing-Modell angepasst, sodass der Fokus an der gewünschten Position im Pulverbett liegt. Anschließend wird das temperaturabhängige Brechungsindexprofil im Schutzglas berücksichtigt. Die Lage der Bildebene im Ray-Tracing-Modell wird mittels einer Minimierung des RMS-Fokusdurchmessers optimiert, wobei die Linsenposition und der Scanwinkel fixiert sind. Dies ergibt die axiale Fokuslage unter thermischer Last. Die laterale Fokuslage wird über den Schwerpunkt der Strahlen ermittelt. Die Differenz zum thermisch nicht belasteten System entspricht der gesuchten axialen und lateralen Fokusverschiebung.

Simulationsergebnisse

Die FEA ergibt den in Bild 40 gezeigten transienten Verlauf der Maximaltemperatur des Schutzglases für Belichtungsreihenfolge B1. Nach etwa zehn Schichten (470 s) wird für Schutzglas Position L ein transienter Gleichgewichtszustand erreicht. Die Maximaltemperatur ändert sich nicht mehr von Schicht zu Schicht. Für Position K wird dieser Zustand

erst nach etwa 20 Schichten (940 s) erreicht. Außerdem ist die Maximaltemperatur mit 112 °C gegenüber 47 °C deutlich größer.

Die simulierte Erwärmung des Schutzglases für die Laboranlage deckt sich näherungsweise mit den experimentellen Messungen von Schniedenharn [122], der die transiente Erwärmung eines kontaminierten Schutzglases während des SLM-Prozesses mittels Thermografie analysiert. Nach der Belichtung von 50 Ebenen beträgt die gemessene Maximaltemperatur 49 °C und wächst auf 55 °C nach 90 Ebenen an. Damit ist die gemessene Temperatur bis zu 8 °C größer als die berechnete. Das optische System und die Prozessparameter stimmen weitestgehend überein. Geringfügige Abweichungen sind Folgende: In der Simulation wird der Aufbau von 37 Würfeln betrachtet wohingegen im Experiment nur 35 Würfel generiert werden (Nummer 18 und 20 fehlen). Außerdem ist die Laserleistung im Experiment knapp 10 % geringer als in der Simulation.

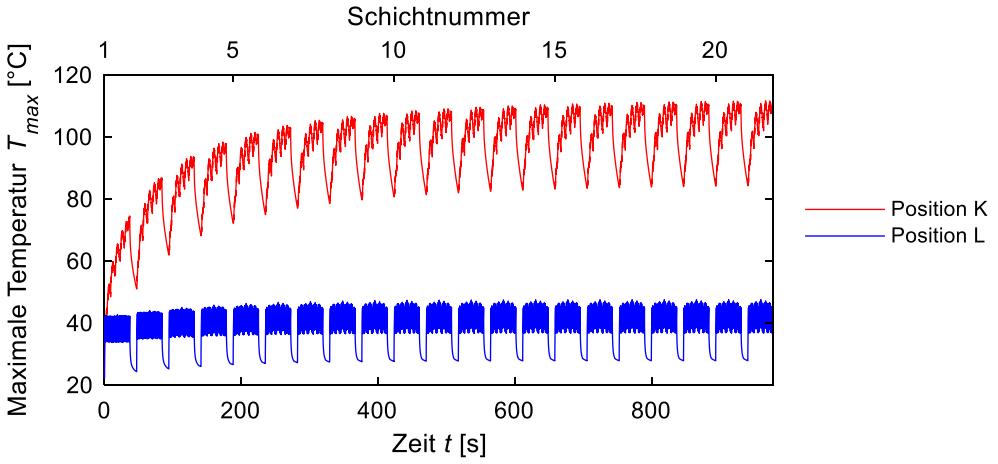


Bild 40: Transienter Verlauf der Maximaltemperatur für die Belichtungsreihenfolge B1.
Bild erstellt basierend auf [120].

Im Folgenden werden die resultierenden Fokusverschiebungen für die Schichten 1 und 21 ausgewertet und miteinander verglichen.

Axiale Fokusverschiebung

Die quantitativen Ergebnisse für die simulierte axiale Fokusverschiebung sind in Tabelle 10 aufgelistet.

Die axiale Fokusverschiebung Δz bei der SLM-Laboranlage mit verschmutztem Schutzglas beträgt im Mittel –0,33 mm. Die simulierte Verschiebung ist nahezu unabhängig von der Anzahl belichteter Schichten. Grund hierfür ist, dass der Temperaturgradient im Schutzglas näherungsweise konstant ist und dieser maßgeblich die thermooptischen Effekte bei Quarzglas bestimmt.

Schutzglas-position	Belichtungs-reihenfolge	Schicht-nummer	Würfel-nummer	Scanstrategie	Bereich von Δz [mm]	Mittelwert von Δz [mm]	Mittelwert von Δz [z_R]
L	B1	1	19	S1	–0,621 - +0,038	–0,323	–0,062
L	B1	21	19	S1	–0,623 - +0,024	–0,327	–0,063
L	B1	21	19	S2	–0,834 - +0,094	–0,329	–0,063
L	B2	21	19	S1	–0,636 - +0,003	–0,337	–0,065
L	B1	1	36	S1	–0,634 - +0,013	–0,331	–0,064
L	B1	21	36	S1	–0,644 - +0,002	–0,341	–0,066
L	B1	21	36	S2	–0,827 - +0,084	–0,348	–0,067
L	B2	21	33	S1	–0,634 - +0,015	–0,338	–0,065
K	B1	1	19	S1	–4,28 - –3,67	–4,01	–0,77
K	B1	21	19	S1	–5,78 - –5,27	–5,57	–1,07
K	B1	21	19	S2	–6,03 - –4,99	–5,55	–1,07
K	B2	21	19	S1	–5,71 - –4,90	–5,35	–1,03
K	B1	1	36	S1	–5,04 - –3,54	–4,36	–0,84
K	B1	21	36	S1	–5,95 - –4,44	–5,26	–1,01
K	B1	21	36	S2	–5,83 - –4,55	–5,27	–1,01
K	B2	21	33	S1	–4,19 - –2,58	–3,41	–0,66

Tabelle 10: Axiale Fokusverschiebung Δz für die analysierten Parameter Schutzglasposition, Belichtungsreihenfolge, Würfelnummer und Scanstrategie.

In Bild 41 werden die axialen Fokusverschiebungen Δz über die Fläche von Würfel 19 bei Verwendung der Scanstrategien S1 und S2 für die Schutzglasposition L einander gegenübergestellt. Die weiteren Parameter sind Belichtungsreihenfolge B1 und Schicht 21. Die Fokusverschiebung für den ersten Vektor ist jeweils nahezu null. Die maximale Verschiebung tritt für Strategie S1 zwischen dem 51. und 61. Vektor, also zwischen x = 0,0 mm und x = –1,0 mm, auf. Die genaue Position kann nicht aufgelöst werden, da nur jeder zehnte Scanvektor ausgewertet wird. Außerdem nimmt Δz zu den Rändern des Würfels bei y = ±5 mm hin ab.

Darüber hinaus unterscheidet sich die Fokusverschiebung bei Würfel 19 in der Mitte des Pulverbetts kaum von der bei Würfel 36/33 am Rand des Pulverbetts. Grund hierfür ist die räumlich stark verteilte thermische Last auf dem Schutzglas (vgl. Bild 39 a). Folglich haben sowohl die Würfelposition als auch die Belichtungsreihenfolge bei dieser Schutzglasposition keinen signifikanten Einfluss auf die axiale Fokusverschiebung.

Die Verwendung von Scanstrategie S2, also die Aufteilung der Belichtung in vier Quadranten, führt zu einer größeren maximalen Fokusverschiebung von –0,83 mm (–0,16 z_R) gegenüber –0,64 mm (–0,12 z_R)

für Strategie S1. Für die Quadranten I und II ist Δz geringer als für Scanstrategie S1 (vgl. Bild 41). Folglich ließe sich die axiale Fokusverschiebung reduzieren, indem zunächst nur die Quadranten I und II eines Würfels belichtet würden, dann mit der Belichtung anderer Würfel fortgefahren und schließlich die verbleibenden Quadraten III und IV belichtet würden. Verallgemeinert entspricht diese Strategie einer räumlichen und zeitlichen Verteilung der thermischen Last über dem Schutzglas.

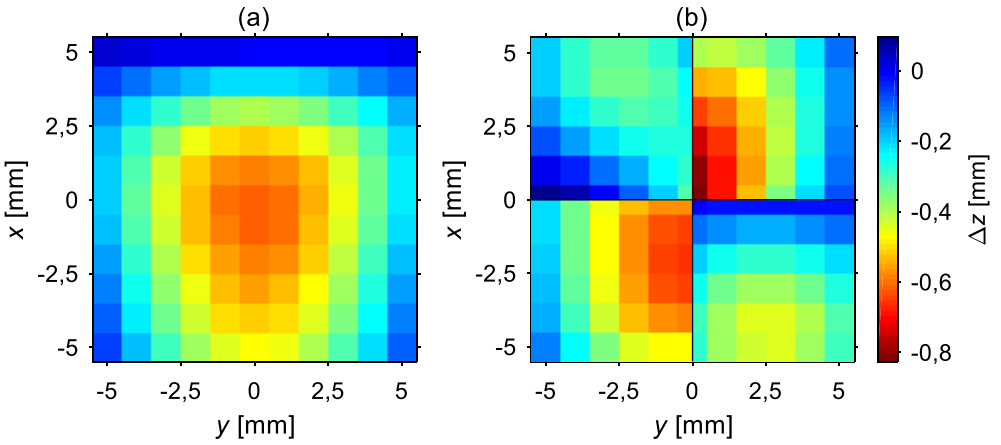


Bild 41: Axiale Fokusverschiebung für Schutzglasposition L, Belichtungsreihenfolge B1, Schicht 21, Würfel 19 und Scanstrategie S1 (a) bzw. S2 (b). Bild erstellt basierend auf [120].

Das Schutzglas der analysierten kommerziellen SLM-Anlage induziert bei gleichem Absorptionsgrad eine um den Faktor 10 bis 17 größere mittlere Fokusverschiebung in axialer Richtung als das Schutzglas der Laboranlage. Grund hierfür ist die im Mittel größere thermische Last (vgl. Bild 39 d). Der Laserstrahldurchmesser auf dem Schutzglas ist mit 10,3 mm zwar etwa doppelt so groß wie für Position L, allerdings bewegt sich der Strahlschwerpunkt beim Scannen um maximal ±5,1 mm in x- und y-Richtung. Somit heizt sich das Schutzglas auf etwa 110°C auf (vgl. Bild 40).

In Bild 42 sind die axialen Fokusverschiebungen Δz über die Fläche von Würfel 19 bei Verwendung der Scanstrategien S1 und S2 für die Schutzglasposition K einander gegenübergestellt. Die weiteren Parameter sind Belichtungsreihenfolge B1 und Schicht 21. Bei Verwendung von Scanstrategie S1 variiert Δz nur geringfügig über die Würfelfläche. Bei Scanstrategie S2 wächst Δz betragsmäßig von Quadrant I bis IV an.

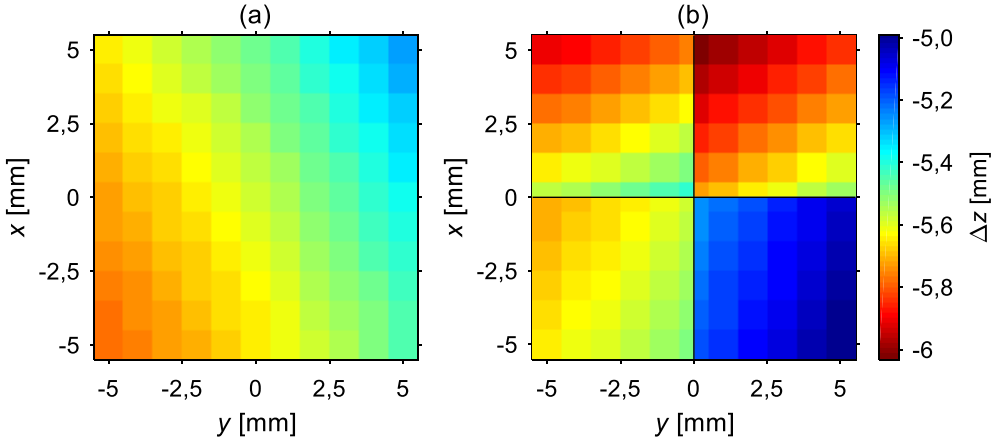


Bild 42: Axiale Fokusverschiebung für Schutzglasposition K, Belichtungsreihenfolge B1, Schicht 21, Würfel 19 und Scanstrategie S1 (a) bzw. S2 (b). Bild erstellt basierend auf [120].

Die Verwendung der Belichtungsreihenfolge B2, bei der die Würfel verstreut belichtet werden, reduziert die mittlere Fokusverschiebung für den zentralen Würfel um 3,6 %, die für den Würfel am Rand (Nummer 33) sogar um 35 %.

Laterale Fokusverschiebung

Zusammen mit der axialen wird die laterale Fokusverschiebung in x- und y-Richtung analysiert. Da die Scanvektoren in y-Richtung verlaufen, entspricht Δx der Fokusverschiebung senkrecht zur Scanrichtung und Δy der Fokusverschiebung in Scanrichtung. Die quantitativen Ergebnisse sind in Tabelle 11 aufgeführt.

Die maximale laterale Fokusverschiebung, die bei der Laboranlage mit verschmutztem Schutzglas auftritt, beträgt für den zentralen Würfel 10 % des Spurabstands von 100 µm, sodass von einem geringen Einfluss auf den SLM-Prozess auszugehen ist. Für den Würfel am Rand des Pulverbetts (Nummer 36/33) ist Δx ebenfalls ≤ 10 % des Spurabstands. Δy erreicht betragsmäßig jedoch Werte von bis zu 108 µm, was etwa einem Spurabstand entspricht. Der Würfelmittelpunkt verschiebt sich um ca. 45 µm zur Mitte des Pulverbetts. Außerdem wird die Kantenlänge von Würfel 36 bzw. 33 in y-Richtung um etwa 1 % gestreckt.

Schutzglas-position	Belichtungs-reihenfolge	Schicht-nummer	Würfel-nummer	Scanstrategie	Bereich von Δx [µm]	Mittelwert von $\lvert\Delta x\rvert$ [µm]	Bereich von Δy [µm]	Mittelwert von $\lvert\Delta y\rvert$ [µm]
L	B1	1	19	S1	–1,8 - +10,1	3,3	–5,7 - +5,0	2,9
L	B1	21	19	S1	–1,8 - +10,2	3,3	–5,6 - +5,1	2,9
L	B1	21	19	S2	–9,3 - +9,0	3,7	–6,4 - +5,4	2,7
L	B2	21	19	S1	–1,8 - +9,9	3,3	–5,5 - +5,1	2,9
L	B1	1	36	S1	–1,9 - +9,9	3,3	–81,4 - +1,3	42,5
L	B1	21	36	S1	–2,0 - +10,0	3,4	–83,4 - –0,6	44,5
L	B1	21	36	S2	–10,2 - +8,8	3,8	–108,3 - +10,6	45,7
L	B2	21	33	S1	–2,0 - +9,8	3,3	–82,2 - –3,0	44,1
K	B1	1	19	S1	–34,0 - +50,6	22,8	–52,2 - +32,0	24,3
K	B1	21	19	S1	–50,2 - +66,2	31,6	–65,5 - +50,5	32,2
K	B1	21	19	S2	–54,7 - +65,0	29,9	–69,2 - +51,4	30,2
K	B2	21	19	S1	–51,1 - +60,8	30,2	–62,1 - +53,3	30,6
K	B1	1	36	S1	–46,0 - +50,1	24,6	–631 - –516	582
K	B1	21	36	S1	–55,8 - +59,6	29,8	–758 - –650	706
K	B1	21	36	S2	–58,6 - +58,4	27,6	–737 - –665	707
K	B2	21	33	S1	–39,3 - +38,4	20,1	–533 - –393	471

Tabelle 11: Laterale Fokusverschiebung in x- und y-Richtung für die Parameter Schutzglasposition, Belichtungsreihenfolge, Würfelnummer und Scanstrategie.

Bei der kommerziellen Anlage induziert ein in gleichem Maße verschmutztes Schutzglas eine laterale Fokusverschiebung von bis zu 70 % des Spurabstands bei der Belichtung des zentralen Würfels. Für die Belichtungsreihenfolge B1, Schicht 21 und Scanstrategie S1 ist der Verlauf der Scanvektoren in der Pulverbettebene in Bild 43 (a) dargestellt. Um die Verschiebung besser kenntlich zu machen, sind Δx und Δy jeweils um den Faktor 10 skaliert dargestellt. Die Scanvektoren werden durch die thermooptischen Effekte sowohl in ihrer Länge gestaucht als auch zur Würfelmitte hin verschoben. Dies führt zu einem Schrumpf der Würfelfläche um etwa 2 %. Bei Verwendung von Scanstrategie S2 tritt zwischen den Quadranten nur ein geringer Versatz der Vektoren auf. Somit ist der Schrumpf symmetrisch über die vier Quadranten.

Bei der Belichtung von Würfel 36/33 am Rand des Pulverbetts tritt eine signifikante Verschiebung des Würfelmittelpunkts aufgrund von thermooptischen Effekten auf (vgl. Bild 43 b). Somit ist nur Δx um den Faktor 10 skaliert dargestellt. Bei Belichtungsreihenfolge B1 beträgt die Verschiebung des Mittelpunkts in y-Richtung für Schicht 1 etwa –580 µm und für Schicht 21 –700 µm. Folglich tritt eine parallelogrammförmige Neigung des Würfels in der y-z-Ebene auf. Die Verschiebung der Scan-

vektoren in x-Richtung hin zur Würfelmitte verursacht einen Schrumpf der Würfelfläche um etwa 1 %.

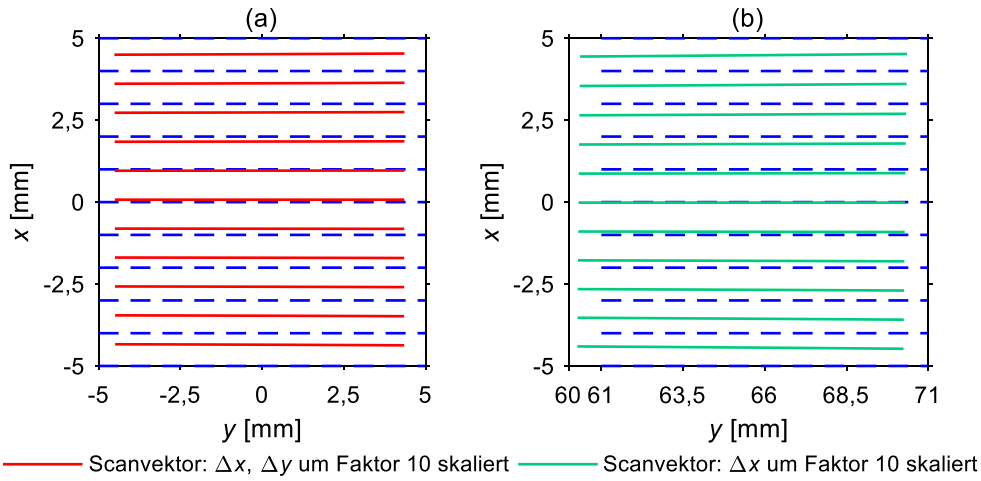


Bild 43: Laterale Fokusverschiebung für Schutzglasposition K, Belichtungsreihenfolge B1, Schicht 21, Scanstrategie S1 und Würfel 19 (a) bzw. Würfel 36 (b). Die gestrichelten Linien stellen die idealen Scanvektoren dar. Bild (a) erstellt basierend auf [120].

Die Simulationen der transienten Fokusverschiebung im SLM-Prozess zeigen, dass sich die thermooptischen Effekte vergrößern, je näher das Schutzglas am Laserscanner positioniert wird. Eine räumliche und zeitliche Verteilung der thermischen Last auf dem Schutzglas, beispielsweise durch eine angepasste Scanstrategie, verringert die thermooptischen Effekte. Die laterale Fokusverschiebung verursacht neben einem Schrumpf der aufgebauten Strukturen eine Verschiebung des Schwerpunkts von Strukturen, die nah am Rand des Bauraums generiert werden, hin zur Bauraummitte.

In den vorgenommen Analysen wird ein konstanter Absorptionsgrad durch Verschmutzung des Schutzglases von 0,5 % angenommen. Während des SLM-Prozesses nehmen die Verschmutzung und somit der Absorptionsgrad jedoch mit der Prozessdauer zu. Für weiterführende Untersuchungen wäre daher ein Modell für den Absorptionsgrad in Abhängigkeit von der belichteten Fläche sinnvoll. Unter der Annahme, dass die Schichtdicke der Verschmutzung linear mit der belichteten Fläche zunimmt, würde die absorbierte Laserleistung proportional zu $1 - \exp(-a \cdot t)$ mit der Zeit t anwachsen, wobei a eine zu ermittelnde Konstante ist. In der Konsequenz würden der Schrumpf der aufgebauten Strukturen sowie die laterale Verschiebung, insbesondere am Rand des Pulverbetts, von Schicht zu Schicht zunehmen.

5.2 Kunststoffoptiken für Laseranwendungen

Die thermooptischen Effekte, die beim Einsatz von Kunststoffoptiken für Laseranwendungen auftreten, werden exemplarisch an einer asphärischen Linse aus PMMA experimentell und simulativ analysiert. Anschließend wird die Linsenform im thermisch nicht belasteten Zustand iterativ optimiert, um so die thermooptischen Effekte für einen bestimmten Betriebspunkt, d. h. eine definierte thermische Last, zu kompensieren. Die in den Simulationen verwendeten Materialparameter finden sich in Tabelle 1. Der thermooptische Koeffizient für PMMA bei 1064 nm Wellenlänge wird auf Basis von Formel **2.12** berechnet und beträgt $-102 \cdot 10^{-6}$/K.

5.2.1 Experimentelle und simulative Charakterisierung einer Asphäre aus PMMA

Die Brennweite der mittels Spritzguss hergestellten asphärischen Linse aus PMMA (Artikel 48-172 der Fa. Edmund Optics) beträgt 100 mm. Die Vorderseite ist asphärisch geformt, die Rückseite ist plan. Beide Oberflächen sind nicht beschichtet. Der Linsendurchmesser beträgt 25,4 mm und die Randdicke 4 mm. Wie der in Abschnitt 4.4.2 beschriebenen Versuchsanordnung zu entnehmen ist, wird die Linse waagerecht gehaltert. Um eine Verformung der Linse durch die Halterung zu vermeiden, wird die Linse nicht wie üblich durch einen Ring fixiert, sondern nur durch die Schwerkraft im Halter gehalten (vgl. Bild 44).

Analyse des transienten Temperaturverlaufs

Der transiente Temperaturverlauf auf der Linsenvorderseite wird mittels Thermografie während der Aufwärm- und Abkühlphase gemessen. Die Messungen erfolgen bei sechs verschiedenen Laserleistungen P zwischen 1 W und 10 W. Der Durchmesser des gaußförmigen Laserstrahls auf der Linse beträgt 5,5 mm. Folglich liegt die Leistungsdichte, gemessen auf der optischen Achse, im Bereich von 8,4 W/cm² bis 84,2 W/cm². Die Linse wird jeweils für eine Dauer von 180 s mit dem Laser bestrahlt. Um die Messdaten mit den Simulationen vergleichen zu können, wird das Temperaturprofil in radialer Richtung, d. h. vom Linsenrand über die Linsenmitte zum gegenüberliegenden Linsenrand, für alle Zeitschritte extrahiert. Darüber hinaus wird die Temperatur an der Außenseite des Linsenhalters mit Hilfe eines Platinmesswiderstands erfasst. Über die gesamte Messreihe erwärmt sich diese Stelle des Halters um < 0,2 °C. In der FEA wird daher eine konstante Temperatur (20,5 °C) der Außenseite des Halters als thermische Randbedingung angenommen. Außerdem wird der Halter (LM1XY/M der Fa. Thorlabs) als rotationssymmetrisch angenommen und das CAD-Modell entsprechend vereinfacht (vgl. Bild 44).

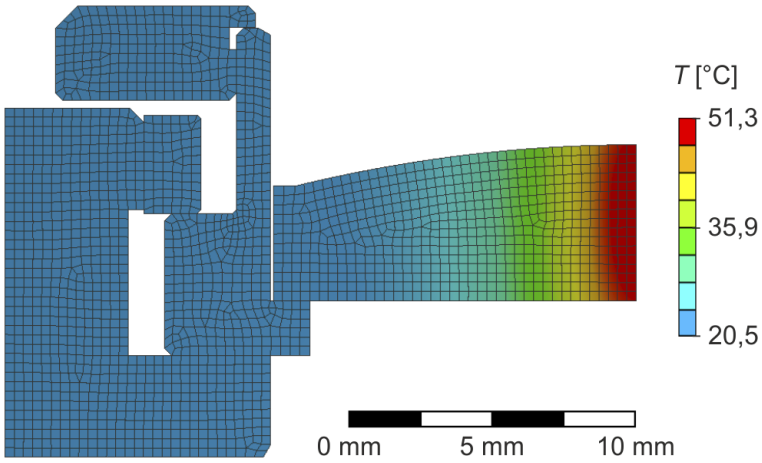


Bild 44: Simulierte Temperaturverteilung von Linse und Halter nach 180 s Bestrahlung mit 10 W Laserleistung.

Der Volumenabsorptionskoeffizient des Linsenmaterials PMMA wird indirekt über eine Temperaturfeldanalyse und den Abgleich der berechneten Temperatur mit den Messdaten bestimmt. Für einen Volumenabsorptionskoeffizienten von α_{abs} = 2,6 %/cm ist die Übereinstimmung von der simulierten transienten Temperaturverteilung mit den Ergebnissen der Thermografie am größten. In der Literatur findet sich kein Vergleichswert für α_{abs} bei 1064 nm Wellenlänge. Zudem würde dieser Wert vom Grad der Wasseraufnahme von PMMA abhängen, der je nach Luftfeuchtigkeit variiert.

In Bild 45 sind für 10 W Laserleistung die simulierte und die gemessene Temperaturverteilung in radialer Richtung über der Zeit aufgetragen. Der Laser wird im Zeitraum von t = 5 s bis 185 s eingeschaltet. Im Experiment kühlt die Linse geringfügig schneller ab als von der Simulation prognostiziert (vgl. auch Bild 46 b).

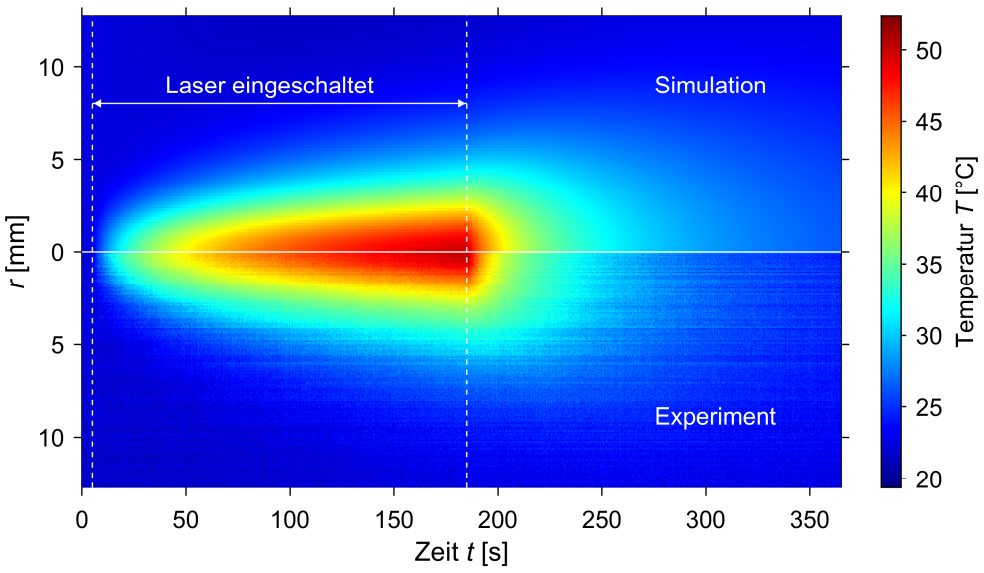


Bild 45: Simulierte und gemessene Temperaturverteilung auf der Linsenvorderseite entlang eines radialen Schnitts aufgetragen über der Zeit. Der Laser wird für eine Dauer von 180 s eingeschaltet. Die Laserleistung beträgt 10 W.

In Bild 46 (a) sind für die sechs analysierten Laserleistungen die radialen Schnitte zum Zeitpunkt t = 185 s, also unmittelbar vor Abschalten des Lasers, dargestellt. Innerhalb des statistischen Messfehlers, der bei Raumtemperatur etwa 0,6 °C beträgt[14], stimmen die Daten überein. Die maximale Erwärmung skaliert näherungsweise linear mit der Laserleistung. Folglich hängt der Volumenabsorptionskoeffizient von PMMA nicht von der Temperatur ab, zumindest nicht für Temperaturen im Bereich von 20 °C bis 50 °C.

Der transiente Temperaturverlauf für den Vertex der Linsenvorderseite (r = 0 mm) wird mit einem Gauß-Filter über einen Bereich von ±6 Messpunkten geglättet (vgl. Bild 46 b). Während der Aufwärmphase deckt sich die simulierte Temperaturverteilung nahezu mit den Thermografiedaten. Im Experiment kühlt die Linse in der Mitte schneller ab als von der Simulation vorhergesagt, insbesondere für Leistungen ≥ 6 W. Die maximale Abweichung zum Zeitpunkt t = 365 s beträgt 1,5°C. Mögliche Ursachen dieser Abweichung können auf Basis der durchgeführten Analysen nicht identifiziert werden. Da die Wärmeleitfähigkeit von PMMA nicht signifikant von der Temperatur abhängt (Änderung ca. 3 % im Temperaturbereich von 35 °C bis 80 °C [123]), kann dies als Ursache ausgeschossen werden.

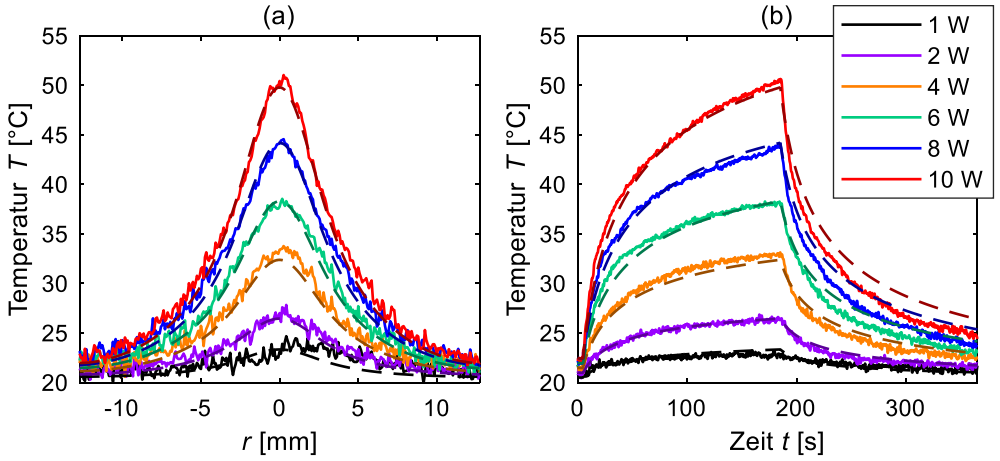


Bild 46: Gemessener Temperaturverlauf in radialer Richtung zum Zeitpunkt 185 s (a) bzw. für den Vertex der Linse über der Zeit (b). Die gestrichelten Kurven stellen die Simulationsergebnisse dar.

Analyse der Fokusverschiebung

Die transiente Fokusverschiebung wird mit einem Hartmann-Shack-Sensor detektiert (vgl. Abschnitt 4.3). Aus dem Krümmungsradius der Wellenfront resultiert der Abstand des Sensors zum Fokus. Die zeitliche Änderung des Krümmungsradius entspricht folglich der Fokusverschiebung Δf. Die Messwerte für Δf sind in Bild 47 über der Zeit aufgetragen. Der zeitliche Verlauf kann durch die zweiphasige Exponentialfunktion [82]

[14] Der statistische Messfehler wird abgeschätzt, indem die Standardabweichung der gemessenen Temperatur entlang des radialen Schnitts über 50 Frames vor Einschalten des Lasers, wenn die Linse noch eine homogene Temperatur aufweist, gebildet wird.

5.1

$$\Delta f(t) = A_1 + A_2 \exp\left(-2{,}3\frac{t}{\tau_{fast}}\right) - (A_1 + A_2)\exp\left(-2{,}3\frac{t}{\tau_{slow}}\right)$$

beschrieben werden. A_1 gibt die Fokusverschiebung im thermischen Gleichgewicht, d. h. für $t \to \infty$, an. Zum Zeitpunkt $t = 0$ s gilt $\Delta f = 0$. Die zwei Zeitkonstanten τ_{fast} und τ_{slow} geben an, nach welcher Zeit 90 % der schnellen bzw. langsamen Fokusverschiebung erreicht sind. Das Modell wird an die Messdaten angepasst (vgl. Bild 47) und beschreibt präzise den transienten Verlauf der Fokusverschiebung.

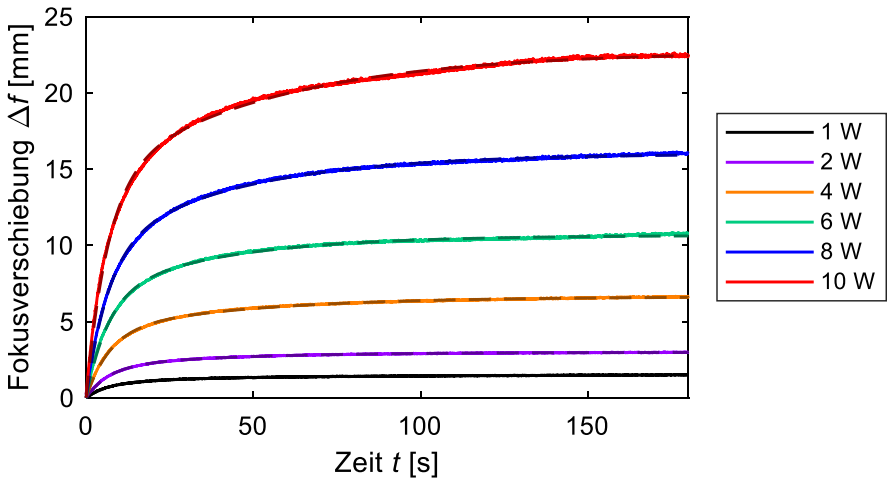


Bild 47: Mittels Hartmann-Shack-Sensor gemessene transiente Fokusverschiebung in Abhängigkeit von der Laserleistung. Die gestrichelten Linien stellen die angepasste zweiphasige Exponentialfunktion dar.

Die Ergebnisse der Anpassung von Formel **5.1** an die Messdaten sind in Tabelle 12 aufgelistet. Die Fokusverschiebung nimmt von etwa 1,5 mm bei 1 W auf 22,7 mm bei 10 W Laserleistung zu. Damit beträgt die Fokusverschiebung bei 10 W ca. 23 % der Brennweite. Die Zeitkonstanten korrelieren nicht mit der Laserleistung und betragen im Mittel $\tau_{fast} = (15{,}5 \pm 0{,}6)$ s und $\tau_{slow} \approx (105 \pm 16)$ s. Folglich sind nach etwa 100 s ca. 90 % der Fokusverschiebung erreicht, die sich im thermischen Gleichgewicht einstellt.

Tabelle 12: Ergebnisse der Anpassung der zweiphasigen Exponentialfunktion an die Messdaten.

Leistung P [W]	A_1 [mm]	τ_{fast} [s]	τ_{slow} [s]
1	1,51	16,4	125,2
2	2,98	15,5	89,7
4	6,63	16,1	106,0
6	10,65	15,1	88,3
8	16,01	15,3	97,1
10	22,73	14,8	121,7

Die mit dem Hartmann-Shack-Sensor ermittelten Fokusverschiebungen (Parameter A_1 in Tabelle 12) werden der simulierten Fokusverschiebung im thermischen Gleichgewicht gegenübergestellt (vgl. Bild 48 a). Bei der Bestimmung der Fokuslage im Ray-Tracing-Modell wird der RMS-Wert

der Wellenfront über den Strahldurchmesser ($1/e^2$) minimiert. Für den Leistungsbereich von 0 W bis 2 W stimmen die Ergebnisse überein. Für höhere Laserleistungen nimmt die gemessene Fokusverschiebung nichtlinear mit der Leistung zu. Dieses Verhalten wird nicht in gleichem Maße von der Simulation vorhergesagt. Die simulierte Verschiebung weist nur eine geringfügige Nicht-Linearität auf und beträgt 15,8 mm bei 10 W. Ein möglicher Grund für die Abweichung könnte sein, dass der thermische Ausdehnungskoeffizient von der Temperatur abhängt. Dies würde bedeuten, dass sich der thermooptische Koeffizient, der auf Basis von Formel **2.12** berechnet wird, mit der Temperatur ändert. So zeigen Messungen von Sultanova et al., dass der thermooptische Koeffizient von PMMA (für die g-, d- und C-Linie) im Bereich von 10 °C bis 50 °C von der Temperatur abhängt [7]. Daten für 1064 nm Wellenlänge liegen jedoch nicht vor.

Darüber hinaus werden Strahlkaustikmessungen mit dem *MicroSpotMonitor* vorgenommen. Da die Strahlkaustik für $P \rightarrow 0$ W nicht ermittelt werden kann, wird die Fokusverschiebung relativ zur Fokuslage bei 1 W Laserleistung bestimmt (vgl. Bild 48 b). Δf nimmt nichtlinear mit der Leistung zu und beträgt 13,6 mm bei 10 W. In der Simulation wird die Fokuslage über eine Minimierung des RMS-Werts des Spotradius ermittelt. Die resultierende Fokusverschiebung weist nur eine geringe Nicht-Linearität mit der Laserleistung auf. Dennoch stimmen Simulation und Experiment in der Größenordnung überein.

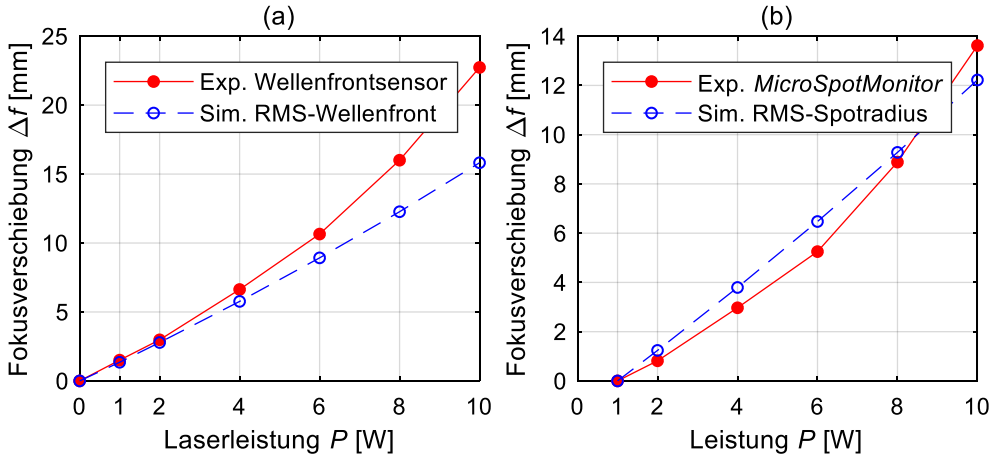


Bild 48: Vergleich von experimentell gemessener und simulierter Fokusverschiebung der PMMA-Asphäre.

Analyse des Intensitätsprofils in der Fokusregion

Um den Einfluss der thermooptischen Effekte auf das Intensitätsprofil zu simulieren, werden die in Abschnitt 3.6 beschriebenen Methoden für monochromatische Laserstrahlung angewendet. Für 1 W und 10 W Laserleistung wird das komplexe Feld in die Fokusregion propagiert. Dabei wird linear in x-Richtung polarisierte Strahlung angenommen. Die Feldkomponente E_x wird in aufeinanderfolgenden Ebenen, die zueinander einen Abstand von 50 µm aufweisen, berechnet und jeweils Schnitte entlang der x-Achse extrahiert. Die resultierenden Feldverteilungen im

Bereich von 97 mm bis 125 mm hinter der Linsenrückseite sind in Bild 49 dargestellt.

Für jeweils 31 z-Positionen, die innerhalb von ±3 z_R um die Strahltaille liegen, wird der Strahlradius nach dem Verfahren der Momente zweiter Ordnung berechnet und eine Strahlkaustik angepasst (vgl. Bild 64 im Anhang 8.10). Die resultierenden Kaustiken sind in Bild 49 eingezeichnet. Aus den Strahlkaustiken folgt eine Fokusverschiebung um 11,5 mm bei 10 W Laserleistung relativ zur Fokuslage bei 1 W. Dieser Wert ist 0,7 mm kleiner als die mittels Ray-Tracing berechnete Fokusverschiebung (vgl. Bild 48 b). Allerdings stößt die Definition der Strahlkaustik an ihre Grenzen. Die z-Position, an der die maximale Intensität auf der optischen Achse lokalisiert ist, beträgt 117,5 mm und weicht um +5,4 mm von der Lage der Strahltaille z_0 = 112,1 mm ab (vgl. Bild 49 b).

Thermisch induzierte Aberrationen führen zu einer Vergrößerung des Fokusradius. Bei 10 W Laserleistung ist der Fokusradius mit 123 µm um etwa einen Faktor 7,4 größer als bei 1 W. Die Strahlqualitätskennzahl vergrößert sich von M^2 = 1,29 auf 8,44. Außerdem treten insbesondere vor dem Fokus deutliche Oszillationen des elektrischen Felds auf, die auf Interferenzeffekte zurückzuführen sind, die ihrerseits durch sphärische Aberration verursacht werden. Die Randbereiche des Laserstrahls werden aufgrund der thermischen Oberflächendeformation von Vorder- und Rückseite stärker gebrochen und interferieren mit dem inneren Bereich des Laserstrahls. Der Spitze-Tal-Wert der OPD relativ zur Referenzsphäre beträgt in der Austrittspuille 2,8 λ bei 1 W und 28,1 λ bei 10 W Laserleistung. Die OPD wird jeweils über den zweifachen Strahlradius berechnet. Im thermisch nicht belasteten Zustand ist dieser Wert mit ca. 10^{-4} λ um vier bis fünf Größenordnungen kleiner. Dies belegt den signifikanten Einfluss der thermisch induzierten Aberrationen auf die optischen Eigenschaften der Kunststofflinse. So vergrößert sich bei einer Erhöhung der Laserleistung von 1 W auf 10 W die maximale Amplitude im Fokus lediglich um den Faktor 1,31 (vgl. Bild 49), wodurch die Intensität um den Faktor 1,72 ansteigt. Ohne thermisch induzierte Aberrationen würde sich die Intensität um den Faktor 10 vergrößern.

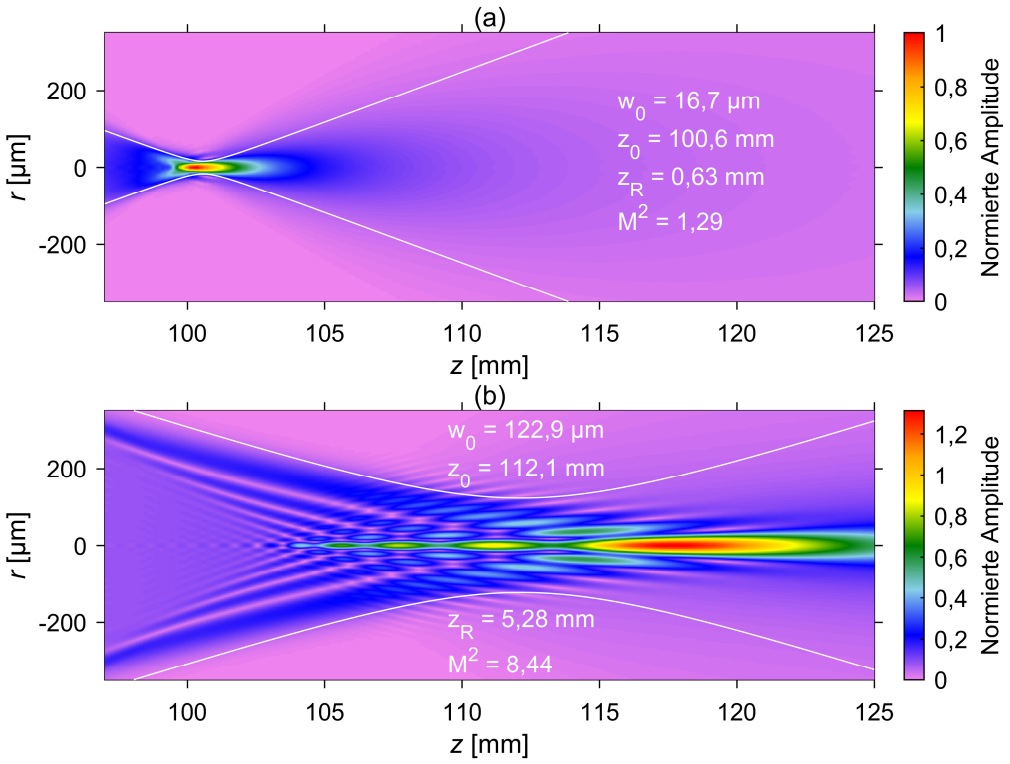


Bild 49: Amplitude der Feldkomponente E_x in der Fokusregion der PMMA-Asphäre für 1 W (a) und 10 W (b) Laserleistung. Die weißen Kurven stellen die angepasste Strahlkaustik dar.

Für ausgewählte z-Ebenen wird das experimentell gemessene Intensitätsprofil (Aufnahmen des Strahldiagnosegeräts) mit dem simulierten Intensitätsprofil verglichen. Je sechs Intensitätsprofile sind in Bild 50 einander gegenübergestellt. Als Referenz für die z-Position dient die Fokuslage bei 1 W Laserleistung, die aufgrund der geringeren thermisch induzierten Aberrationen präziser ermittelt werden kann als die Fokuslage bei 10 W. Alle Ebenen liegen vor dem Fokus, also in dem Bereich, wo Interferenzeffekte aufgrund von sphärischer Aberration das Intensitätsprofil beeinflussen. Im Experiment beträgt der Abstand der einzelnen Ebenen zueinander 2,17 mm. Für jede dieser Ebenen wird in den Simulationsdaten eine Ebene ermittelt, für die das berechnete Intensitätsprofil bestmöglich mit dem gemessenen Intensitätsprofil übereinstimmt. Dabei wird insbesondere auf die Anzahl der Ringe sowie die Intensität der Ringe im relativen Verhältnis zueinander geachtet.

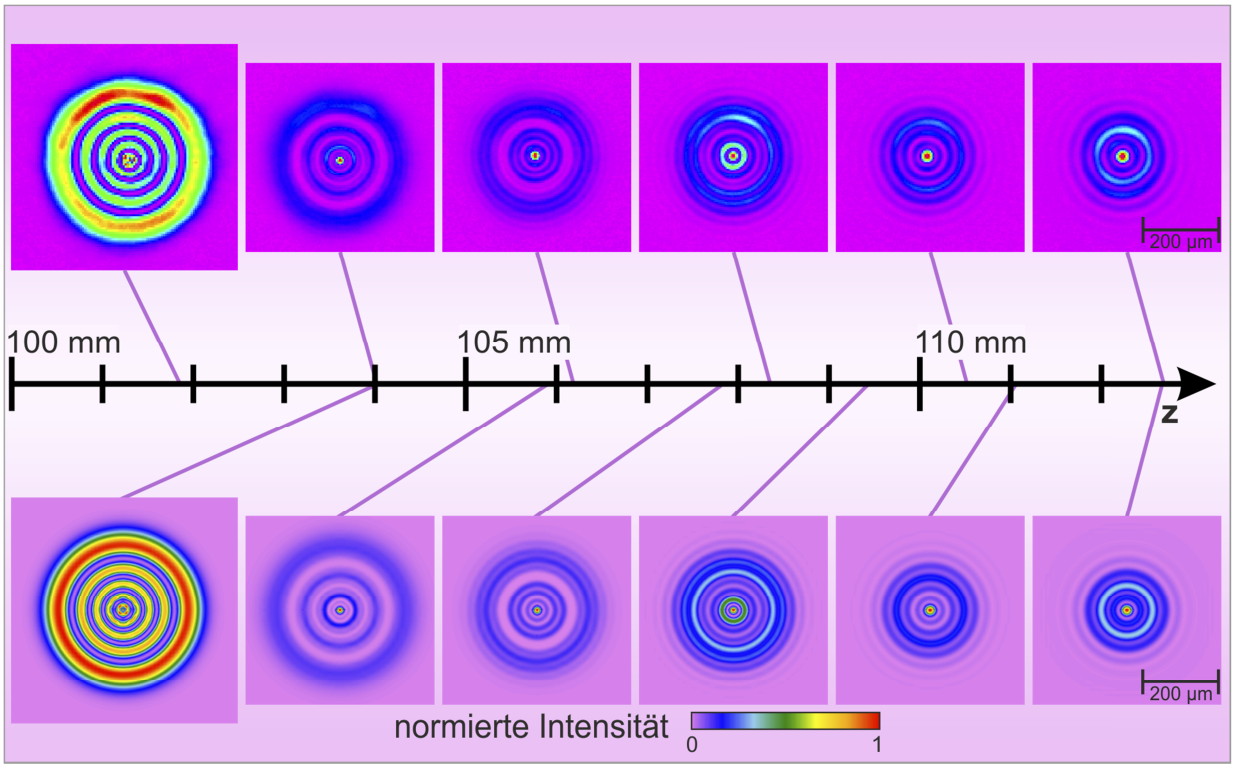


Bild 50: Vergleich der gemessenen (oben) und simulierten (unten) Intensitätsverteilungen in ausgewählten Ebenen in Propagationsrichtung der Laserstrahlung.

In der Simulation erstrecken sich die sechs Ebenen nur über einen Abstand von 8,3 mm gegenüber 10,9 mm im Experiment. Diese Abweichung ist wahrscheinlich auf die geringere Strahlqualität ($M^2 \approx 1{,}2$) des im Experiment verwendeten Lasers im Vergleich zum Grundmode-Laserstrahl in der Simulation zurückzuführen. So beträgt bei 1 W Laserleistung die Strahlqualitätskennzahl des fokussierten Laserstrahls in der Simulation $M^2 = 1{,}29$ wohingegen im Experiment $M^2 = 1{,}52$ ermittelt wird. Folglich führen die größere Rayleighlänge und der kleinere Fernfelddivergenzwinkel im Experiment zu einer Streckung der Kaustik in Propagationsrichtung. Trotz dieser Abweichung beschreibt die Simulation qualitativ den Verlauf der Intensitätsverteilung in der Fokusregion.

Die geringere Strahlqualität des Laserstrahls ließe sich in den Simulationen durch eine kohärente Überlagerung der Gauß-Grundmode mit höheren Gauß-Laguerre-Moden nachbilden. Für aussagekräftige Analysen ist die Kenntnis der Anteile der verschiedenen Lasermoden erforderlich. Die Moden der verwendeten Strahlquelle sind jedoch unbekannt.

5.2.2 Iterative Optimierung der Form der Asphäre

Zur Klärung der Frage, inwieweit sich thermisch induzierte Aberrationen für einen definierten Betriebspunkt durch eine angepasste Linsenform kompensieren lassen, werden die PMMA-Asphäre iterativ optimiert und die thermooptischen Effekte analysiert. Als Betriebspunkt werden 10 W Laserleistung bei 5,5 mm Strahldurchmesser (Grundmode-Laserstrah-

lung) gewählt. Die Optimierung wird in folgenden Schritten durchgeführt:

1. Berechnung von Temperaturprofil und Oberflächendeformation mittels einer FEA;
2. Approximation der diskreten FE-Daten und Übergabe an das Ray-Tracing-Programm;
3. Optimierung der Linsenform, sodass die thermisch induzierten Aberrationen minimiert werden und der Fokus 99,40 mm hinter der Linsenrückseite liegt;
4. Übergabe der neuen Linsenform an die FEA und Wiederholung der Optimierung ab Schritt 1.

Die Vorgehensweise der iterativen Optimierung ist außerdem im Ablaufdiagramm in Bild 51 dargestellt.

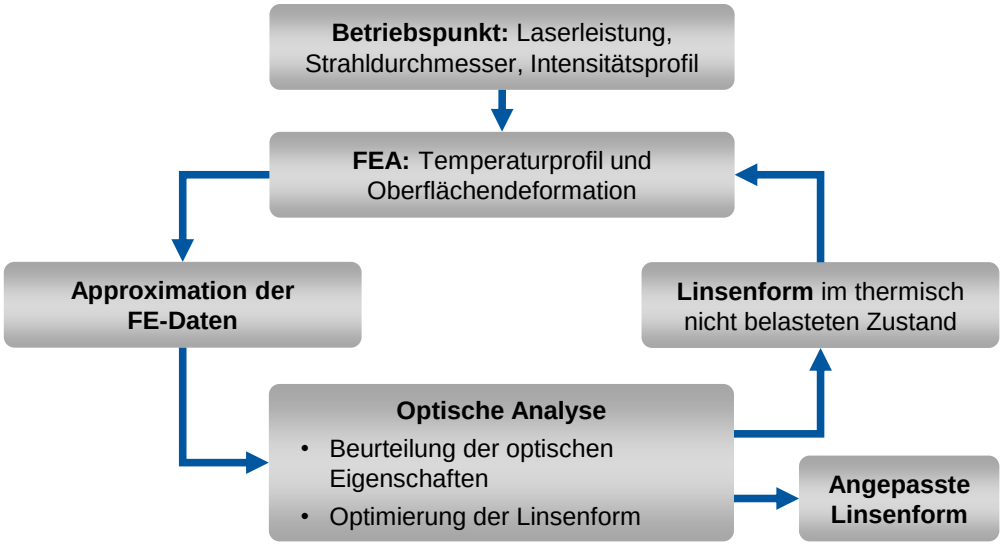


Bild 51: Vorgehensweise zur iterativen Optimierung der Linsenform für einen bestimmten Betriebspunkt.

Freie Parameter bei der Optimierung der Linsenform sind der Krümmungsradius der Linsenvorderseite R_1 sowie die asphärischen Koeffizienten der Ordnung vier und sechs, α_4 und α_6. Die konische Konstante ($k = -1$), die Mittendicke der Linse sowie die plane Rückseite werden nicht verändert. Die Optimierung der Linsenform erfolgt durch eine Minimierung des RMS-Spotradius in der Bildebene. Dazu werden zehn Ringe verteilt über den 1,5-fachen Strahldurchmesser verwendet. Dieser Durchmesser entspricht einem Leistungseinschluss des Gaußstrahls von 98,9 %. Die schrittweise Änderung der Linsenform ist Tabelle 13 zu entnehmen. Bereits nach zwei Iterationsschritten konvergiert die Optimierung gegen den Sollwert für die Fokuslage. Außerdem verringert sich der Spitze-Tal-Wert der OPD in der Fokusebene von 2,52 λ auf $< 0{,}05\ \lambda$ (jeweils über den 1,5-fachen Strahldurchmesser).

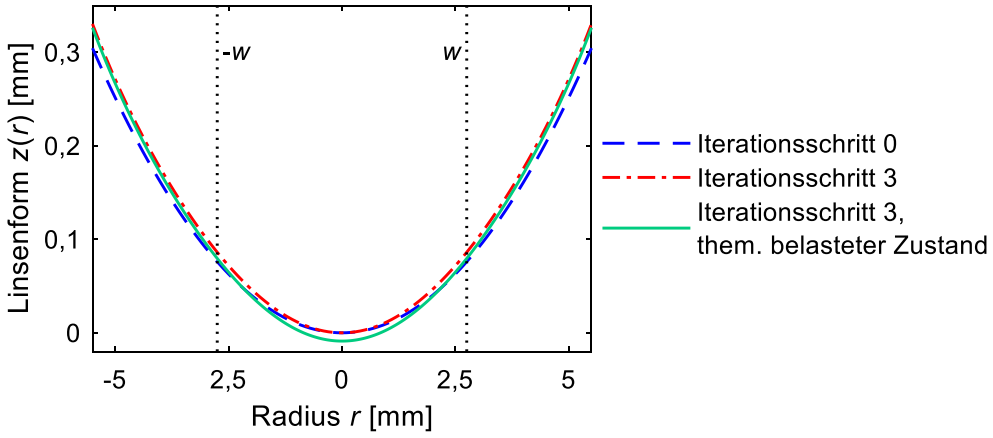
Tabelle 13: Ergebnisse der iterativen Anpassung der Linsenform.

Iterations-schritt	R_1 [mm]	α_4 [mm^{-4}]	α_6 [mm^{-6}]	BFL* [mm]	Spitze-Tal-Wert der OPD** [λ]
0	49,748	$4{,}278\cdot10^{-7}$	$2{,}833\cdot10^{-11}$	106,320	2,52
1	41,692	$-9{,}433\cdot10^{-5}$	$1{,}941\cdot10^{-6}$	99,416	0,035
2	41,672	$-9{,}490\cdot10^{-5}$	$1{,}961\cdot10^{-6}$	99,400	0,026
3	41,673	$-9{,}483\cdot10^{-5}$	$1{,}958\cdot10^{-6}$	99,400	0,037

*Rückseitige Brennweite (engl. *back focal length*, BFL) bei thermischer Belastung mit 10 W Laserleistung.
**In der jeweiligen Fokusebene.

Die ursprüngliche und die optimierte Form der Linsenvorderseite, letztere für den thermisch nicht belasteten sowie den thermisch belasteten Zustand, sind in Bild 52 einander gegenübergestellt. Der negative Wert für die Linsenform auf der optischen Achse ($r = 0$) wird durch die Zunahme der Mittendicke der Linse bei Erwärmung verursacht. Die optimierte Form der Linsenvorderseite im thermisch belasteten Zustand stimmt nicht mit der ursprünglichen Form (Iterationsschritt 0) überein. Grund hierfür ist, dass neben der Deformation der Linsenvorderseite auch der Einfluss der thermischen Deformation der Linsenrückseite sowie des Brechungsindexprofils kompensiert werden muss.

Bild 52: Vergleich der ursprünglichen und der optimierten Linsenform.



Im Folgenden werden die optischen Eigenschaften der optimierten PMMA-Asphäre (Iterationsschritt 3) analysiert und mit denen der nicht optimierten Linse verglichen. Die Ergebnisse der angepassten Strahlkaustiken (vgl. Bild 64 im Anhang 8.10) sind in Tabelle 14 aufgelistet.

Tabelle 14: Ergebnisse der angepassten Strahlkaustiken für die ursprüngliche und optimierte Linsenform.

Optimierte Linsenform	P [W]	w_0 [µm]	z_0 [mm]	z_R [mm]	M^2
Nein	1	16,7	100,6	0,63	1,29
Nein	10	122,9	112,1	5,28	8,44
Ja	10	13,3	99,9	0,50	1,03

Die Amplitude der Feldkomponente E_x in der Fokusregion ist in Bild 53 für die ursprüngliche und die optimierte Linsenform der PMMA-Asphäre dargestellt. Durch die gezielte Auslegung der Linsenform für den Betriebspunkt von 10 W Laserleistung bei 5,5 mm Strahldurchmesser können die thermisch induzierten Aberrationen signifikant reduziert werden. Der Fokusradius verkleinert sich um den Faktor 9,2 auf 13,3 µm. Die Fokussierung ist nahezu beugungsbegrenzt, da die Strahlqualitätskennzahl M^2 = 1,03 ist. Die maximale Intensität im Fokus erhöht sich, verglichen mit der nicht optimierten Linse, um das 6,1-Fache.

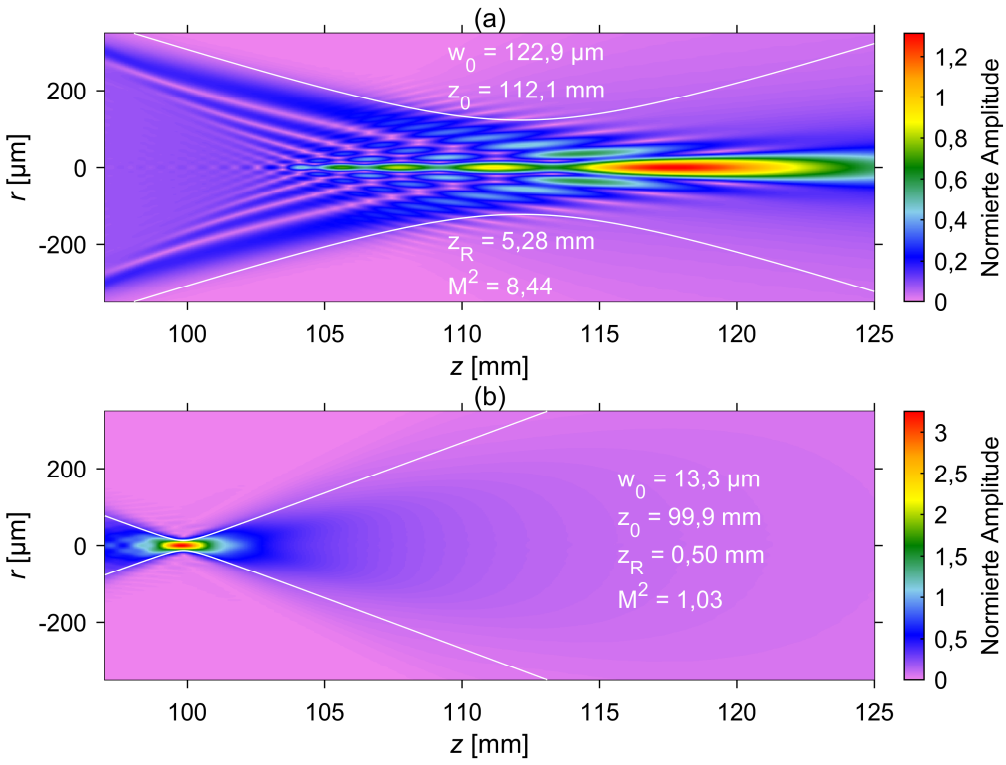


Bild 53: Amplitude der Feldkomponente E_x in der Fokusregion für die ursprüngliche (a) und die optimierte PMMA-Asphäre (b), jeweils bei 10 W Laserleistung. Die weißen Kurven stellen die Strahlkaustik dar.

Zur Abschätzung des Einflusses möglicher Abweichungen vom Betriebspunkt werden die Laserleistung P sowie der Strahldurchmesser d jeweils um ±10 % variiert und die Strahlkaustik analysiert. Die Ergebnisse sind in Tabelle 15 aufgeführt. Eine Variation der Leistung um ±1 W ruft eine Verschiebung der Fokuslage um ca. ±1 mm hervor. Gleichzeitig vergrößert sich der Fokusradius auf 16 µm bzw. 18 µm und die Strahlqualitätskennzahl nimmt auf $M^2 \approx 1{,}3$ zu. Eine Abweichung des Strahldurchmessers auf der Linse vom Sollwert beeinflusst signifikant die Strahlkaustik und die Strahlqualität. Bei einer Verkleinerung auf d = 10,0 mm resultiert eine Strahlqualitätskennzahl von M^2 = 2,41, eine Vergrößerung auf d = 12,0 mm führt zu M^2 = 1,87. Die Fokuslage variiert um etwa 1,3 mm. Um die thermooptischen Effekte bestmöglich zu kompensieren, müssen die Bedingungen des Betriebspunkts möglichst präzise eingehalten werden.

Tabelle 15: Einfluss einer Abweichung von Laserleistung und Strahldurchmesser vom Betriebspunkt auf die Strahlkaustik.

P [W]	d [mm]	w_0 [µm]	z_0 [mm]	z_R [mm]	M^2
10	11,0	13,3	99,9	0,50	1,03
9	11,0	16,1	98,7	0,60	1,27
11	11,0	18,0	101,0	0,69	1,38
10	10,0	31,3	101,3	1,20	2,41
10	12,0	23,7	98,7	0,89	1,87

Die experimentellen Analysen und Simulationen der PMMA-Asphäre zeigen, dass thermooptische Effekte in Kunststoffoptiken einen signifikanten Einfluss sowohl auf die Fokuslage als auch auf die Intensitätsverteilung in der Fokusregion haben. Im konkreten Beispiel resultiert bei 10 W Laserleistung, entsprechend einer maximalen Intensität von 84 W/cm² auf der Linse, eine Fokusverschiebung um etwa 15 % der Brennweite. Außerdem verringern thermisch induzierte Aberrationen signifikant die Strahlqualität (M^2 = 8,44). Durch eine Optimierung der Linsenform für einen definierten Betriebspunkt können die thermooptischen Effekte fast vollständig kompensiert und eine nahezu beugungsbegrenzte Fokussierung (M^2 = 1,03) erzielt werden, wie die iterative Optimierung und Simulation der Feldverteilung in der Fokusregion zeigen.

5.3 Optiken zur Erzeugung hoher Harmonischer mittels ultrakurzen Laserpulsen

In diesem Abschnitt werden drei Fokussieroptiken ausgelegt und hinsichtlich thermooptischer sowie dispersiver Effekte analysiert. Dabei werden ein chromatisch nicht korrigiertes Doublet aus Quarzglas sowie zwei achromatische Doublets aus CaF_2 und Quarzglas bzw. aus zwei Standardgläsern miteinander verglichen. Die effektive Brennweite, die rückseitige Brennweite und die Apertur werden so gewählt, dass sich die Optiken zur Fokussierung ultrakurzer Laserpulse für die Erzeugung hoher Harmonischer eignen.

Wie in Abschnitt 2.6.3 dargelegt, sind für die Erzeugung hoher Harmonischer Intensitäten von 10^{13} W/cm² bis 10^{15} W/cm² erforderlich. Für die folgenden Analysen wird ein Yb:YAG-basiertes Ultrakurzpuls-Lasersystem mit 400 W mittlerer Leistung, einer Repetitionsrate von 10 MHz sowie einer Pulsdauer von 92,5 fs, die durch nichtlineare Pulskompression erzielt wird, angenommen. Bei einem Fokusradius von 7 µm ergeben diese Parameter eine Pulsspitzenintensität von $5{,}6 \cdot 10^{14}$ W/cm² auf der optischen Achse.

Für die multiphysikalischen Analysen wird das durch Selbstphasenmodulation ($\tilde{\phi}_{NL} = 4\pi$) verbreiterte Spektrum eines gaußförmigen Pulses mit 800 fs Pulsdauer (vgl. Bild 9 in Abschnitt 2.6.1) verwendet und diskretisiert. Die Halbwertsbreite des Spektrums beträgt 24,7 nm. Bei der Ver-

wendung von 89 diskreten Wellenlängen (vgl. Bild 54 a) resultiert mit 93,7 fs eine um ca. 1,3 % größere Pulsdauer als im Fall, wenn das kontinuierliche Spektrum verwendet wird. Dieser Effekt ist auf die Fourier-Transformation vom Wellenlängenraum in den Zeitraum in *VirtualLab Fusion* zurückzuführen. Die Verwendung von 400 diskreten Wellenlängen würde den Fehler auf 0,4 % reduzieren, allerdings den Rechenaufwand vervierfachen.

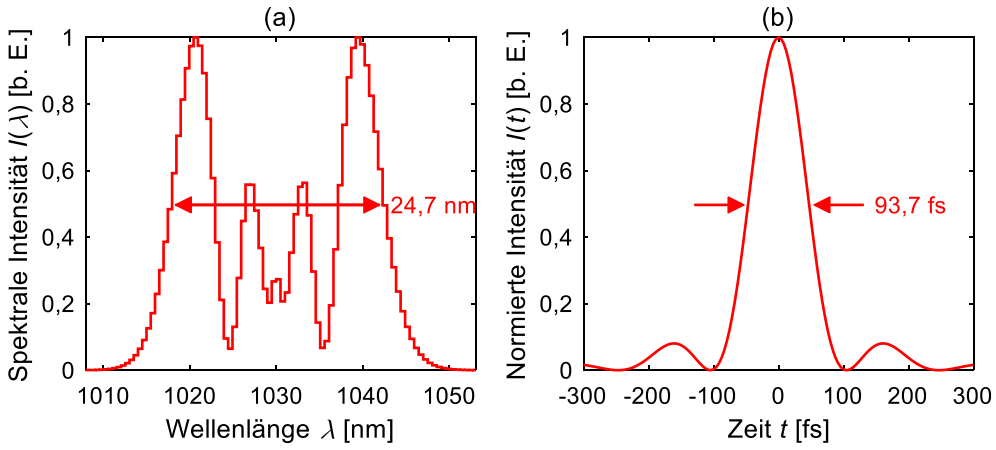


Bild 54: Diskretes Spektrum (a) für die multiphysikalischen Analysen sowie zeitlicher Verlauf des Pulses (b).

5.3.1 Auslegung der Fokussieroptiken

Zur Fokussierung der ultrakurzen Laserpulse werden drei Doublets ausgelegt. Die Freiheitsgrade bei der Auslegung sind die Krümmungsradien der vier Oberflächen, die Mittendicken sowie der Abstand zwischen den zwei Linsen. Als Materialien werden die folgenden Kombinationen gewählt:

- Doublet 1 besteht aus dem synthetischen Quarzglas Heraeus Suprasil 3001, das aufgrund des geringen OH-Gehalts einen Volumenabsorptionskoeffizienten von < 1 ppm/cm aufweist. Das Doublet wird ausschließlich für die Zentralwellenlänge 1030 nm optimiert.
- Doublet 2: Die bikonvexe Linse besteht aus CaF_2, die Meniskuslinse aus Suprasil 3001. CaF_2 weist im Vergleich zu Gläsern mit 20 ppm/cm einen deutlich geringeren Volumenabsorptionskoeffizienten auf (vgl. Tabelle 1). Der Brechungsindex von Quarzglas und CaF_2 ist bei 1030 nm Wellenlänge nahezu identisch. Da sich die Abbe-Zahl mit 67,8 und 95,2 deutlich unterscheidet, ist die Auslegung eines achromatischen Doublets für den Wellenlängenbereich von 1010 nm bis 1050 nm möglich.
- Doublet 3 besteht aus der Kombination zweier Gläser, N-LAK22 und N-SF66. Krongläser der Gruppe LAK und Flintgläser der Gruppe SF werden häufig für achromatische Doublets verwendet. Die Brechungsindizes bei 1030 nm Wellenlänge sowie die Abbe-Zahlen unterscheiden sich jeweils deutlich (vgl. Tabelle 16), sodass die Gläser geeignet sind, um einen Achromaten auszulegen.

Die verwendeten Materialdaten sind in Tabelle 16 aufgeführt. Die Linsendurchmesser betragen jeweils 25,4 mm. Als weitere Randbedingungen für die Auslegung werden eine effektive Brennweite von 65 mm und eine rückseitige Brennweite von ≥ 50 mm gewählt. Um einen Fokusradius von 7 µm bei einer Strahlquelle mit M^2 = 1,2 zu erzielen, ist somit ein Strahldurchmesser von 7,3 mm auf der ersten Linse erforderlich. Dieser entspricht ca. einem Drittel der freien Apertur der Fokussieroptiken. Somit wird eine Erwärmung der Optikhalterung durch Laserstrahlung verhindert.

Material	n(1030 nm)	Abbe-Zahl ν_d	$\mathrm{d}n/\mathrm{d}T$ [10^{-6}/K]	α_{th} [10^{-6}/K]	κ [W/(m K)]	α_{abs} [%/cm]	Quellen
Heraeus Suprasil 3001	1,450326	67,8	9,6	0,51	1,38	<0,0001	[22, 36]
CaF_2	1,428688	95,2	–11,5	18,7	9,71	0,002	[37, 38]
N-LAK22	1,637961	55,89	1,0	7,4	0,880*	0,24	[19]
N-SF66	1,881209	20,88	–2,1	6,8	0,800	0,36	[19]

Tabelle 16: Materialdaten für die drei Doublets. *Wert für N-LAK21, da keine Daten für N-LAK22 in [19] vorliegen.

Um in den Simulationen die dispersiven Effekte berücksichtigen zu können, wird für Suprasil 3001 und CaF_2 jeweils das Sellmeier-Modell für $n(\lambda)$ gemäß Formel **2.1** verwendet. Für die beiden Gläser wird hingegen das nichtlineare Modell für $n(\lambda, T)$ gemäß Formel **2.5** verwendet, das zudem die nichtlineare Änderung des thermooptischen Koeffizienten mit der Temperatur berücksichtigt.

Eine Schnittdarstellung der ausgelegten Doublets findet sich in Bild 55. Die rot eingezeichneten Strahlen entsprechen jeweils dem Strahldurchmesser (1/e²).

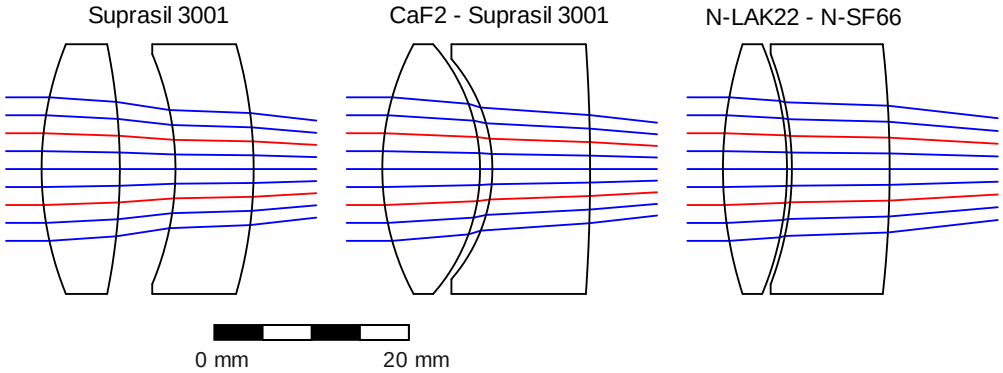


Bild 55: Schnittdarstellungen der drei Doublets. Die rot eingezeichneten Strahlen kennzeichnen den Strahldurchmesser (1/e²).

Zur ersten Beurteilung der auftretenden chromatischen Effekte wird die Fokusverschiebung in Abhängigkeit von der Wellenlänge analysiert (vgl. Bild 56). Dazu wird im Ray-Tracing-Modell die Wellenlänge sukzessive von 1010 nm auf 1050 nm erhöht und die rückseitige Brennweite mittels einer Optimierung der Position der Bildebene ermittelt. Der Durchmesser des verwendeten Strahlenbündels entspricht hierbei dem zweifa-

chen Strahldurchmesser, also einer eingeschlossenen Leistung des Gaußstrahls von 99,97 %.

Das Doublet aus Suprasil 3001 weist eine Fokusverschiebung um 69,7 µm über den analysierten Wellenlängenbereich auf. Bei einem Fokusradius von 7 µm entspricht dies einer Verschiebung um 0,47 z_R. Für die chromatisch korrigierten Doublets beträgt die Fokusverschiebung 1,0 µm (CaF_2 - Suprasil 3001) bzw. 0,8 µm (N-LAK22 - N-SF66). Bezogen auf die Rayleighlänge ist $\Delta f \leq 0{,}007\ z_R$, sodass keine dispersiven Effekte zu erwarten sind.

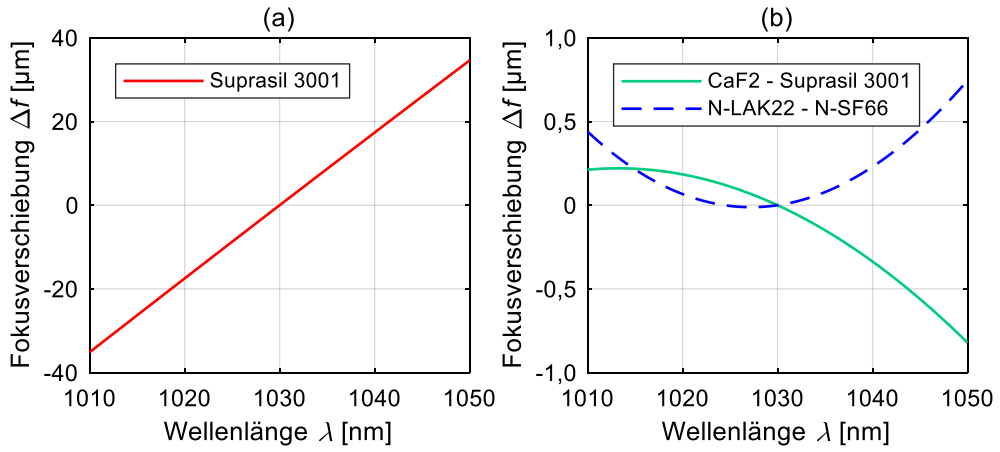


Bild 56: Fokusverschiebung in Abhängigkeit von der Wellenlänge.

Darüber hinaus wird die Propagationszeitdifferenz (engl. *propagation time difference*, PTD) zwischen der Phasen- und der Pulsfront mittels strahlenoptischer Methoden berechnet [99, 100] (vgl. Bild 57).

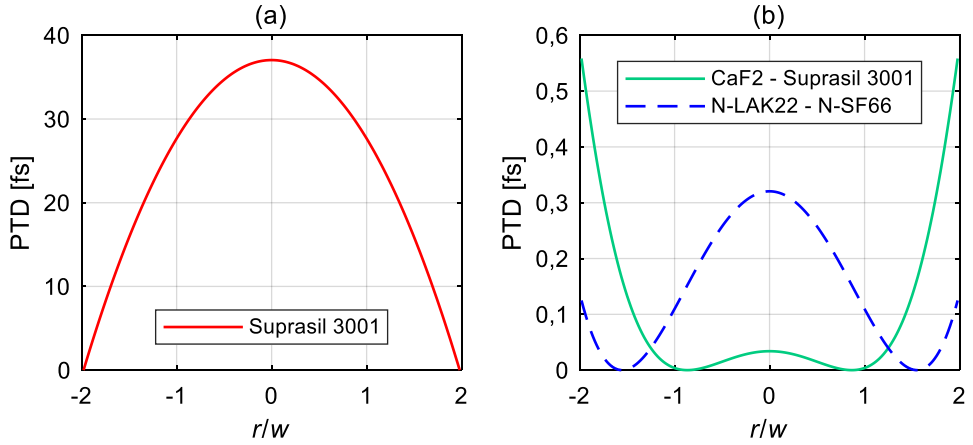


Bild 57: PTD über den zweifachen Strahldurchmesser für die drei Doublets.

Für das Doublet aus Suprasil 3001 weist die PTD eine parabolische Form auf. Der Spitze-Tal-Wert über den zweifachen Strahldurchmesser beträgt 37,0 fs. Für die chromatisch korrigierten Doublets liegt dieser Wert unterhalb von 0,6 fs, sodass für Pulse mit einer Eingangspulsdauer von etwa 100 fs keine für den HHG-Prozess relevante Verlängerung der Pulsdauer in der Fokusregion aufgrund von chromatischen Effekten zu erwarten ist.

5.3.2 Thermomechanische Analyse

Für die thermomechanische FEA werden tubusförmige Halterungen konstruiert, in denen die Linsen mittels Ringen positioniert werden (vgl. Bild 58). Als Material wird eloxiertes Aluminium gewählt, dessen Emissionsgrad zu 0,85 angenommen wird. Die Erzeugung hoher Harmonischer findet im Vakuum statt, da die EUV-Strahlung in der Luft absorbiert würde. Wird die Fokussieroptik ebenfalls in der Vakuumkammer platziert, kann Wärme nicht über Konvektion an die Umgebung abgegeben werden sondern nur über Wärmestrahlung. Wärmeleitung zwischen der Halterung und der Vakuumkammer wird in der FEA nicht berücksichtigt, da lediglich ein Schnitt in radialer Richtung analysiert wird. Folglich wird für die Wärmeableitung die ungünstigste Anordnung angenommen. Je nach thermischer Ankopplung des Halters an die Vakuumkammer reduziert sich die Temperatur der Linsen.

Der Absorptionsgrad in den AR-Beschichtungen wird zu 10 ppm je Oberfläche angenommen, da mittels Ionenstrahlsputtern Beschichtungen mit einem Absorptionsgrad < 10 ppm hergestellt werden können [124]. Die Volumenabsorptionskoeffizienten sind in Tabelle 16 aufgeführt. Die thermische Last aufgrund von Absorption von Laserstrahlung wird auf Basis der mittleren Laserleistung berechnet und als zeitunabhängig angenommen. Diese Annahme ist plausibel, da aufgrund der hohen Repetitionsrate von 10 MHz Wärmeakkumulation im Material stattfindet. Die resultierenden Temperaturprofile im thermischen Gleichgewichtszustand sind in Bild 58 dargestellt.

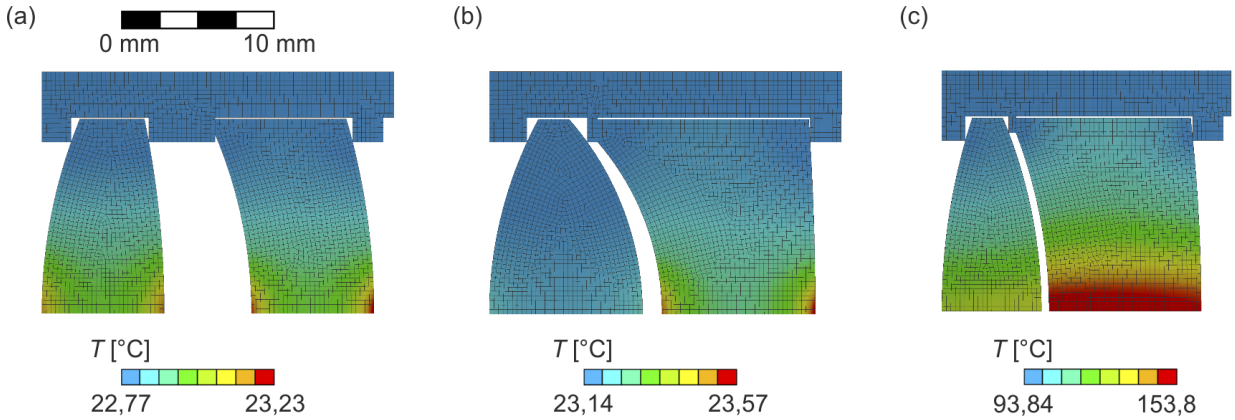


Bild 58: Simulierte Temperaturverteilung für die drei Doublets bei 400 W Laserleistung: (a) Suprasil 3001, (b) CaF_2 - Suprasil 3001 und (c) N-LAK22 - N-SF66.

Das Doublet aus Suprasil 3001 sowie das chromatisch korrigierte aus CaF_2 und Suprasil 3001 erwärmen sich um weniger als 2 °C gegenüber der Ausgangstemperatur von 22 °C. Aufgrund der kristallinen Struktur weist CaF_2 mit 9,7 W/(m K) eine große Wärmeleitfähigkeit auf. In der Folge erwärmt sich die Linse nahezu homogen. Für die Linsen des Doublets aus N-LAK22 und N-SF66 werden aufgrund des hohen Volumenabsorptionskoeffizienten von 0,24 %/cm bzw. 0,36 %/cm Maximaltempe-

raturen von 133,5 °C bzw. 153,8 °C berechnet. Die Temperatur des Halters beträgt im thermischen Gleichgewicht ca. 94 °C. Die Erwärmung der Linsen auf > 100 °C lässt signifikante thermooptische Effekte erwarten, die im Folgenden analysiert werden.

5.3.3 Einfluss thermooptischer und dispersiver Effekte auf die Fokussierung ultrakurzer Laserpulse

Die komplexen Felddaten in der Fokusregion werden entsprechend der in Abschnitt 3.6.2 beschriebenen Methoden ausgewertet. An den Verlauf der Strahlradien mit der Propagationskoordinate z wird die Strahlkaustik angepasst (vgl. Bild 59). Die z-Position entspricht jeweils dem Abstand zur Rückseite der zweiten Linse. Die aus den Anpassungen abgeleiteten Größen, der Fokusradius w_0, die Fokuslage z_0, die Rayleighlänge z_R sowie die Strahlqualitätskennzahl M^2 sind in Tabelle 17 aufgeführt.

Das chromatisch nicht korrigierte Doublet aus Suprasil 3001 führt zu einer nahezu beugungsbegrenzten Fokussierung. Die Strahlqualitätskennzahl beträgt M^2 = 1,02. Der in der Simulation angenommene Grundmode-Laserstrahl mit 7,3 mm Durchmesser wird auf den Fokusradius w_0 = 5,9 µm fokussiert. Bei einem Laserstrahl mit geringerer Strahlqualität würde sich der Fokusradius vergrößern, beispielsweise für M^2 = 1,2 auf w_0 = 7,1 µm. Wie im Folgenden dargelegt, führen dispersive Effekte obgleich der spektralen Breite des Pulses von 24,7 nm nicht zu einer Vergrößerung des Fokusradius. Thermisch induzierte Effekte verursachen lediglich eine Fokusverschiebung um –7 µm.

Tabelle 17: Ergebnisse der angepassten Strahlkaustiken für die drei Doublets.

Doublet	P [W]	w_0 [µm]	z_0 [mm]	z_R [µm]	M^2
Suprasil 3001	0	5,9	50,004	103	1,02
	400	5,9	49,997	103	1,02
CaF_2 - Suprasil 3001	0	5,9	48,679	107	1,00
	400	5,9	48,686	107	1,00
N-LAK22 - N-SF66	0	5,8	56,876	102	1,00
	400	15,3	56,065	273	2,60

Das chromatisch korrigierte Doublet aus CaF_2 und Suprasil 3001 ergibt mit einem Fokusradius von 5,9 µm eine beugungsbegrenzte Fokussierung, sowohl im thermisch nicht belasteten Zustand als auch bei 400 W mittlerer Laserleistung. Die Strahlqualitätskennzahl beträgt in beiden Fällen M^2 = 1,00. Der Fokus verschiebt sich bei thermischer Belastung um etwa +7 µm.

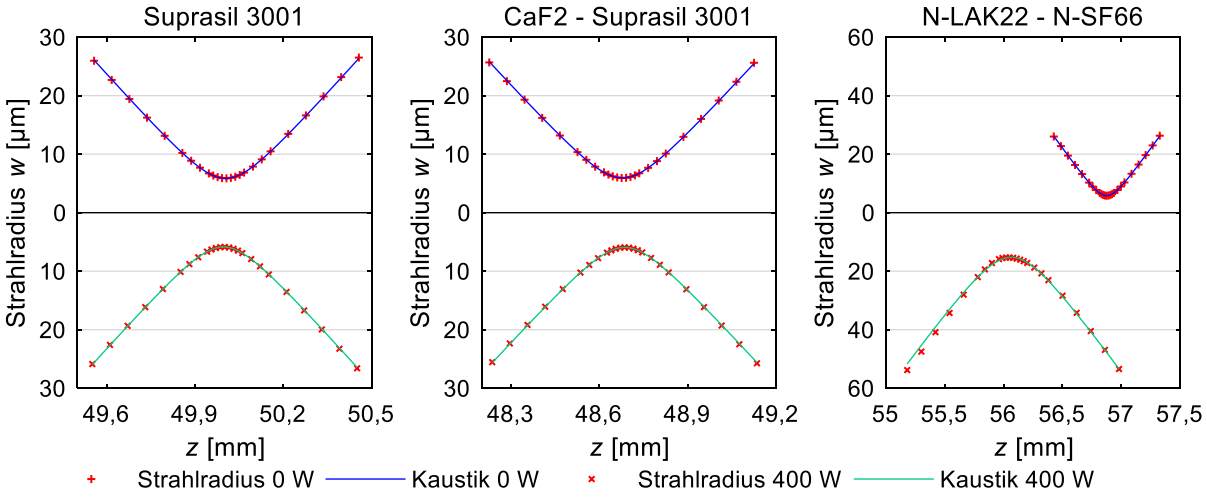


Bild 59: Berechnete Strahlradien sowie angepasste Strahlkaustiken für die drei Doublets bei 0 W (oben) und 400 W Laserleistung (unten).

Das achromatische Doublet aus N-LAK22 und N-SF66 ermöglicht im thermisch nicht belasteten Zustand ebenfalls eine beugungsbegrenzte Fokussierung mit einem Fokusradius w_0 = 5,8 µm. Das thermisch induzierte Brechungsindexprofil sowie die Oberflächendeformationen verursachen bei 400 W mittlerer Laserleistung jedoch signifikante Aberrationen. Der Fokus verschiebt sich um –0,81 mm und der Fokusradius vergrößert sich auf w_0 = 15,3 µm. Die Strahlqualitätskennzahl nimmt entsprechend auf M^2 = 2,60 zu. Folglich sind Achromate aus Gläsern, die, verglichen mit Quarzglas, einen hohen Volumenabsorptionskoeffizienten aufweisen, für den Einsatz bei hohen mittleren Leistungen ungeeignet.

In Bild 60 ist die mittels wellenoptischer Methoden berechnete Intensitätsverteilung in der Fokusregion für die Zentralwellenlänge von 1030 nm und 400 W mittlere Laserleistung dargestellt. Für die Doublets aus Suprasil 3001 sowie der Materialkombination CaF_2 - Suprasil 3001 sind keine thermisch induzierten Aberrationen erkennbar. Die Intensitätsverteilung im Fokus des Doublets aus den Gläsern N-LAK22 und N-SF66 ist hingegen asymmetrisch geformt. Die Spitzenintensität ist um ca. 55 % geringer als für die beiden anderen Doublets. Hinter dem Fokus treten Interferenzstrukturen auf, die auf negative sphärische Aberration zurückgeführt werden können. Die Randstrahlen werden also weniger stark gebrochen als die achsnahen Strahlen.

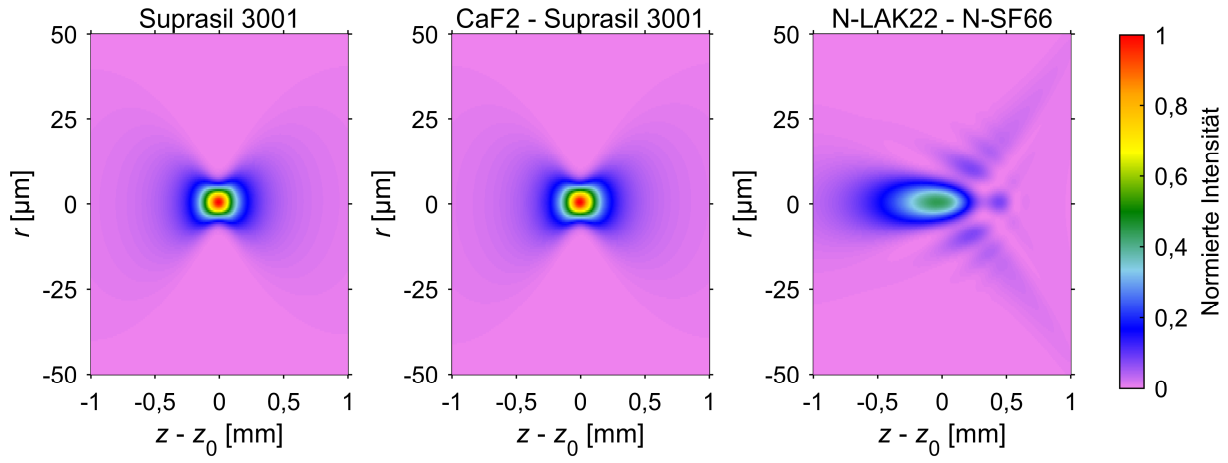


Bild 60: Normierte Intensitätsverteilung in der Fokusregion bei 400 W mittlerer Laserleistung für die Zentralwellenlänge 1030 nm.

Um den Einfluss dispersiver Effekte auf die Pulsdauer in der Fokusregion zu analysieren, wird die Pulsdauer auf der optischen Achse für die 25 z-Positionen bestimmt. Dazu wird die Halbwertsbreite der Amplitude $E_x^2(t)$ berechnet, die der Pulsdauer τ entspricht. Die resultierende Pulsdauer ist in Bild 61 über der z-Position aufgetragen. Wie zu Beginn dieses Abschnitts geschildert, führt die Verwendung des diskreten Spektrums zu einer Ungenauigkeit der Pulsdauer von ca. 1,3 %. Als Referenzwert für die ursprüngliche Pulsdauer ist in Bild 61 (gestrichelte Linie) daher τ_0 = 93,7 fs eingezeichnet.

Für das Doublet aus Suprasil 3001 ergibt die Simulation im Fokus eine Zunahme der Pulsdauer auf der optischen Achse um 0,7 fs. Für das chromatisch korrigierte Doublet aus CaF_2 und Suprasil 3001 ist die Pulsdauer hingegen von der z-Position unabhängig. Beim Doublet aus den Standardgläsern variiert die Pulsdauer im Abstand von 0,3 mm bis 0,8 mm zur Fokuslage z_0 um etwa 1,5 fs. Diese Variation ist wahrscheinlich auf die thermisch induzierte, negative sphärische Aberration zurückzuführen.

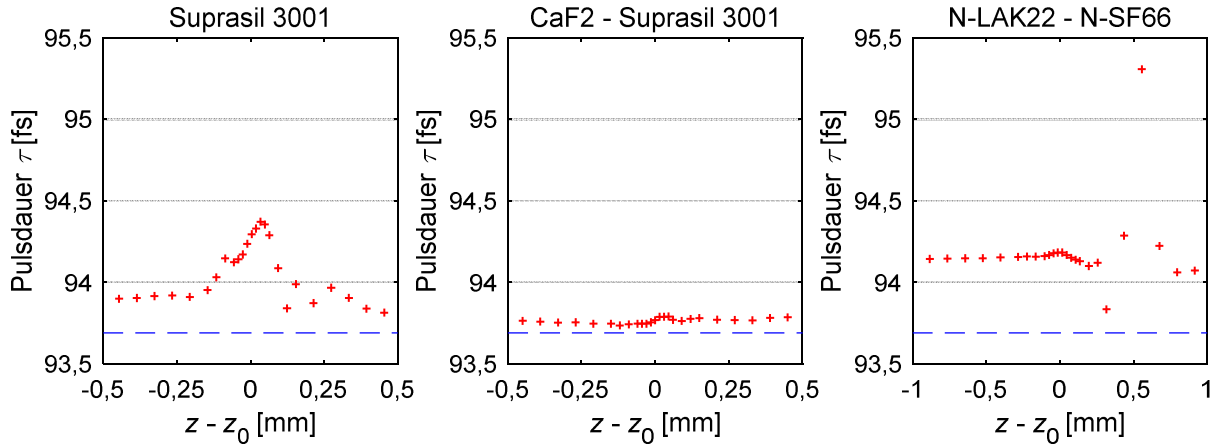


Bild 61: Pulsdauer auf der optischen Achse für die drei Doublets. Die gestrichelte Linie gibt die Referenz τ_0 = 93,7 fs an.

Auf Basis der durchgeführten Analysen lassen sich folgende Empfehlungen für die Fokussierung ultrakurzer Laserpulse zur Erzeugung hoher Harmonischer ableiten:

- Achromatische Doublets bestehend aus Standardgläsern wie z. B. N-LAK22 und N-SF66 eignen sich aufgrund signifikanter thermooptischer Effekte nicht zur Fokussierung ultrakurzer Laserpulse mit hoher mittlerer Leistung.
- Für ultrakurze Laserpulse mit einer Pulsdauer von etwa 100 fs und einer spektralen Breite von 25 nm treten bei der Fokussierung mit einem Doublet aus Quarzglas keine signifikanten dispersiven Effekte auf. Die Fokussierung ist nahezu beugungsbegrenzt und die Pulsdauerverlängerung auf der optischen Achse beträgt < 1 fs.
- Für spektrale Breiten der Pulse > 25 nm ist die Verwendung eines achromatisch korrigierten Doublets bestehend aus CaF_2 und Quarzglas mit einem geringen OH-Gehalt zu empfehlen, um eine beugungsbegrenzte Fokussierung zu gewährleisten. Aufgrund des geringen Volumenabsorptionskoeffizienten dieser Materialien treten bei 400 W mittlerer Leistung keine relevanten thermooptischen Effekte auf.

6 Zusammenfassung und Ausblick

Thermooptische Effekte sind in vielen Bereichen der Lasertechnik von zentraler Bedeutung, da zunehmend Strahlquellen mit Leistungen im Muli-Kilowatt-Bereich eingesetzt werden. Die Auslegung von thermisch stabilen optischen Systemen erfordert eine multiphysikalische Analyse, die über das klassische Optikdesign hinausgeht.

Für die Simulation thermooptischer Effekte in Laseroptiken werden im Rahmen dieser Arbeit die von Gatej et al. entwickelten Methoden wesentlich erweitert. Diese basieren auf einer Kopplung von thermomechanischer FEA und optischer Analyse mittels Ray-Tracing. Durch die Erweiterung dieser Kopplung können neben dem temperaturabhängigen Brechungsindexprofil nun thermisch induzierte Oberflächendeformationen präzise berücksichtigt werden. Zur Approximation der diskreten Deformationsdaten aus der FEA werden zwei numerische Algorithmen verwendet, die deutliche Vorteile gegenüber der Verwendung von Zernike-Polynomen bieten. Weiterführende Untersuchungen zeigen, dass die verwendete FE-Netzstruktur keinen signifikanten Einfluss auf die optische Analyse hat, solange das Netz fein genug ist, um die thermische Last auf den Optiken aufzulösen, und die Gitterqualitätskriterien erfüllt werden.

Mit Hilfe des erarbeiteten multiphysikalischen Simulationsansatzes kann erstmals gleichzeitig der Einfluss dispersiver und thermooptischer Effekte auf ultrakurze Laserpulse analysiert werden. Dies ist für die Auslegung von optischen Systemen für ultrakurze Laserpulse hoher mittlerer Laserleistung unerlässlich. Hierzu wird die FEA mit einer optischen Analyse auf der Basis von strahlen- und wellenoptischen Methoden gekoppelt, sodass der räumliche und zeitliche Verlauf der Laserpulse in der Fokusregion berechnet werden kann.

Um die Simulationen zukünftig beschleunigen und vereinfachen zu können, sollte die direkte Übergabe der approximierten Funktionen für den Brechungsindexverlauf sowie die Oberflächendeformation an die Software *VirtualLab Fusion* erprobt werden. Dabei ist zu evaluieren, ob der *2nd-Generation-Field-Tracing*-Operator, der auf strahlenoptischen Methoden basiert, zur Berechnung der Feldverteilung in der Fokusregion geeignet ist.

Im Rahmen der experimentellen Analysen zeigt sich, dass Temperaturmessungen von optischen Oberflächen mittels Thermografie sowie von Optikhalterungen mittels Temperatursensoren nützliche Daten für die Temperaturfeldanalysen liefern. Die gemessenen Temperaturen dienen als Randbedingungen in der FEA und reduzieren so die Abweichung zwischen Simulation und Experiment. Darüber hinaus kann der Absorp-

tionsgrad eines optischen Elements indirekt durch einen Abgleich von gemessener und simulierter Temperatur ermittelt werden.

Im Folgenden werden die zentralen Ergebnisse der drei Anwendungsbeispiele zusammengefasst und der weitere Forschungsbedarf in den jeweiligen Bereichen identifiziert.

Optiken für das Selective Laser Melting (SLM)

Da transiente Fokusverschiebungen im hochdynamischen SLM-Prozess bisher experimentell nicht gemessen werden können, werden entsprechende Simulationen durchgeführt. Untersuchungen der transienten axialen und lateralen Fokusverschiebung beim Aufbau von Würfelstrukturen liefern folgende Erkenntnisse, die das Prozessverständnis vertiefen:

- Für einen konstanten Verschmutzungs- und damit Absorptionsgrad des Schutzglases vergrößern sich die thermooptischen Effekte, je näher das Schutzglas am Laserscanner positioniert ist.
- Eine räumliche und zeitliche Verteilung der thermischen Last auf dem Schutzglas, beispielsweise durch eine angepasste Belichtungsreihenfolge und Scanstrategie, verringert die Fokusverschiebung.
- Die laterale Fokusverschiebung beeinflusst die Position sowie die Länge der Scanvektoren. Dies kann einen Schrumpf sowie eine Verschiebung des Schwerpunkts der aufgebauten Strukturen verursachen.

Da der Verschmutzungs- und damit der Absorptionsgrad des Schutzglases während des SLE-Prozesses typischerweise graduell zunimmt, wäre ein entsprechendes Modell zu entwickeln, um die Verlässlichkeit der Simulation weiter zu steigern. So ließen sich auf Basis der transienten Simulationen vorhandene Scanstrategien hinsichtlich einer Minimierung thermooptischer Effekte optimieren. Darüber hinaus sollten die Simulationsergebnisse experimentell validiert werden. Hierfür wäre das neuartige Messverfahren, das die transiente Messung der Position der Scanvektoren sowie des Strahldurchmessers in der Bearbeitungsebene ermöglicht [82], voraussichtlich geeignet.

Kunststoffoptiken für Laseranwendungen

Beim Einsatz von Kunststoffoptiken zur Fokussierung von Laserstrahlung treten signifikante thermooptische Effekte bereits im Leistungsbereich von 1 W bis 10 W auf, wie die exemplarisch an einer PMMA-Asphäre durchgeführten Analysen zeigen. Die Fokusverschiebung bei 10 W (84 W/cm^2 Leistungsdichte) beträgt ca. 15 % der Brennweite. Außerdem verringern thermisch induzierte Aberrationen erheblich die Strahlqualität von $M^2 \approx 1{,}2$ auf $M^2 \approx 8{,}4$. Ohne eine geeignete Kompensation thermooptischer Effekte ist eine beugungsbegrenzte Fokussierung mit Kunststoffoptiken folglich nicht möglich.

Im Rahmen dieser Arbeit wird erstmalig der Ansatz untersucht, die Form einer Kunststofflinse iterativ anzupassen, um die thermooptischen Effekte für einen definierten Betriebspunkt passiv zu kompensieren. Erste Simulationen zeigen, dass auf diese Weise die thermisch induzierte Fokusverschiebung vollständig sowie Aberrationen weitestgehend kompensiert werden können. Die Bedingungen des Betriebszustands müssen hierzu präzise eingehalten werden, da beispielsweise eine Abweichung des Strahldurchmessers um ±10 % den Fokusradius in etwa verdoppelt.

Dennoch besteht weiterer Forschungsbedarf im Bereich der passiven Kompensation. Zur Verifikation des Lösungsansatzes, die Linsenform an den Betriebszustand anzupassen, müssten entsprechende Kunststoffoptiken gefertigt und experimentell charakterisiert werden. Darüber hinaus sollten die Toleranzen des Laserstrahls (Leistung, Strahldurchmesser und Intensitätsprofil) quantifiziert werden, innerhalb derer eine beugungsbegrenzte Fokussierung möglich ist.

Kunststoffoptiken, die hinsichtlich thermooptischer Effekte kompensiert sind, haben ein hohes Potential zur Ersetzung von Standardkomponenten aus Glas, wie z. B. einer Kollimationsoptik, im Leistungsbereich von bis zu 100 W.

Optiken zur Erzeugung hoher Harmonischer

Die Fokussierung von ultrakurzen Laserpulsen hoher mittlerer Leistung erfordert speziell angepasste Optiken, um sowohl dispersive als auch thermooptische Effekte kompensieren bzw. minimieren zu können. In dieser Arbeit werden mit Hilfe des multiphysikalischen Simulationsansatzes Fokussieroptiken, die zur Erzeugung hoher Harmonischer eingesetzt werden, hinsichtlich thermooptischer sowie dispersiver Effekte analysiert. Daraus resultieren folgende Erkenntnisse:

- Achromatische Doublets bestehend aus Standardgläsern sind aufgrund des hohen Absorptionsgrads und der damit verbundenen signifikanten thermooptischen Effekte nicht zur Fokussierung ultrakurzer Laserpulse mit hoher mittlerer Leistung geeignet.
- Die Materialkombination von CaF_2 und Quarzglas mit geringem OH-Gehalt für eine Fokussieroptik ermöglicht sowohl die Kompensation dispersiver Effekte als auch eine Minimierung thermooptischer Effekte. Bei 400 W mittlerer Leistung kann so eine beugungsbegrenzte Fokussierung von ultrakurzen Laserpulsen mit einer Pulsdauer von ca. 100 fs erzielt werden.

Die Verwendung von achromatischen optischen Systemen aus CaF_2 und Quarzglas birgt außerdem großes Potential für zukünftige Anwendungen ultrakurzer Laserpulse im Bereich der Materialbearbeitung mit mittleren Leistungen im Kilowatt-Bereich.

7 Literaturverzeichnis

[1] R. Poprawe, Ed, *Tailored Light 2: Laser Application Technology*. Berlin, Heidelberg: Springer-Verlag, 2011.

[2] A. Gatej, U. Thombansen und P. Loosen, „Kombinierte Thermo-Optische Simulation für Optische Systeme", *DGaO-Proceedings* **112**, B021 (2011).

[3] U. Thombansen, A. Gatej und M. Pereira, „Tracking the course of the manufacturing process in selective laser melting", *Proc. of SPIE* **8963**, 89630O (2014).

[4] R. Wester und A. Bäuerle, „Light shaping for illumination", *Adv. Opt. Techn.* **2**(4), 301–311 (2013).

[5] S. Thibault, J. Parent, H. Zhang, X. Du und P. Roulet, „Consumer electronic optics: How small can a lens be? The case of panomorph lenses", *Proc. of SPIE* **9192**, 91920H (2014).

[6] S. Bäumer, *Handbook of plastic optics*, 2nd rev. and enl. ed. Weinheim: Wiley-VCH, 2010.

[7] N. G. Sultanova, S. N. Kasarova und I. D. Nikolov, „Characterization of optical properties of optical polymers", *Opt. Quant. Electron.* **45**(3), 221–232 (2013).

[8] S. N. Kasarova, N. G. Sultanova und I. D. Nikolov, „Polymers in lens design for laser applications", *Proc. of SPIE* **9447**, 94471J (2015).

[9] S. Hädrich, A. Klenke, J. Rothhardt, M. Krebs, A. Hoffmann, O. Pronin, V. Pervak, J. Limpert und A. Tünnermann, „High photon flux table-top coherent extreme-ultraviolet source", *Nat. Photon.* **8**(10), 779–783 (2014).

[10] S. Hädrich, M. Krebs, A. Hoffmann, A. Klenke, J. Rothhardt, J. Limpert und A. Tünnermann, „Exploring new avenues in high repetition rate table-top coherent extreme ultraviolet sources", *Light Sci. Appl.* **4**(8), e320-e320 (2015).

[11] T. Popmintchev, M.-C. Chen, P. Arpin, M. M. Murnane und H. C. Kapteyn, „The attosecond nonlinear optics of bright coherent X-ray generation", *Nat. Photon.* **4**(12), 822–832 (2010).

[12] J. Weitenberg, *Transversale Moden in optischen Resonatoren für Anwendungen hoher Laserintensität*, 1. Aufl. Aachen: Apprimus Verlag, 2018, S. 78.

[13] A. Gatej, *Modeling and compensation of thermally induced optical effects in highly loaded optical systems*. Aachen: Dissertation, RWTH Aachen University, 2014.

[14] S. Schnippel, „BriPro - Brilliante Laser in der Produktion: Teilvorhaben der Layertec GmbH, Strahlführungsoptiken für hochbrillante Lasersysteme", Layertec GmbH, Schlussbericht zu Förderkennzeichen 13N11114 (Dez. 2012).

[15] P. Hartmann, *Optical glass*. Bellingham: SPIE Press, 2014, S. 41 u. 105–107.

[16] A. Gatej und P. Loosen, „Methods for compensation of thermal lensing based on thermo-optical (TOP) analysis“, *Proc. of SPIE* **9131**, 91310F (2014).

[17] M. Born und E. Wolf, *Principles of optics: Electromagnetic theory of propagation, interference and diffraction of light*, 7th expanded ed. Cambridge, New York: Cambridge University Press, 1999, S. 129–130.

[18] H. J. Hoffmann, W. W. Jochs und G. Westenberger, „A dispersion formula for the thermo-optic coefficient of optical glasses“, *Proc. of SPIE* **1327**, 219–230 (1990).

[19] Schott AG, „Optical Glass: Data Sheets“, www.schott.com/advanced_optics/english/download/schott-optical-glass-collection-datasheets-july-2015-eng.pdf (Jul. 2015).

[20] H.-J. Kull, *Laserphysik: Physikalische Grundlagen des Laserlichts und seine Wechselwirkung mit Materie*. München: Oldenbourg, 2010, S. 145–148.

[21] M. Fox, *Optical properties of solids*, 2. ed, reprinted (with corrections). Oxford: Oxford Univ. Press, 2011, S. 33–44.

[22] Heraeus Quarzglas GmbH & Co. KG, „Suprasil® and Infrasil® – Material Grades for the Infrared Spectrum“, www.optics.heraeus-quarzglas.com (2018).

[23] LASEROPTIK GmbH, „Ion Beam Sputtering (IBS)“, *laser+photonics* **2017**(1), 2 Seiten (2017).

[24] R. Lawrence, D. Ottaway, M. Zucker und P. Fritschel, „Active correction of thermal lensing through external radiative thermal actuation“, *Opt. Lett.* **29**(22), 2635–2637 (2004).

[25] T. Bonhoff, M. Schniedenharn, J. Stollenwerk und P. Loosen, „Experimental and theoretical analysis of thermo-optical effects in protective window for selective laser melting“, *International Conference on Lasers in Manufacturing, LiM* **2017**, 9 Seiten (2017).

[26] O. Pütsch, V. Morasch, M. Funk und P. Loosen, „Echtzeitfähige Laserstrahlregelung zur Kompensation thermischer Effekte“, *DGaO-Proceedings* **112**, P052 (2011).

[27] J. Schwarz, M. Ramsey, D. Headley, P. Rambo, I. Smith und J. Porter, „Thermal lens compensation by convex deformation of a flat mirror with variable annular force“, *Appl. Phys. B* **82**(2), 275–281 (2006).

[28] M. Scaggs und G. Haas, „Thermal lensing compensation optics for high power lasers“, *Proc. of SPIE* **7913**, 79130C (2011).

[29] S. Piehler, C. Thiel, A. Voss, M. Abdou Ahmed und T. Graf, „Self-compensation of thermal lensing in optics for high-brightness solid-state lasers“, *Proc. of SPIE* **8239**, 82390Z (2012).

[30] M. Stubenvoll, B. Schäfer und K. Mann, „Measurement and compensation of laser-induced wavefront deformations and focal shifts in near IR optics“, *Opt. Express* **22**(21), 25385–25396 (2014).

[31] J. Eichler und H.-J. Eichler, *Laser: Bauformen, Strahlführung, Anwendungen*, 7. aktualisierte Aufl. Berlin, Heidelberg: Springer, 2010, S. 293–298.

[32] H. J. Eichler, A. Haase und R. Menzel, „100-watt average output power 1.2 diffraction limited beam from pulsed neodymium single-rod amplifier with SBS phase conjugation“, *IEEE J. Quantum Electron.* **31**(7), 1265–1269 (1995).

[33] A. Heuer, R. Menzel und M. Ostermeyer, „Power Tunable Nd-Oscillators with Diffraction Limited Beams via SBS Phase Conjugation“ in *Laser in Forschung und Technik / Laser in Research and Engineering*, Berlin, Heidelberg: Springer (1996), 375–382.

[34] W. Koechner, „Thermal Lensing in a Nd:YAG Rod“, *Appl. Opt.* **9**(11), 2548–2553 (1970).

[35] Corning Inc., „HPFS® Fused Silica Standard Grade: Semiconductor Optics“, www.corning.com/media/worldwide/csm/documents/90aac42d1e5f45cfb3b8d8d2866a81e33.pdf (Okt. 2008).

[36] Heraeus Quarzglas GmbH & Co. KG, „Quartz Glass for Optics: Data and Properties“, www.optics.heraeus-quarzglas.com (2018).

[37] Corning Inc., „Corning® Calcium Fluoride (CaF2) - Code 9575“, www.corning.com/media/worldwide/csm/documents/Calcium_Fluoride_PI_Sheet_September_2014.pdf (2014).

[38] Corning Inc., „Calcium Fluoride CaF2 Physical and Chemical Properties: Semiconductor Optics“ (Okt. 2003).

[39] Covestro AG, „Makrolon® LED2245: ISO Datenblatt“, www.plastics.covestro.com/de/Products/Makrolon/ProductList/201305212210/Makrolon-LED2245 (Sep. 2015).

[40] A. Pontes und H. Bayerl, „Silicone Elastomers - Clear as Glass“, *SAE Technical Paper*, 2012-36-0446 (2012).

[41] Momentive Performance Materials Inc., „Durable Versatile Optically Clear: Ultra Clear Liquid SiliconeRubber Silopren* LSR 7000 Series“, www.momentive.com (2013).

[42] O. Franssen und H. Bayerl, „The success story of silicones: Winning against functional competition“, *Rubber, Fibres and Plastics* **7**, 156–160 (2012).

[43] K. Straw, „Control Of Thermal Focus Shift In Plastic-Glass Lenses“, *Proc. of SPIE* **0237**, 386–391 (1980).

[44] J. Yang, Z. Cen und X. Li, „Athermal design and analysis of glass-plastic hybrid lens“, *Proc. of SPIE* **10616**, 106160H (2017).

[45] K. B. Doyle, V. L. Genberg und G. J. Michels, *Integrated Optomechanical Analysis*, 2nd ed. Bellingham: Society of Photo-Optical Instrumentation Engineers (SPIE), 2012.

[46] Zemax LLC, *OpticStudio™*, www.zemax.com.

[47] Synopsys, *CODE V®,* optics.synopsys.com/codev.

[48] T. Westermann, *Modellbildung und Simulation: Mit einer Einführung in ANSYS*. Berlin, Heidelberg: Springer-Verlag, 2010, S. 51–63.

[49] Sigmadyne Inc., *SigFit™*, sigmadyne.com.

[50] Open Engineering S.A, *OOFELIE::Multiphysics,* www.open-engineering.com.

[51] COMSOL Inc., *COMSOL Multiphysics®,* www.comsol.de.

[52] Sigmadyne Inc., „SigFit Reference Manual: Version 2016R3“, www.sigmadyne.com (Jun. 2016).

[53] A. Mazzoli, P. Saint-Georges, A. Orban, J.-S. Ruess, J. Loicq, C. Barbier, Y. Stockman, M. Georges, P. Nachtergaele, S. Paquay und P. de Vincenzo, „Experimental validation of opto-thermo-elastic modeling in OOFELIE multiphysics“, *Proc. of SPIE* **8167**, 81671I (2011).

[54] A. Mazzoli, P. Saint-Georges, A. Orban, J.-S. Ruess, J. Loicq, S. Marcotte, C. Barbier, Y. Stockman, M. Georges, C. Thizy, P. Nachtergaele, S. Paquay und P. de Vincenzo, „Experimental Characterization Providing Enhanced Opto-Thermo-Mechanical Modeling“, *ESA SP* **691**, 133 (2012).

[55] A. Gatej, J. Wasselowski und P. Loosen, „Thermo-optical (TOP) analysis by coupling FEM and ray tracing“, *Proc. of SPIE* **8429**, 84290E (2012).

[56] A. Gatej, J. Wasselowski und P. Loosen, „Using adaptive weighted least squares approximation for coupling thermal and optical simulation“, *Appl. Opt.* **51**(28), 6718–6725 (2012).

[57] G. J. Michels und V. L. Genberg, „Analysis of thermally loaded transmissive optical elements“, *Proc. of SPIE* **8840**, 88400C (2013).

[58] K. B. Doyle, V. L. Genberg, G. J. Michels und G. R. Bisson, „Optical modeling of finite element surface displacements using commercial software“, *Proc. of SPIE* **5867**, 58670I (2005).

[59] V. L. Genberg, G. J. Michels und K. B. Doyle, „Orthogonality of Zernike Polynomials“, *Proc. of SPIE* **4771**, 276–286 (2002).

[60] P. A. Coronato und R. C. Juergens, „Transferring FEA results to optics codes with Zernikes: a review of techniques“, *Proc. of SPIE* **5176**, 1–8 (2003).

[61] R. C. Juergens und P. A. Coronato, „Improved method for transfer of FEA results to optical codes“, *Proc. of SPIE* **5174**, 105–115 (2003).

[62] H. Gross, Ed, *Handbook of optical systems: Vol. 1: Fundamentals of technical optics*. Weinheim, Great Britain: Wiley-VCH, 2005, S. 195.

[63] T. Bonhoff, L. Büsing, J. Stollenwerk und P. Loosen, „Modeling of optical aberrations due to thermal deformation using finite element analysis and ray-tracing“, *Proc. of SPIE* **9626**, 96261V (2015).

[64] Open Engineering S.A, „OOFELIE::Multiphysics 2016 for Advanced Optics Design“, www.open-engineering.com/index.php/eng/content/download/15408/276286/file/Optics_ Brochure_2016_Rev2.1.pdf (2016).

[65] K. N. Schrader, S. R. Subia, J. W. Myre und K. L. Summers, „Ray tracing in a finite-element domain using nodal basis functions“, *Appl. Opt.* **53**(24), F10–F20 (2014).

[66] COMSOL Inc., *Ray Tracing-Simulation in optisch großen Systemen mit dem Ray Optics Module.* Verfügbar unter: www.comsol.de/ray-optics-module (abgerufen am 20.05.2018).

[67] Wyrowski Photonics UG, *VirtualLab Fusion,* www.lighttrans.com.

[68] L. Thylen und D. Yevick, „Beam propagation method in anisotropic media", *Appl. Opt.* **21**(15), 2751–2754 (1982).

[69] F. Wyrowski, H. Zhong, S. Zhang und C. Hellmann, „Approximate solution of Maxwell's equations by geometrical optics", *Proc. of SPIE* **9630**, 963009 (2015).

[70] COMSOL Inc., *Analyse mikro- und nano-optischer Systeme mit dem Wave Optics Module.* Verfügbar unter: www.comsol.de/wave-optics-module (abgerufen am 20.05.2018).

[71] JCMwave GmbH, *JCMsuite,* www.jcmwave.com/.

[72] DIN Deutsches Institut für Normung e.V., *Laser und Laseranlagen - Prüfverfahren für Laserstrahlabmessungen, Divergenzwinkel und Beugungsmaßzahlen*, Veröffentlichungsnr. DIN EN ISO 11146-1:2005-04.

[73] Primes GmbH, „Produkte und Systeme zur Laserstrahldiagnose", www.primes.de/de/support/downloads/katalog.html (Jun. 2017).

[74] Photon Inc., „Measuring laser beam parameters using non-distorting attenuation and multiple simultaneous samples", Erfinder: D. L. Wright und J. M. Fleischer, Anmeldenr. 887,369, Veröffentlichungsnr. US005329350A (1994).

[75] L.L.C. Ophir-Spiricon, „ModeScan™ 1780 Laser Beam Profiler: Installation and Operation Manual" (Jan. 2014).

[76] Ophir Photonics, „BeamWatch® Non-contact, Focus Spot Size and Position monitor for high power YAG, Diode and Fiber lasers", www.ophiropt.com/photonics (Jan. 2018).

[77] M. Slutzki, „New Solutions to Old Problems: High power industrial laser applications", *LTJ* **12**(2), 47–50 (2015).

[78] Ophir Photonics, „LBS-300 Beam Splitters", www.ophiropt.com/photonics (Jan. 2015).

[79] J. D. Mansell, J. Hennawi, E. K. Gustafson, M. M. Fejer, R. L. Byer, D. Clubley, S. Yoshida und D. H. Reitze, „Evaluating the effect of transmissive optic thermal lensing on laser beam quality with a Shack–Hartmann wave-front sensor", *Appl. Opt.* **40**(3), 366–374 (2001).

[80] M. Stubenvoll, B. Schäfer und K. Mann, „Measurement and compensation of laser-induced wavefront deformations and focal shifts in near IR optics", *Opt. Express* **22**(21), 25385–25396 (2014).

[81] T. Bell, D. Naidoo, S. Ngcobo und A. Forbes, „Thermal lensing measurement from the coefficient of defocus aberration using Shack-Hartmann wavefront sensor", *Proc. of SPIE* **9727**, 97271L (2016).

[82] A. Koglbauer, S. Wolf, O. Märten und R. Kramer, „A compact beam diagnostic device for 3D additive manufacturing systems“, *Proc. of SPIE* **10523**, 1052316 (2018).

[83] A. Koglbauer, „More Than Beam Profiling: A new approach for beam diagnostics in 3D additive manufacturing systems“, *LTJ* **2018**(3), 40–44 (2018).

[84] M. Aden, A. Roesner und A. Olowinsky, „Optical characterization of polycarbonate: Influence of additives on optical properties“, *J. Polym. Sci. B Polym. Phys.* **48**(4), 451–455 (2010).

[85] B. Schäfer, J. Gloger, U. Leinhos und K. Mann, „Photo-thermal measurement of absorptance losses, temperature induced wavefront deformation and compaction in DUV-optics“, *Opt. Express* **17**(25), 23025–23036 (2009).

[86] B. Schäfer, M. Schöneck, A. Bayer und K. Mann, „Absolute measurement of surface and bulk absorption in DUV optics from temperature induced wavefront deformation“, *Opt. Express* **18**(21), 21534–21539 (2010).

[87] A. Alexandrovski, M. Fejer, A. Markosian und R. Route, „Photothermal common-path interferometry (PCI): new developments“, *Proc. of SPIE* **7193**, 71930D (2009).

[88] B. Gronloh und B. Jungbluth, „Ortsaufgelöste Absorptionsmessungen im ppm-Bereich“, Fraunhofer ILT, www.ilt.fraunhofer.de/content/dam/ilt/de/documents/Jahresberichte/JB13/HZ_JB13_55.pdf (2014).

[89] F. Zhuang, B. Jungbluth, B. Gronloh, H.-D. Hoffmann und G. Zhang, „Dual-wavelength, continuous-wave Yb:YAG laser for high-resolution photothermal common-path interferometry“, *Appl. Opt.* **52**(21), 5171–5177 (2013).

[90] M. Hass, J. W. Davisson, H. B. Rosenstock und J. Babiskin, „Measurement of very low absorption coefficients by laser calorimetry“, *Appl. Opt.* **14**(5), 1128–1130 (1975).

[91] U. Willamowski, D. Ristau und E. Welsch, „Measuring the absolute absorptance of optical laser components“, *Appl. Opt.* **37**(36), 8362–8370 (1998).

[92] DIN Deutsches Institut für Normung e.V., *Optik und optische Instrumente - Laser und Laseranlagen - Prüfverfahren für den Absorptionsgrad von optischen Laserkomponenten*, Veröffentlichungsnr. DIN EN ISO 11551:2004-05.

[93] J.-C. Diels und W. Rudolph, *Ultrashort laser pulse phenomena: Fundamentals, techniques, and applications on a femtosecond time scale. - Previous ed.: 1996*, 2nd ed. Burlington, MA: Academic Press, 2006, S. 9–12.

[94] P. Russbueldt, D. Hoffmann, M. Hofer, J. Lohring, J. Luttmann, A. Meissner, J. Weitenberg, M. Traub, T. Sartorius, D. Esser, R. Wester, P. Loosen und R. Poprawe, „Innoslab Amplifiers“, *IEEE J. Select. Topics Quantum Electron.* **21**(1), 447–463 (2015).

[95] J. Weitenberg, A. Vernaleken, J. Schulte, A. Ozawa, T. Sartorius, V. Pervak, H.-D. Hoffmann, T. Udem, P. Russbüldt und T. W. Hänsch, „Multi-pass-cell-based nonlinear pulse compression to 115 fs at 7.5 µJ pulse energy and 300 W average power“, *Opt. Express* **25**(17), 20502–20510 (2017).

[96] S. Hooker und C. E. Webb, *Laser physics*, Reprinted. Oxford, New York: Oxford University Press, 2011, S. 462–473.

[97] A. Weiner, *Ultrafast Optics*, 1. Aufl. s.l.: Wiley, 2011, S. 147–151.

[98] Z. Bor, „Distortion of femtosecond laser pulses in lenses", *Opt. Lett.* **14**(2), 119–121 (1989).

[99] L. Büsing, *Optische Systeme für die hochpräzise, scannerbasierte Multistrahlbearbeitung mit ultrakurzen Laserpulsen*. Aachen: Dissertation, RWTH Aachen University, 2016, S. 35–37.

[100] L. Büsing, T. Bonhoff, J. Gottmann und P. Loosen, „Deformation of ultra-short laser pulses by optical systems for laser scanners", *Opt. Express* **21**(21), 24475–24482 (2013).

[101] A. Paul, E. A. Gibson, X. Zhang, A. Lytle, T. Popmintchev, X. Zhou, M. M. Murnane, I. P. Christov und H. C. Kapteyn, „Phase-Matching Techniques for Coherent Soft X-Ray Generation", *IEEE J. Quantum Electron.* **42**(1), 14–26 (2006).

[102] T. Südmeyer, S. V. Marchese, S. Hashimoto, C. R. E. Baer, G. Gingras, B. Witzel und U. Keller, „Femtosecond laser oscillators for high-field science", *Nat. Photon.* **2**(10), 599–604 (2008).

[103] A. Cingöz, D. C. Yost, T. K. Allison, A. Ruehl, M. E. Fermann, I. Hartl und J. Ye, „Direct frequency comb spectroscopy in the extreme ultraviolet", *Nature* **482**(7383), 68–71 (2012).

[104] A. Vernaleken, J. Weitenberg, T. Sartorius, P. Russbueldt, W. Schneider, S. L. Stebbings, M. F. Kling, P. Hommelhoff, H.-D. Hoffmann, R. Poprawe, F. Krausz, T. W. Hänsch und T. Udem, „Single-pass high-harmonic generation at 20.8 MHz repetition rate", *Opt. Lett.* **36**(17), 3428–3430 (2011).

[105] T. Bonhoff, M. Schniedenharn, S. Nippgen, U. Thombansen, J. Stollenwerk, P. Loosen und R. Poprawe, „Multiphysikalische Analyse von optischen Systemen für die Lasermaterialbearbeitung", *35. CADFEM ANSYS Simulation Conference, 002 Systeme & Multiphysik* (2017).

[106] Gesellschaft Verfahrenstechnik und Chemieingenieurwesen, *VDI-Wärmeatlas: Mit 320 Tabellen*, 11. bearb. und erw. Aufl. Berlin: Springer Vieweg, 2013, S. 22.

[107] Optris GmbH, „Grundlage der berührungslosen Temperaturmessung", www.optris.de/downloads-infrarotkameras (2018).

[108] T. Bonhoff, J. Stollenwerk und P. Loosen, „Multi-physical modeling of thermal and dispersive effects in optical systems for high power ultra-short laser pulses", *Proc. of SPIE* **10525**, 1052504 (2018).

[109] M. E. Innocenzi, H. T. Yura, C. L. Fincher und R. A. Fields, „Thermal modeling of continuous-wave end-pumped solid-state lasers", *Appl. Phys. Lett.* **56**(19), 1831–1833 (1990).

[110] M. Abramowitz und I. A. Stegun, *Handbook of mathematical functions with formulas, graphs, and mathematical tables*, 10th printing, with corrections. New York: J. Wiley, 1972, S. 228–230.

[111] R. T. Tangelder, Beckmann, L. H. J. F. und J. Meijer, „Influence of temperature gradients on the performance of ZnSe-lenses“, *Proc. of SPIE* **1780**, 294–302 (1992).

[112] ANSYS Inc., „ANSYS Meshing User's Guide“ (Jul. 2015).

[113] ANSYS Inc., „Introduction to ANSYS Meshing: Lecture 7: Mesh Quality & Advanced Topics“ (Feb. 2015).

[114] Wyrowski Photonics UG, „Wyrowski VirtualLab User’s Manual: VirtualLab Fusion 7.3.0“, www.wyrowski-photonics.com (Mrz. 2018).

[115] U. Fuchs, U. D. Zeitner und A. Tünnermann, „Ultra-short pulse propagation in complex optical systems“, *Opt. Express* **13**(10), 3852–3861 (2005).

[116] U. Fuchs, U. D. Zeitner und A. Tünnermann, „Optics for focusing of ultra-short laser pulses“, *Proc. of SPIE* **5962**, 59622L (2005).

[117] J. Eichler, L. Dünkel und B. Eppich, „Die Strahlqualität von Lasern – Wie bestimmt man Beugungsmaßzahl und Strahldurchmesser in der Praxis?“, *LTJ* **1**(2), 63–66 (2004).

[118] Thorlabs GmbH, „Optical Wavefront Sensors (Shack-Hartmann): WFS Series Operation Manual“ (Okt. 2015).

[119] B. Schäfer, M. Stubenvoll, A. Stufler und M. Zenz, „Abschlussbericht: Thermisch kompensiertes F-theta Objektiv für das 'Selective Laser Melting' - TFOS“, Laser-Laboratoriums Göttingen e.V. und Sill Optics GmbH & Co. KG, Förderkennzeichen KF2411810DF2 (2015).

[120] T. Bonhoff, M. Poppe, J. Stollenwerk, J. H. Schleifenbaum und P. Loosen, „Multi-physical analysis of thermo-optical effects for different Selective Laser Melting (SLM) scanning strategies“, *Procedia CIRP* **74**, 97–101 (2018).

[121] M. Schniedenharn, „SLM Prozessparameter“, E-Mail, 26.03.2018.

[122] M. Schniedenharn, „Simulation Schutzglas“, E-Mail, 24.04.2017.

[123] M. J. Assael, S. Botsios, K. Gialou und I. N. Metaxa, „Thermal Conductivity of Polymethyl Methacrylate (PMMA) and Borosilicate Crown Glass BK7“, *Int. J. Thermophys.* **26**(5), 1595–1605 (2005).

[124] D. T. Carpenter, C. S. Wood, O. Lyngnes und N. G. Traggis, „Ultra low absorption glasses and optical coatings for reduced thermal focus shift in high power optics“, *Proc. of SPIE* **8239**, 82390Y (2012).

[125] T. Graf, *Laser: Grundlagen der Laserstrahlquellen ; mit 20 Übungen*, 1. Aufl. Wiesbaden: Vieweg + Teubner, 2009, S. 23–29.

[126] G. P. Agrawal, *Nonlinear Fiber Optics*, 3rd ed. Burlington: Elsevier, 2001, S. 97–104.

[127] G. He und S. Liu, *Advanced nonlinear optics*, 2nd revised edition. Singapore, Hackensack, NJ: World Scientific Publishing Co. Pte. Ltd, 2018, S. 157–164.

8 Anhang

8.1 Thermooptischer Koeffizient

Viele Ray-Tracing Programme wie z. B. *OpticStudio* rechnen mit dem Brechungsindex relativ zu Luft. Dieser ist definiert als [15]

8.1
$$n_{rel}(\lambda, T) = \frac{n(\lambda, T)}{n_{Luft}(\lambda, T)}.$$

Unter Normalbedingungen beträgt der Brechungsindex von Luft n_{Luft}(1064 nm, 20°C) = 1,00027. Da sich die umgebende Luft bei einer Erwärmung der optischen Komponenten durch Absorption von Laserstrahlung nur unwesentlich erwärmt, kann n_{Luft} als konstant angesehen werden. Mit Formel **2.2** für die Brechungsindexänderung bei einer Erwärmung um ΔT folgt für den relativen Brechungsindex der optischen Komponenten

8.2
$$\begin{aligned} n_{rel}(\lambda, T) &= \frac{n(\lambda, T)}{n_{Luft}(\lambda, T_0)} = \frac{n(\lambda, T_0)}{n_{Luft}(\lambda, T_0)} + \frac{1}{n_{Luft}(\lambda, T_0)} \frac{\mathrm{d}n}{\mathrm{d}T} \Delta T \\ &\approx n_{rel}(\lambda, T_0) + \frac{\mathrm{d}n}{\mathrm{d}T} \Delta T. \end{aligned}$$

Folglich sollte der absolute thermooptische Koeffizient verwendet werden und nicht der relativ zu Luft.

8.2 Lorentz-Lorenz-Gleichung

Auf das ausführlich in der Literatur diskutierte Lorenz-Oszillator-Modell [20, 21] wird an dieser Stelle nicht eingegangen. Wie in Abschnitt 2.1.2 beschrieben, beträgt die makroskopische Polarisation eines isotropen Mediums in der lokalen Feldnäherung

8.3
$$\vec{P} = N_e \varepsilon_0 \chi_a \left(\vec{E} + \frac{\vec{P}}{3\varepsilon_0} \right).$$

Mit $\vec{P} = (\varepsilon_r - 1)\varepsilon_0 \vec{E}$ folgen die äquivalenten Ausdrücke

8.4
$$1 = N_e \chi_a \left(\frac{1}{\varepsilon_r - 1} + \frac{1}{3} \right) \Leftrightarrow \frac{1}{N_e \chi_a} - \frac{1}{3} = \frac{1}{\varepsilon_r - 1}$$

und damit

8.5
$$\varepsilon_r - 1 = n^2 - 1 = \frac{3N_e\chi_a}{3 - N_e\chi_a}.$$

Unter Zuhilfenahme von

8.6
$$\varepsilon_r + 2 = n^2 + 2 = \frac{3N_e\chi_a}{3 - N_e\chi_a} + 3 = \frac{9}{3 - N_e\chi_a}$$

folgt die Clausius-Mosotti-Gleichung

8.7
$$\frac{\varepsilon_r - 1}{\varepsilon_r + 2} = \frac{N_e\chi_\mathrm{a}}{3},$$

welche äquivalent zur Lorentz-Lorenz-Gleichung

8.8
$$\frac{n^2 - 1}{n^2 + 2} = \frac{N_e\chi_\mathrm{a}}{3}$$

ist. Die Ableitung der Lorentz-Lorenz-Gleichung nach der Temperatur ergibt ein Modell für den thermooptischen Koeffizienten. Aus Formel **8.5** folgt

8.9
$$n = \left(1 + \frac{3N_e\chi_a}{3 - N_e\chi_a}\right)^{\frac{1}{2}}.$$

Ableiten nach der Temperatur ergibt

8.10
$$\begin{aligned}\frac{\mathrm{d}n}{\mathrm{d}T} &= \frac{1}{2n}\frac{3\left(\frac{\mathrm{d}N_e}{\mathrm{d}T}\chi_a + N_e\frac{\mathrm{d}\chi_a}{\mathrm{d}T}\right)(3 - N_e\chi_a) - 3N_e\chi_a\left(-\frac{\mathrm{d}N_e}{\mathrm{d}T}\chi_a - N_e\frac{\mathrm{d}\chi_a}{\mathrm{d}T}\right)}{(3 - N_e\chi_a)^2} \\ &= \frac{1}{2n}\frac{9}{(3 - N_e\chi_a)^2}\left(\frac{\mathrm{d}N_e}{\mathrm{d}T}\chi_a + N_e\frac{\mathrm{d}\chi_a}{\mathrm{d}T}\right).\end{aligned}$$

Einsetzen von Formel **8.5** und **8.6** liefert

8.11
$$\begin{aligned}\frac{\mathrm{d}n}{\mathrm{d}T} &= \frac{1}{2n}(n^2 - 1)(n^2 + 2)\frac{1}{3N_e\chi_a}\left(\frac{\mathrm{d}N_e}{\mathrm{d}T}\chi_a + N_e\frac{\mathrm{d}\chi_a}{\mathrm{d}T}\right) \\ &= \frac{(n^2 - 1)(n^2 + 2)}{6n}\left(\frac{1}{N_e}\frac{\mathrm{d}N_e}{\mathrm{d}T} + \frac{1}{\chi_a}\frac{\mathrm{d}\chi_a}{\mathrm{d}T}\right).\end{aligned}$$

Dies entspricht dem Zusammenhang in Formel **2.10**.

8.3 Vermessung eines astigmatischen Gaußstrahls über Detektion der Rayleigh-Streuung

Die Intensitätsverteilung eines einfach astigmatischen Gaußstrahls kann durch

8.12
$$I(x,y,z) = \underbrace{\frac{2P}{\pi}\frac{1}{w_x(z)w_y(z)}}_{I_0(z)} \exp\left(-\frac{2x^2}{w_x^2(z)}\right)\exp\left(-\frac{2y^2}{w_y^2(z)}\right)$$

mit den Strahlkaustiken

8.13
$$w_i(z) = w_{0,i}\left[1+\left(\frac{z-z_{0,i}}{z_{R,i}}\right)^2\right]^{1/2}, \qquad i = x,y$$

beschreiben werden[15]. Dabei sind $z_{0,i}$ die Fokuslage und $z_{R,i}$ die Rayleighlänge in x- und y-Richtung. Das Messsignal der Rayleigh-Streuung ist proportional zur senkrecht zur Detektorebene integrierten Intensität des Laserstrahls. Für einen beliebigen Winkel φ zwischen den Achsen des astigmatischen Gaußstrahls x und y und den Detektorachsen x' und y' gilt

8.14
$$\begin{pmatrix} x' \\ y' \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \cos(\varphi) & -\sin(\varphi) \\ \sin(\varphi) & \cos(\varphi) \end{pmatrix}\begin{pmatrix} x \\ y \end{pmatrix}.$$

Die Intensitätsverteilung des Gaußstrahls lautet im Koordinatensystem des Detektors

8.15
$$I(x',y',z) = I_0(z)\exp\left[-\frac{2(\cos(\varphi)\,x'+\sin(\varphi)\,y')^2}{w_x^2(z)}\right]\exp\left[-\frac{2(-\sin(\varphi)\,x'+\cos(\varphi)\,y')^2}{w_y^2(z)}\right].$$

Integration entlang y' ergibt das Messsignal für den Detektor in der $x'z$-Ebene:

8.16
$$I_{Det}(x',z) \propto \int_{-\infty}^{\infty} I(x',y',z)\,dy' = \sqrt{\frac{2}{\pi}}\frac{P}{\sqrt{\cos^2(\varphi)\,w_x^2(z)+\sin^2(\varphi)\,w_y^2(z)}}\exp\left[-\frac{2x'^2}{\cos^2(\varphi)\,w_x^2(z)+\sin^2(\varphi)\,w_y^2(z)}\right].$$

Analog folgt ein Ausdruck für das Messsignal des zweiten Detektors in der $y'z$-Ebene. In Bild 62 sind die normierten Messsignale für den angenommenen Fall eines Gaußstrahls mit 1060 nm Wellenlänge,

[15] Die Intensitätsverteilung wird auf Basis der elektrischen Feldverteilung in [125] berechnet und entsprechend normiert.

$w_{0,x}$ = 50 µm und $w_{0,y}$ = 25 µm dargestellt. Der Abstand zwischen der Fokuslage in x- und y-Richtung, $z_{0,x} - z_{0,y}$, beträgt 3 mm.

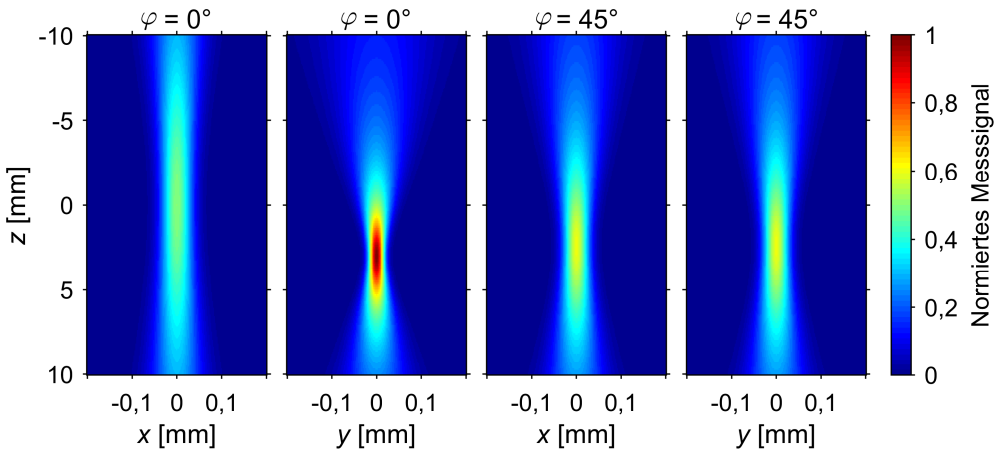


Bild 62: Messsignal der Rayleigh-Streuung für einen astigmatischen Gaußstrahl bei einer Rotation der Messachsen um 0° bzw. 45°.

Wenn die Achsen der Detektoren um $\varphi = 45°$ gegenüber den Achsen des astigmatischen Gaußstrahls rotiert sind, kann der Astigmatismus nicht detektiert werden. Je nach Winkel φ variiert der Betrag des gemessenen Astigmatismus.

8.4 Spektrale Verbreiterung durch Selbstphasenmodulation

Als Kerr-Effekt wird die Änderung des Brechungsindex

8.17
$$n(t) = n_0 + n_2 I_m(t)$$

mit der momentanen Intensität $I_m(t)$ bezeichnet [126]. Hierbei ist n_2 der nichtlineare Brechungsindex. Die zeitliche Änderung der Intensität verursacht eine zeitliche Modulation der Phase

8.18
$$\tilde{\phi}(t) = k n_2 I_m(t) d,$$

wobei d die Strecke im nichtlinearen Medium und k die Kreiswellenzahl ist. Dieser Effekt wird Selbstphasenmodulation genannt. In der Regel wird der maximale Wert der nichtlinearen Phase

8.19
$$\tilde{\phi}_{NL} = k n_2 I_m(0) d$$

quantifiziert. Die zeitliche Modulation der Phase gemäß Formel **8.18** hat eine momentane Frequenzverschiebung [127]

8.20
$$\delta\omega(t) = -\frac{\partial\tilde{\phi}(t)}{\partial t}$$

zur Folge. Für einen gaußförmigen Puls ist die nichtlineare Phase durch

8.21
$$\tilde{\phi}(t) = \tilde{\phi}_{NL}\exp\left[-4\ln(2)\left(\frac{t}{\tau}\right)^2\right]$$

gegeben. Somit verschieben sich die Frequenzen der ansteigenden Flanke des Pulses hin zu niedrigeren Frequenzen, während sich für die abfallende Flanke eine Verschiebung hin zu höheren Frequenzen ergibt. Der Puls ist also positiv gechirpt.

Das verbreiterte Spektrum des durch Selbstphasenmodulation gechirpten Pulses kann durch numerische Integration der Gleichung [127]

8.22
$$I(\omega) = \left|\frac{1}{2\pi}\int_{-\infty}^{\infty}\sqrt{I_m(t)}\exp\left[i\tilde{\phi}(t)\right]\exp[i(\omega-\omega_0)t]\,dt\right|^2$$

berechnet werden. Zur Berechnung des in Bild 9 (a) gezeigten Spektrums wird ein gaußförmiger Puls mit 800 fs Pulsdauer sowie eine Selbstphasenmodulation von $\tilde{\phi}_{NL} = 4\pi$ angenommen.

8.5 APDL-Code zur Definition thermischer Lasten

Der Import einer extern definierten thermischen Last und die transiente räumliche Verschiebung der Last werden in *ANSYS* mit folgendem APDL-Code realisiert:

```
! Definitionen
idKOOS = 11   ! Nummer des Koordinatensystems
Nx = 101      ! Auflösung der thermischen Last in x
Ny = 101      ! Auflösung der thermischen Last in y
Nz = 11       ! Auflösung der thermischen Last in z
Ntime = 100   ! Anzahl der Zeitschritte
*DIM,Zeit,array,1,Ntime       ! Array Zeitpunkte
*DIM,Position,array,2,Ntime   ! Array zeitabh. Position
! Code zur Definition der Zeitpunkte t sowie von
! x(t) = Position(1,i) sowie von y(t) = Position(2,i)

! Import der extern definierten thermischen Last
*DIM,thermLast,table,Nx,Ny,Nz,x,y,z,idKOOS
*TREAD,thermLast,'Dateipfad\Dateiname','txt'

! Schleife über Zeitpunkte
*DO,i,1,Ntime
```

```
    ! zeitabh. Koordinatensystem, Verschiebung in x und y
    local,idKOOS,0,Position(1,i),Position(2,i),0,0,0,0
    time,Zeit(1,i)

    ! Last anwenden
    cmsel,s,body,elem
    nsle,s,active
    bf,all,hgen,%thermLast%
    alls

    ! Last für Oberflächen, hier ausgelassen

*ENDDO
```

8.6 Radiale Wärmeleitungsgleichung mit gaußförmiger Last

Die stationäre Wärmeleitungsgleichung in Zylinderkoordinaten lautet [106]

8.23
$$\nabla_r^2 T + \nabla_z^2 T = \frac{1}{r}\frac{\partial}{\partial r}\left(r\frac{\partial T}{\partial r}\right) + \frac{\partial^2 T}{\partial z^2} = -\frac{Q}{\kappa}.$$

Unter der Annahme, dass Wärmeleitung ausschließlich in radialer Richtung stattfindet, kann Gleichung **8.23** für jede Ebene in z mit der Last

8.24
$$Q(r,z) = \frac{dP(r,z)}{dV} = \alpha_{abs} I(r,z) = \alpha_{abs} I_0 \exp\left(-\frac{2r^2}{w^2}\right)\exp(-\alpha_{abs} z)$$

gelöst werden. Somit folgt

8.25
$$\nabla_r^2 T = \frac{1}{r}\frac{\partial}{\partial r}\left(r\frac{\partial T}{\partial r}\right) = -\frac{Q(r,z)}{\kappa}.$$

Integration von **8.25** über r liefert den Temperaturgradienten in radialer Richtung:

8.26
$$\begin{aligned} r\frac{\partial T}{\partial r} = r\nabla_r T &= -\frac{\alpha_{abs} I_0}{\kappa}\int_0^r r' \exp\left(-\frac{2r'^2}{w^2}\right)\exp(-\alpha_{abs} z)\, dr' \\ &= \frac{\alpha_{abs} I_0 w^2}{4\kappa}\left[\exp\left(-\frac{2r^2}{w^2}\right) - 1\right]\exp(-\alpha_{abs} z). \end{aligned}$$

Mit $I_0 = 2P/\pi w^2$ folgt

8.27
$$\nabla_r T = -\frac{\alpha_{abs} P}{2\pi\kappa}\cdot\frac{1-\exp\left(-\frac{2r^2}{w^2}\right)}{r}\exp(-\alpha_{abs} z).$$

Wie bei einem radialsymmetrischen System zu erwarten, ist der Gradient in r auf der Achse gleich null. Erneute Integration ergibt den radialen Temperaturverlauf. Dabei wird die untere Integrationsgrenze gleich dem Halbdurchmesser der Linse r_L gesetzt, sodass sich die Erwärmung relativ zur, als konstant angenommen, Temperatur T_0 am Linsenrand ergibt:

8.28

$$T(r,z) - T_0 = \Delta T(r,z) = -\frac{\alpha_{abs} P}{2\pi\kappa} \exp(-\alpha_{abs} z) \int_{r_L}^{r} \frac{1 - \exp\left(-\frac{2r'^2}{w^2}\right)}{r'} dr'.$$

Die Substitution $\xi = 2r'^2/w^2$ überführt das Integral in

8.29

$$\begin{aligned}\Delta T(r,z) &= -\frac{\alpha_{abs} P}{4\pi\kappa} \exp(-\alpha_{abs} z) \int_{\frac{2r_L^2}{w_0^2}}^{\frac{2r^2}{w^2}} \frac{1 - \exp(-\xi)}{\xi} d\xi \\ &= -\frac{\alpha_{abs} P}{4\pi\kappa} \exp(-\alpha_{abs} z) \left[\int_0^{\frac{2r^2}{w^2}} \frac{1 - \exp(-\xi)}{\xi} d\xi - \int_0^{\frac{2r_L^2}{w^2}} \frac{1 - \exp(-\xi)}{\xi} d\xi \right].\end{aligned}$$

In **8.29** kann das Integral [110]

8.30

$$\int_0^x \frac{1 - \exp(-\xi)}{\xi} d\xi = E_1(x) + \ln(x) + \gamma$$

identifiziert werden, wobei $\gamma \approx 0{,}577216$ die Euler-Mascheroni-Konstante und

8.31

$$E_1(x) = \int_{-\infty}^{x} \frac{\exp(\xi)}{\xi} d\xi = -\int_{-x}^{\infty} \frac{\exp(-\xi)}{\xi} d\xi$$

die Integralexponentialfunktion sind. Damit folgt für den Temperaturverlauf

8.32

$$\begin{aligned}\Delta T(r,z) &= -\frac{\alpha_{abs} P}{4\pi\kappa} \exp(-\alpha_{abs} z) \left[E_1\left(\frac{2r^2}{w^2}\right) + \ln\left(\frac{2r^2}{w^2}\right) - E_1\left(\frac{2r_L^2}{w^2}\right) - \ln\left(\frac{2r_L^2}{w^2}\right) \right] \\ &= \frac{\alpha_{abs} P}{4\pi\kappa} \exp(-\alpha_{abs} z) \left[E_1\left(\frac{2r_L^2}{w^2}\right) - E_1\left(\frac{2r^2}{w^2}\right) + \ln\left(\frac{r_L^2}{r^2}\right) \right].\end{aligned}$$

Dies entspricht dem Ergebnis in [109]. Da diese Gleichung nur für $r > 0$ definiert ist, wird der Grenzwert $r \to 0$ mithilfe von Formel **8.28** und Ersetzen der oberen Integrationsgrenze durch null berechnet:

8.33

$$\Delta T(r=0,z) = -\frac{\alpha_{abs}P}{2\pi\kappa}\exp(-\alpha_{abs}z)\int_{r_L}^{0}\frac{1-\exp\left(-\frac{2r'^2}{w^2}\right)}{r'}dr'$$
$$= \frac{\alpha_{abs}P}{4\pi\kappa}\exp(-\alpha_{abs}z)\int_{0}^{\frac{2r_L^2}{w^2}}\frac{1-\exp(-\xi)}{\xi}d\xi$$
$$= \frac{\alpha_{abs}P}{4\pi\kappa}\exp(-\alpha_{abs}z)\left[E_1\left(\frac{2r_L^2}{w^2}\right)+\ln\left(\frac{2r_L^2}{w^2}\right)+\gamma\right].$$

Für das analytische Modell des Brechungsindexprofils werden außerdem die Gradienten in r und z benötigt. Zusammengefasst werden folgende Gleichungen verwendet:

8.34

$$\Delta T(r,z) = \frac{\alpha_{abs}P}{4\pi\kappa}\exp(-\alpha_{abs}z)\cdot\begin{cases} E_1\left(\frac{2r_L^2}{w^2}\right)+\ln\left(\frac{2r_L^2}{w^2}\right)+\gamma, & r=0 \\ E_1\left(\frac{2r_L^2}{w^2}\right)-E_1\left(\frac{2r^2}{w^2}\right)+\ln\left(\frac{r_L^2}{r^2}\right), & r>0 \end{cases}$$

$$\nabla_r T(r,z) = -\frac{\alpha_{abs}P}{2\pi\kappa}\exp(-\alpha_{abs}z)\cdot\begin{cases} 0, & r=0 \\ \frac{1-\exp\left(-\frac{2r^2}{w^2}\right)}{r}, & r>0 \end{cases}$$

$$\nabla_z T(r,z) = -\alpha_{abs}\,T(r,z).$$

8.7 Parameter für den WLS-Algorithmus

Für die Analysen in den Abschnitten 3.4 und 3.5 werden bei Verwendung des WLS-Algorithmus die in Tabelle 18 aufgeführten Parameter verwendet. Details zu den Parametern sind [13] zu entnehmen.

Tabelle 18: Parameter für den WLS-Algorithmus.

Parameter	Wert in Abschnitt 3.4	Wert in Abschnitt 3.5
Polynomgrad	4	4
Überlapp der lokalen Polynome	0,70	0,70
Abbruchkriterium der Verfeinerung	1,5	1,5
RMS-Fehlerzielwert	1,0%, 0,10%, 0,01%	0,1%
Maximaler lokaler RMS-Fehler	= RMS-Fehlerzielwert	= RMS-Fehlerzielwert
Gewichtungsfunktion	*Wendland2*	*Wendland2*, *Interpolant*
Referenzwert für Singulärwertzerlegung	10^7	10^7

8.8 Multiphysikalischer Simulationsansatz

Die angepasste Vorgehensweise des multiphysikalischen Simulationsansatzes bei Verwendung des *2nd-Generation-Field-Tracing*-Operators zur Propagation des Felds in die Fokusregion ist in Bild 63 dargestellt. Die erforderlichen DLLs für die Übergabe des temperaturabhängigen Brechungsindexprofils sowie der Oberflächendeformationen an *VirtualLab Fusion* sind im Rahmen dieser Arbeit erstellt, jedoch nicht erprobt worden.

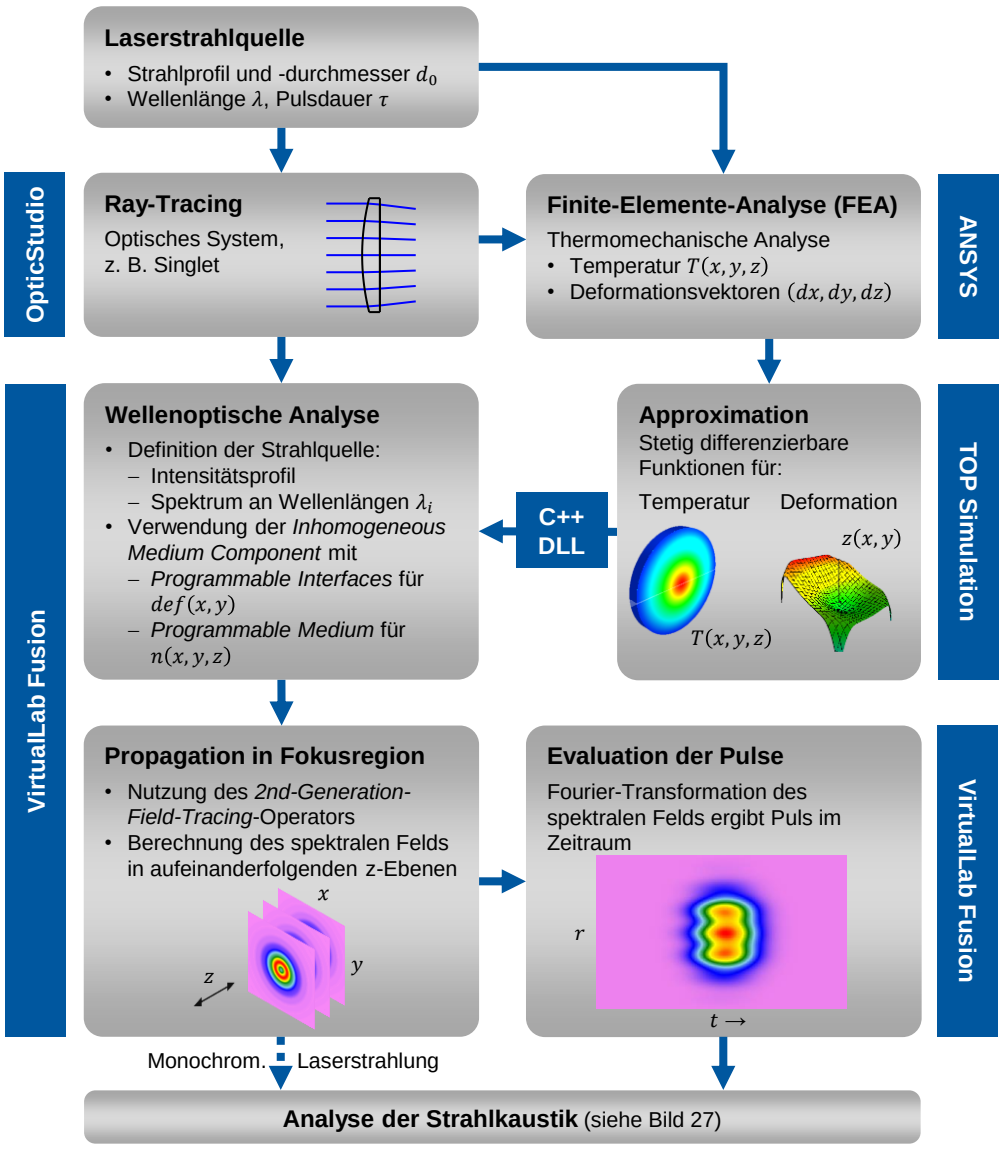


Bild 63: Vorgehensweise des multiphysikalischen Simulationsansatzes bei Verwendung des *2nd-Generation-Field-Tracing*-Operators in *VirtualLab Fusion*.

8.9 Berechnung des Strahlradius

Gemäß ISO-Norm 11146-1 [72] sind die ersten Momente in x- und y-Richtung definiert als

8.35
$$\langle x(z)\rangle = \frac{\iint xI(x,y,z)\,dx\,dy}{\iint I(x,y,z)\,dx\,dy}, \qquad \langle y(z)\rangle = \frac{\iint yI(x,y,z)\,dx\,dy}{\iint I(x,y,z)\,dx\,dy}.$$

Die zweiten Momente sind gemäß

8.36
$$\langle x^2(z)\rangle = \frac{\iint (x-\langle x\rangle)^2 I(x,y,z)\,dx\,dy}{\iint I(x,y,z)\,dx\,dy},$$

$$\langle y^2(z)\rangle = \frac{\iint (y-\langle y\rangle)^2 I(x,y,z)\,dx\,dy}{\iint I(x,y,z)\,dx\,dy}$$

zu berechnen. Für eine rotationssymmetrische Intensitätsverteilung sind die ersten Momente gleich null. Unter Verwendung von Polarkoordinaten kann das zweite Moment in x-Richtung wie folgt geschrieben werden:

8.37
$$\langle x^2(z)\rangle = \frac{\iint x^2 I(x,y,z)\,dx\,dy}{\iint I(x,y,z)\,dx\,dy} = \frac{\iint r^2\cos^2(\varphi)\,I(r,z)\,r dr\,d\varphi}{\iint I(r,z)\,r dr\,d\varphi}.$$

Ausführen der Integration über den Winkel φ ergibt

8.38
$$\langle x^2(z)\rangle = \frac{\int_0^\infty r^3 I(r,z)\,dr}{\int_0^\infty rI(r,z)\,dr}\frac{\int_0^{2\pi}\cos^2(\varphi)\;d\varphi}{\int_0^{2\pi} d\varphi} = \frac{\int r^3 I(r,z)\,dr}{\int rI(r,z)\,dr}\frac{\pi}{2\pi}$$
$$= \frac{1}{2}\frac{\int r^3 I(r,z)\,dr}{\int rI(r,z)\,dr}.$$

Zur Auswertung der diskreten Simulationsdaten werden die Integrale in Summen überführt:

8.39
$$\langle x^2(z)\rangle = \frac{1}{2}\frac{\sum_i r_i^3 I(r_i,z)\Delta r}{\sum_i r_i I(r_i,z)\Delta r}.$$

Da die Intensitätsverteilung auf einem äquidistanten Gitter vorliegt, lässt sich Δr aus Formel **8.39** herauskürzen. Aufgrund der Rotationssymmetrie sind die zweiten Momente in x- und y-Richtung identisch. Daher wird für die Berechnung des zweiten Moments der Zusammenhang

8.40
$$\langle r^2(z)\rangle = \frac{1}{2}\frac{\sum_i r_i^3 I(r_i,z)}{\sum_i r_i I(r_i,z)}$$

verwendet.

8.10 Strahlkaustiken PMMA-Asphäre

In Bild 64 sind die Strahlradien (berechnet nach dem Verfahren der Momente zweiter Ordnung) sowie die angepassten Strahlkaustiken für die PMMA-Linse dargestellt.

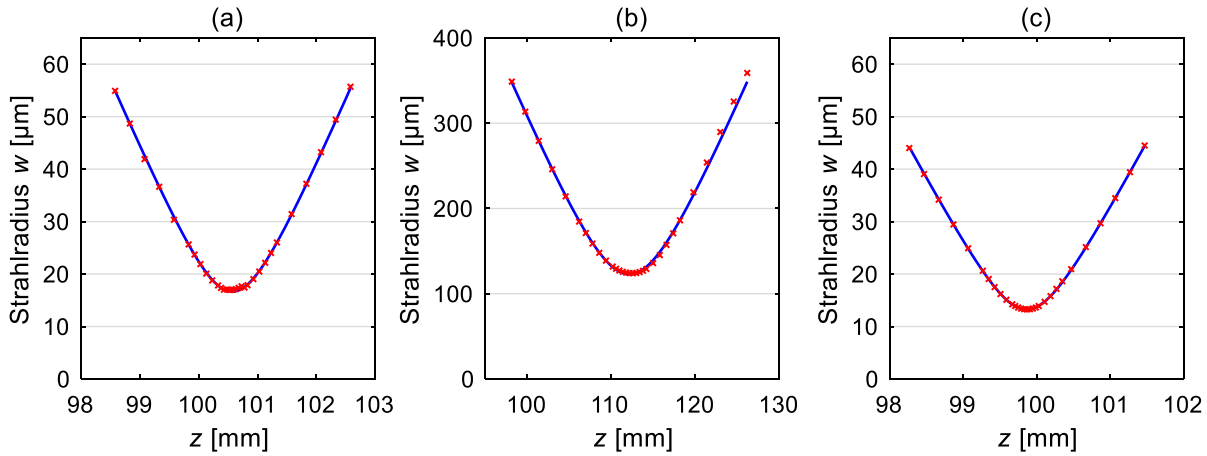


Bild 64: Strahlradien und angepasste Strahlkaustiken für die PMMA-Asphäre bei (a) 1 W und (b) 10 W Laserleistung sowie für die optimierte PMMA-Asphäre (c) im Betriebspunkt von 10 W bei 5,5 mm Strahldurchmesser.