

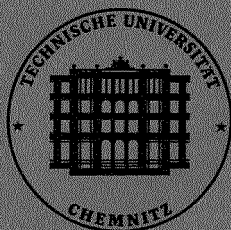
Fachbereich Maschinenbau II

V.I. Mashukin / U. Semmler
P.V. Breslavskij / I.Ju. Takoeva

Das Programmpaket LASTEC-1 zur
numerischen Simulation von Laser-
materialbearbeitungsprozessen

Preprint Nr.209/5.Jg./1991

TECHNISCHE UNIVERSITÄT
CHEMNITZ



Fachbereich Maschinenbau II

V.I. Mashukin / U. Semmler
P.V. Breslavskij / I.Ju. Takoeva

Das Programmpaket LASTEC-1 zur
numerischen Simulation von Laser-
materialbearbeitungsprozessen

Preprint Nr.209/5.Jg./1991

Autoren: Dr.rer.nat. Vladimir I. Mashukin, Dipl.-Math. Pavel V. Breslavskij,
Dipl.-Math. Ludmilla Ju. Takoeva
Allunionszentrum für Mathematische Modellierung der Akademie der
Wissenschaften der UdSSR, Miusskaja-Platz 2, 125047 Moskva,
UdSSR
Dr.rer.nat. Ulrich Semmler
Technische Universität Chemnitz, Fachbereich Maschinenbau II,
PSF 964, Chemnitz, 0-9010

Inhaltsverzeichnis

1. Einführung.....	2
2. Funktionsumfang des Programmpakets LASTEC-1 und kurze Anwenderbeschreibung.....	3
2.1. Arbeit mit den Menüs.....	3
2.2. Weiterer Programmablauf.....	6
3. Anwendungsbeispiele.....	7
3.1. Vorbemerkung zu den Bildern.....	7
3.2. Beispiel 1: Bestrahlung von Aluminium mit einem langen Impuls.....	7
3.3. Beispiel 2: Bestrahlung von Titan mit einem kurzen Laserimpuls.....	13
3.4. Beispiel 3: Laserbestrahlung von Keramik.....	18
4. Schlußfolgerung.....	24

Literatur

- [1] Mashukin V.I.; Semmler U.; Breslavskij P.V.; Takoeva L.Ju.:
Mathematische Modellierung von Prozessen des
Laserschmelzens und -verdampfens homogener Materialien,
Technische Universität Chemnitz, Fachbereich Maschinenbau
II, Preprint Nr. 208, 1991
- [2] Баяковский Ю.М.; Галактионов В.А.; Михайлова Т.Н.:
Графор: Комплекс графических программ на ФОРТРАНЕ. Часть
1. Москва, ИИМ им. М.В. Келдыша, 1983, 176 р.

1. Einführung

In dem Preprint [1] wurden für Prozesse der Laserbearbeitung (Schmelzen und Verdampfen) homogener Materialien die mathematischen Modelle und numerische Methoden für deren effektive Lösung hergeleitet und analysiert.

Zur rechentechnischen Umsetzung dieser Modelle und Methoden wurde das Programmpaket LASTEC-1 geschaffen, bestimmt für PC-Rechentechnik von AT-286/386-Typ. Der vorliegende Preprint gibt eine kurze Anwenderbeschreibung des Programmpaketes und analysiert verschiedene mit LASTEC-1 gerechnete Beispiele, um die Möglichkeiten des Programmes zu demonstrieren.

2. Funktionsumfang des Programmpaketes LASTEC-1 und kurze Anwenderbeschreibung

Das Paket LASTEC-1 ist für die numerische Lösung nichtlinearer instationärer Wärmeleitgleichungen in zwei zusammenhängenden Gebieten bestimmt, wobei in dem einen (flüssige Phase) zwei freie Ränder, in den anderen (feste Phase) ein freier Rand sein können.

Ziel der Berechnungen ist die Bestimmung der örtlichen und zeitlichen Verteilungen des Temperaturfeldes, der Bewegungsgeschwindigkeiten der Phasengrenzen, die Dicken der festen, flüssigen und verdampften Phase, des Gasdruckes auf die Verdampfungsoberfläche.

Die Daten (eingegebene Charakteristiken und Berechnungsergebnisse) werden automatisch gespeichert und können wahlweise grafisch oder alphanumerisch auf den Bildschirm und den Drucker ausgegeben werden.

Über Bildschirmenüs können vom Nutzer folgende Funktionen realisiert werden:

1. Programmaufruf
2. Materialauswahl und Vorgabe der Eingangsdaten (optische und thermophysikalische Parameter und Charakteristiken)
3. Auswahl des Einwirkungsregimes (oberflächen- oder volumenförmig) und der Parameter der Energiequelle
4. Form der Speicherung der Informationen (Modelldaten und Berechnungsergebnisse)
5. Form der Darstellung der Informationen
6. Informationsausgabe
7. Programmunterbrechung und Restart

Der Programmname lautet LASTEC1.EXE, entsprechend erfolgt der Aufruf.

2.1. Arbeit mit den Menüs

Das Benutzermenü umfaßt 10 Seiten. Jede Seite enthält ihre Bezeichnung und rechts oben die Nummer. Der Übergang zur nachfolgenden Seite erfolgt über <ENTER>, die <ESC>-Taste blättert zurück.

Jede Seite enthält eine bestimmte Anzahl durchnummerierter Punkte, unter denen gewisse Auswahlen getroffen oder Werte und Namen eingegeben werden können. Für alle Eingaben existieren Voreinstellungen (Default). Werden gegenüber diesen Einstellungen andere Eingaben gewünscht, ist die Nummer des entsprechenden Punktes mit der Tastatur zu wählen, die erforderlichen Eingaben sind zu tätigen und mit <ENTER> abzuschließen.

Nunmehr erfolgt die Beschreibung der einzelnen Menüseiten (Nummer, Bezeichnung, Bedeutung der Unterpunkte).

Menüseite 1: "Start"

In Punkt 1 ist auszuwählen, ob eine neue Rechnung begonnen werden soll (Symbol B für Begin) oder eine zu einem früheren Zeitpunkt unterbrochene Rechnung fortgesetzt werden soll (Symbol C für Continue, bei C beginnt sofort die Rechnung, weitere Menüseiten werden nicht gezeigt).

In Punkt 2 erfolgt die Auswahl des Materials:

Eine Reihe gut erforschter Materialien ist mit ihren thermophysikalischen Parametern und Charakteristiken in der Bibliothek des Programmpaketes enthalten. Die Wahl eines solchen Materials impliziert ein sogenanntes "passives" Eingaberegime, bei dem die Menüseiten 2-5T für die Eingabe der Materialdaten und -charakteristiken überblättert werden. Diese passive Materialauswahl schränkt allerdings die Möglichkeiten der Modellierung etwas ein, da nur die von der Wellenlänge des Lichtes und der Oberflächenbeschaffenheit des Targets abhängige Oberflächenabsorption $A(T)$ verändert werden kann.

Die Auswahl der Materialbezeichnung "beliebiges Material" unter Punkt 2 führt in das sogenannte "aktive" Eingaberegime. Vorgesehen ist es für Materialien, deren thermophysikalische Eigenschaften entweder in der Programmtabelle nicht enthalten sind oder nur näherungsweise bekannt sind und man beabsichtigt, "numerische Experimente" mit verschiedenen Werten der Parameter und Charakteristiken durchzuführen, um Vorstellungen über den Prozeß zu erhalten.

In Falle des aktiven Regimes geht es auf der Menüseite 2, andernfalls auf Seite 6 weiter.

Menüseite 2: "Thermophysikalische Parameter"

Die Seite enthält 9 Punkte für die Eingabe der Materialbezeichnung und der Werte T_0 , T_s , T_v , L_s , L_v , ρ_s , ρ_l und die Atommasse.

Menüseite 3: "Thermophysikalische und optische Charakteristiken"

Auf dieser Seite wird festgelegt, in welcher Form (analytisch als lineare Funktion der Temperatur oder tabellarisch) die Wärmeleitfähigkeit $\lambda(T)$, die Wärmekapazität $C_p(T)$ und die Absorptionsfähigkeit der Oberfläche $A(T)$ des Materials für den festen und flüssigen Aggregatzustand auf den nächsten Seiten eingegeben werden. Je nach gewählter Eingabeform erscheinen danach die Seiten 4, 5 und 6 für analytische Eingaben bzw. 4T, 5T und 6T für die tabellarische Form.

Für die analytischen Eingabeform sind auf den Seiten 4, 5 bzw. 6 jeweils 2 Koeffizienten für die Definition der linearen Abhängigkeiten einzugeben.

Die tabellarische Eingabeform ist vorgesehen für die Arbeit mit Charakteristiken, die in diskreter Form gegeben sind (experimentelle Ergebnisse). Diese tabellarischen Eingaben erfolgen auf allen Seiten in gleicher Form: Zuerst wird die Anzahl der Tabellenwerte erfragt (für die Festkörperphase max. 10, für die Flüssigphase max. 5), danach erfolgen die Eingaben der Stützstellen und Funktionswerte. Die eingegebenen Verläufe werden zur Kontrolle grafisch dargestellt, eine anschließende Korrektur (Neueingabe) ist möglich.

Die entsprechenden Menüseiten 4-6T lauten:

- Menüseite 4: "Analytische Eingabe der Wärmeleitfähigkeit"
- Menüseite 5: "Analytische Eingabe der Wärmekapazität"
- Menüseite 6: "Analytische Eingabe der Absorptionsfähigkeit"
- Menüseite 4T: "Tabellarische Eingabe der Wärmeleitfähigkeit"
- Menüseite 5T: "Tabellarische Eingabe der Wärmekapazität"
- Menüseite 6T: "Tabellarische Eingabe der Absorptionsfähigkeit"

Menüseite 7: "Impulsparameter"

Sie dient der Charakterisierung des einwirkenden Impulses. Sie enthält folgende 4 Punkte:

1. Zeitprofil des Impulses (G - gaußförmig, C - rechteckförmig)
2. Form der Energiefreisetzung (V - volumenförmig, S - oberflächenförmig)
3. Intensität
4. Impulsdauer (halbe Impulslänge)

Menüseite 8: "Parameter des Netzes"

Eingugeben sind vom Nutzer:

- die Länge der Integrationsintervalle
- die Diskretisierungspunktzahlen in der Festkörper- und Flüssigphase)
- ein Verdichtungskoeffizient (während in der Flüssigphase ein gleichmäßiges Netz verwendet wird, kann in der Festkörperphase eine Verdichtung in Richtung der Oberfläche in Form einer geometrischen Folge gewählt werden.)

Menüseite 9: "Informationsausgabe"

Auf dieser Seite wird folgendes festgelegt:

1. Integrationszeitraum in Einheiten der halben Impulsdauer (bei Erreichen dieser Zeit erfolgt der Abbruch der Rechnung, jedoch kann vorher jederzeit durch Betätigen der Taste <C> abgebrochen werden)
2. Anfangszeitrittweite
3. Abbruchgenauigkeit ϵ
4. Form der Ausgabe: G - grafisch oder N - numerisch
5. Festlegung, ob die Rechenergebnisse auf Festplatte oder Diskette permanent gespeichert werden sollen. Dann ist die

entsprechende Frage mit Y[es] zu beantworten und es sind noch die Filenamen für die Aufbewahrung der örtlichen und zeitlichen Abhängigkeiten und Verläufe einzugeben.

Menüseite 10: "Parameter der Informationsausgabe"

Während der Programmabarbeitung können Augenblickszustände sowohl auf den Bildschirm (Display) als auch auf den Drucker ausgegeben werden. Diese Menüseite legt für beide Ausgabeformen fest,

1. für welchen Teil des Integrationsintervalls (Zahl zwischen 0 und 1) die grafischen Ausgaben erfolgen (das ist mit unterschiedlichen Maßstäben möglich für die Funktionen $T(x)$, $G(x)$ und $F(x)$),
2. aller wieviel Integrationsschritte eine Neuausgabe erfolgt,
3. aller wieviel Zeitintegrationsschritte die zeitlichen Abhängigkeiten gespeichert werden,
4. dasselbe wie 3., nur für räumliche Abhängigkeiten.

2.2. Weiterer Programmablauf

Nach der Eingabe aller notwendigen Informationen werden zur Kontrolle die Funktionen $A(T)$, $\lambda(T)$ und $C_p(T)$ für Festkörper und Flüssigkeit grafisch dargestellt. Die Rechnung beginnt mit einer weiter Betätigung von <ENTER>.

Während der Rechnung werden jeweils nach der festgelgten Zahl von Integrationsschritten die Kurven $T(x)$, $F(x)$, $G(x)$ und $G(t)$ sowie die aktuellen Werte von v_{g1} , x_1 , v_{1V} , x_v und p_g ausgegeben. (Die Ausgabe der Verläufe erfolgt grafisch oder tabellarisch, je nach getroffener Wahl, die grafische Ausgaben sind mit der Grafikbibliothek GRAFOR [2] realisiert.) Das Ende der Rechnung erfolgt bei Erreichen des festgelegten Endzeitpunktes oder durch vorheriges Betätigen der Taste <C>.

Die Bildschirm- und Druckerausgaben der gespeicherten räumlichen und zeitlichen Verläufe realisieren die Programme DRAWX.EXE (räumliche Verläufe) bzw. DRAWT.EXE (zeitliche Verläufe). Dabei auf dem Bildschirm dargestellte Bilder können durch die Taste <P> auf den Drucker gebracht werden, Weiterblättern erfolgt durch zweimaliges Drücken von <ENTER>, Abbruch durch <C>.

Das Paket erfordert ca. 280 KByte Hauptspeicher.

3. Anwendungsbeispiele

Die Möglichkeiten und der Funktionsumfang des Programmsystems LASTEC-1 werden an verschiedenen Beispielen demonstriert.

3.1. Vorbemerkung zu den Bildern

Die folgenden Bilder 1-22 sind größtenteils Original-Drucker-
ausgaben des Programmes. Die Bildschirmdarstellungen sind ähnlich,
wobei aber infolge der dort verwendeten Farben die Anschaulichkeit
höher ist.

Die Bilder enthalten zuden folgende gegenüber dem Text andere
Bezeichnungen:

- L - Wärmeleitfähigkeit λ (Maßeinheit $J/(s \cdot cm \cdot K)$)
- psi - Transformationskoeffizient Ψ
- TAU - aktuelle Zeitschrittweite τ
- TIME - aktuelle Zeit

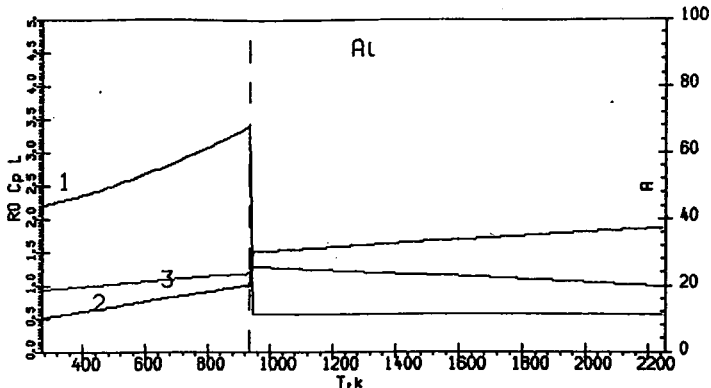
Die Dicken der Phasen x_{sI} und x_{IV} sind in μm ("mk" in den Bildern)
angegeben, die Phasengeschwindigkeiten v_{sI} und v_{IV} in m/s ("m/c" in
den Bildern). Die Maßeinheiten in den Bildern 6 und 7 sind in W/cm^2
für den Impulsanteil G_s und m/s für die Geschwindigkeiten.

3.2. Beispiel 1: Bestrahlung von Aluminium mit einem langen Impuls

Versuchsbedingungen:

- Rechteckförmiger Laserimpuls,
- Dauer $\tau=10$ ms, Intensität $G= 2 \cdot 10^5$ W/cm^2 ,
- Bestrahlung eines Aluminium-Werkstücks von 1 cm Dicke

Im Bild 1 sind die Funktionen $A(T)$, $C_p(T)$ und $\lambda(T)$ dargestellt.



- 1-graphic of $\lambda, J/(c \cdot cm \cdot k)$
 2-graphic of $C_p, J/(gr \cdot k)$
 3-graphic of $A, \text{percent}$

Bild 1: Temperaturabhängigkeit des Wärmeleitkoeffizienten $\lambda(T)$, der Wärmekapazität $C_p(T)$ und der Oberflächenabsorptionsfähigkeit $A(T)$ für Aluminium

Wir weisen auf die Unstetigkeiten (Sprungstellen) der Funktionen für $T=T_m$ (Schmelztemperatur) hin. Ein Vorzug der verwendeten Methode der Modellierung und numerischen Lösung besteht gerade darin, mit derartigen unstetigen thermodynamischen und optischen Charakteristiken ohne die Notwendigkeit einer Glättung arbeiten zu können, was die Genauigkeit der Berechnungen in der Nähe der Phasenübergänge wesentlich erhöht.

Die Bilder 2-5 zeigen in grafischer Form jeweils links die Verläufe $T(x)$ und $\Psi(x)$ für unterschiedliche Zeitpunkte (Bild 2: vor dem Schmelzbeginn, Bild 3: zu Beginn des Schmelzens, Bild 4: nach der Hälfte des Impulses, Bild 5: zum Impulsende). Rechts auf den Bildern sind jeweils der zeitliche Verlauf $G(t)$ des Laserimpulses

und der Anteil $G_s(t)$ von $G(t)$, der in der Oberfläche absorbiert wird, dargestellt. Markiert ist dabei der aktuelle Zeitpunkt, zu dem die Darstellung erfolgte. Rechts oben erscheinen die Nummer des aktuellen Zeitschritts (J), die aktuelle Zahl von Iterationen bei der Lösung des nichtlinearen Gleichungssystems (S) und die aktuelle Zeitschrittweite $\Delta\tau^j$ (TAU), im unteren Teil der Bilder die aktuellen Werte für t , x_l , v_{sl} , x_v , v_{lv} und p_l .

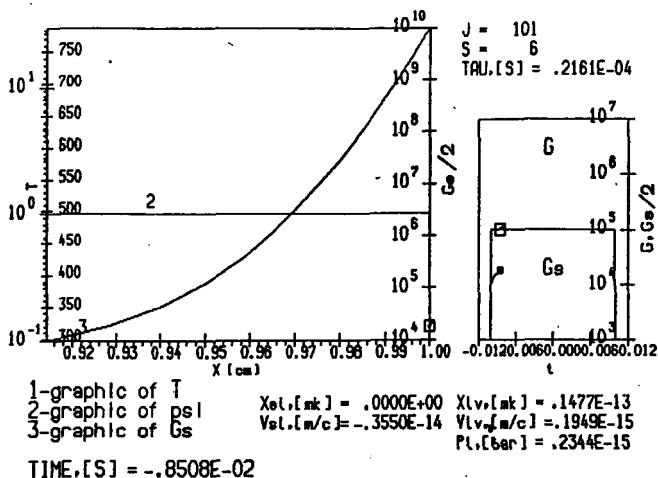
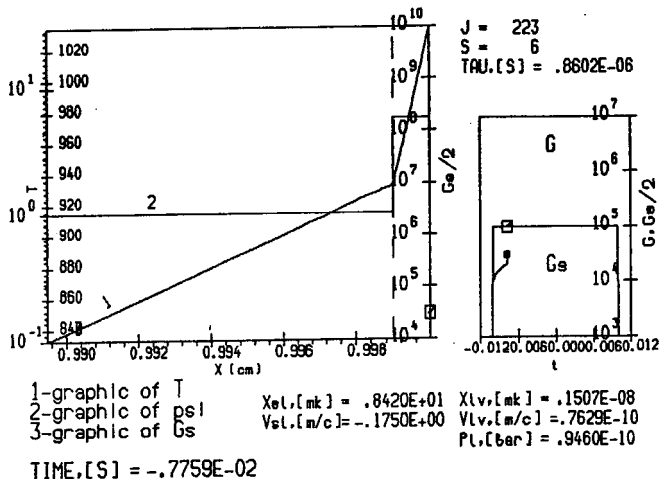
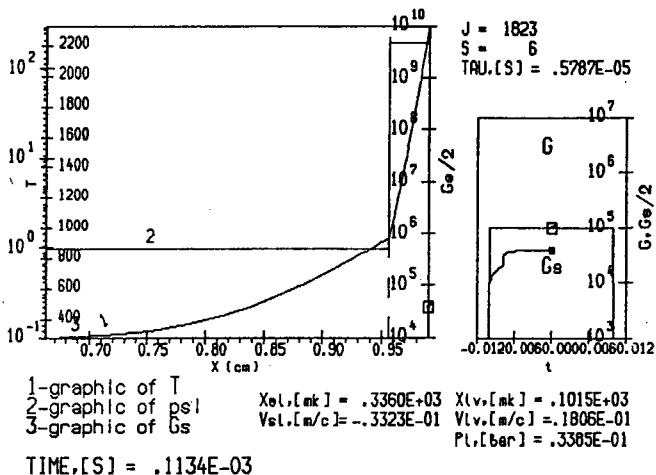


Bild 2: Temperaturprofil $T(x)$ von Aluminium bei Einwirkung eines rechteckförmigen Laserimpulses mit $\tau=10$ ms und $G=2 \cdot 10^5$ W/cm² vor Beginn des Schmelzens

Bild 3: Die Funktion $T(x)$ zum Zeitpunkt des SchmelzbeginsBild 4: Die Funktionen $T(x)$ und $\psi(x)$ in der Mitte des Impulses (geänderter Maßstab der Ortskoordinate)

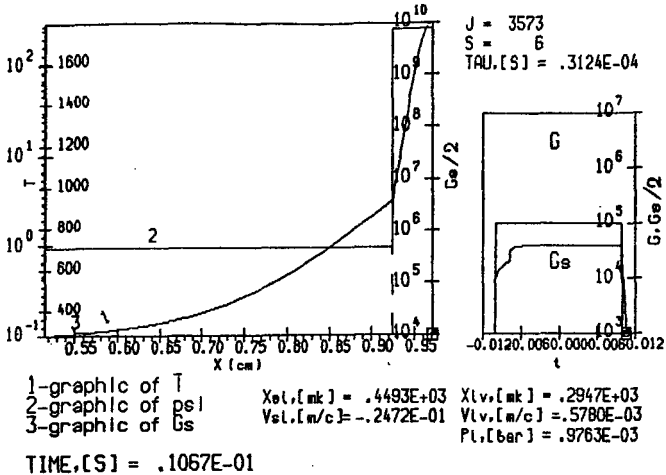


Bild 5: Die Funktionen $T(x)$ und $F(x)$ am Impulsende

Zum Zeitpunkt des Schmelzbegins erscheint eine neue Phase, durch eine senkrechte gestrichelte Linie dargestellt. Unten ist der Anfangswert x_1 für die Dicke der Flüssigphase zu sehen. Neu tritt weiterhin die Funktion $F(x)$ (unterteilt in $F_s(x)$ und $F_l(x)$ für feste und flüssige Phase) auf, die die Dicken der jeweiligen Phase im Verhältnis zu den Anfangsdicken angibt. Während der Wert F_s von 1 auf 0 bei vollständigem Schmelzen abfällt, wächst F_l von 1 um mehrere Ordnungen ($10^2 \dots 10^5$). Die Temperaturverteilung hat auf Grund der für die feste und flüssige Phase unterschiedlichen Werte von λ und C_p an der Phasengrenze einen Knick.

Die Bilder 6 und 7 zeigen die zeitlichen Verläufe von G_s , T_s , v_{sl} , v_{lv} und F_l . Dem Schmelzen entsprechen negative Werte von v_{sl} , der Kristallisation demzufolge positive. Die Bewegungsgeschwindigkeiten der Phasengrenzen sind als Folge der gewählten Impulsparameter

verhältnismäßig klein ($< 100 \text{ cm/s}$). Die maximale Schmelzweite beträgt 0.5 cm , die Verdampfungstiefe 0.03 cm .

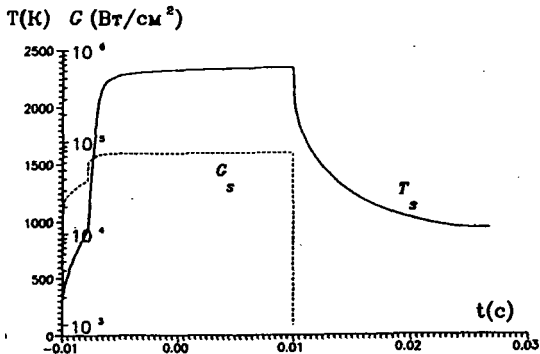


Bild 6: Zeitlicher Verlauf der Oberflächentemperatur T_s und des in der Oberfläche absorbierten Anteils G_s des Laserimpulses

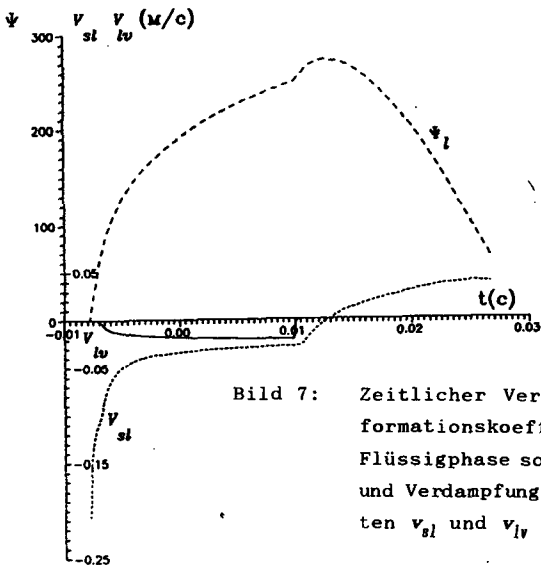


Bild 7: Zeitlicher Verlauf des Transformationskoeffizienten ψ_l der Flüssigphase sowie der Schmelz- und Verdampfungsgeschwindigkeiten v_{sl} und v_{lv}

3.3. Beispiel 2: Bestrahlung von Titan mit einem kurzen Laserimpuls

Versuchsbedingungen:

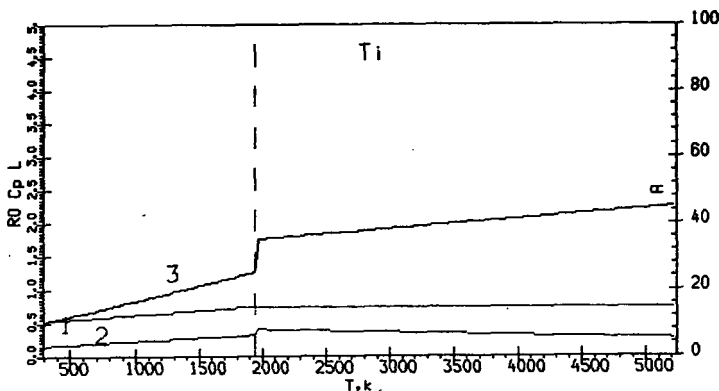
Gaußförmiger Laserimpuls kurzer Dauer und großer Intensität:

$$G = G_0 \cdot \exp[-(t/\tau)^2], \quad G_0 = 5 \cdot 10^7 \text{ W/cm}^2, \quad \tau = 100 \text{ ns}$$

Werkstück: Metallfolie (Dicke 5 μm) aus Titan

Volumenförmige Energiefreisetzung mit dem Absorptionskoeffizienten $\kappa = 7 \cdot 10^5 \text{ cm}^{-1}$

Die Temperaturabhängigkeit der Charakteristiken $\lambda(T)$, $C_p(T)$ und $A(T)$ sind im Bild 8 dargestellt.



- 1-graphic of $\lambda, \text{J}/(\text{cm} \cdot \text{k})$
 2-graphic of $C_p, \text{J}/(\text{gr} \cdot \text{k})$
 3-graphic of $A, \text{percent}$

Bild 8: Temperaturabhängigkeit des Wärmeleitkoeffizienten $\lambda(T)$, der Wärmekapazität $C_p(T)$ und der Oberflächenabsorptionfähigkeit $A(T)$ für Titan

Titan besitzt eine sehr geringe Wärmeleitfähigkeit, so daß alle Prozesse in einer sehr schmalen oberflächennahen Zone ablaufen. Der

Laserimpuls verliert in einer Tiefe von Bruchteilen eines Mikrometers seine Wirkung.

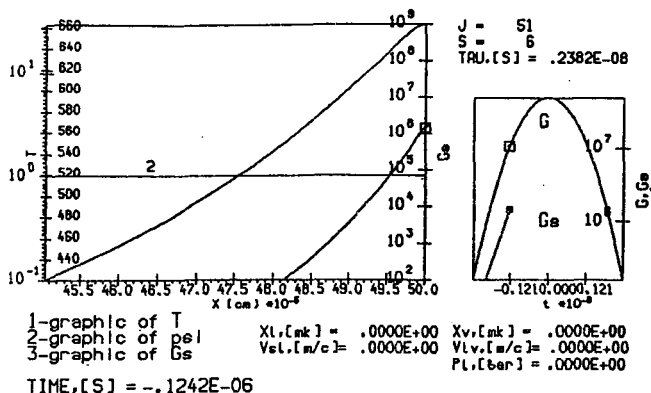


Bild 9: Temperaturprofil $T(x)$ und Verteilung der Intensität $G(x)$ in Titan bei Einwirkung eines kurzen gaußförmigen Laserimpulses ($\tau=100$ ns, $G_0=7 \cdot 10^7$ W/cm²) zu Beginn des Impulses

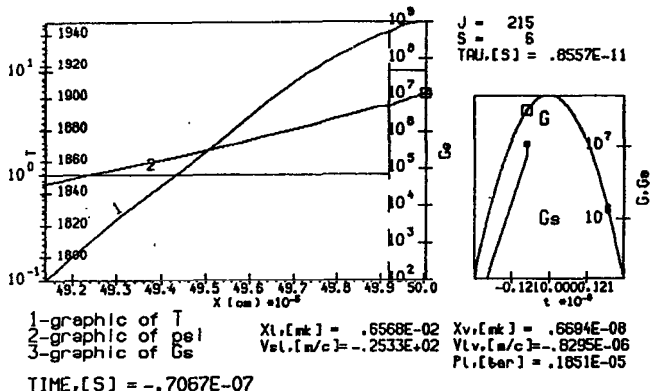


Bild 10: Dasselbe bei Beginn des Schmelzens

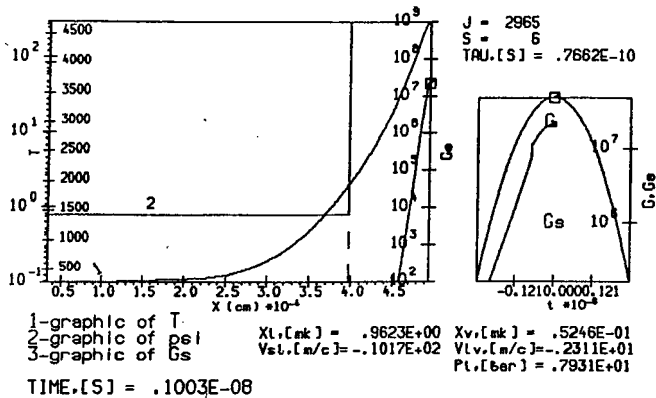
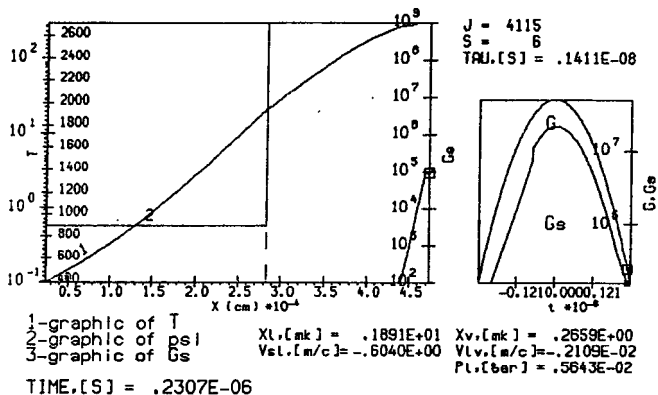
Bild 11: Die Lage der Phasenfront und die Verteilungen $T(x)$ und

Bild 12: Dasselbe am Ende des Impulses

Auf den Bildern 9-12 sind die Funktionsverläufe $T(x)$, $G(x)$ und $\Psi(x)$ für verschiedene Zeitpunkte gezeigt.

Der Schmelzzeitpunkt wird sehr schnell erreicht. Die Anfangsdicke der Schmelzschicht beträgt etwa 9 Å. Die Schmelzfrontgeschwindigkeit wächst schnell an und erreicht ihren Maximalwert von 28 m/s. Eine Beschleunigung wird nach Beginn des Schmelzens auf Grund der sprunghaften Änderung der Funktion $A(T)$ von 25% auf 35% bei Phasenänderung erreicht. Wegen der sich für die Festkörper- und die Flüssigphase kaum unterscheidenden Werte von $\lambda(T)$ und $C_p(T)$ zeigt $T(x)$ an der Phasengrenze praktisch keinen Knick. Der große Absorptionskoeffizient κ und die kleine Wärmeleitfähigkeit machen Titan für Laserbearbeitung gut geeignet. Zur Hälfte des Impulses erreicht die Oberflächentemperatur etwa 4500 K, was deutlich über der Verdampfungstemperatur des Metalls unter Normalbedingungen liegt, es tritt also eine ausgeprägte Verdampfung auf.

Auf den Bildern 13-15 sind die zeitlichen Verläufe von G , T_s , v_{sl} , v_{sl} , x_l und x_v dargestellt. Die Schmelzdicke betrug maximal 2 μm . Insgesamt wurden 0.27 μm verdampft.

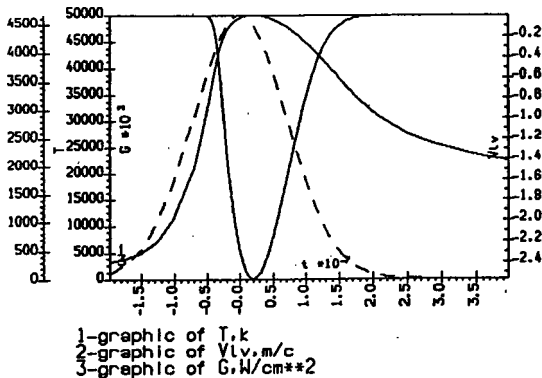
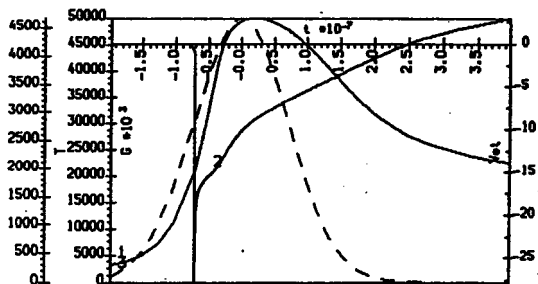
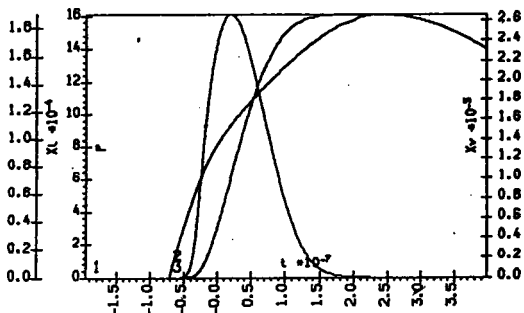


Bild 13: Zeitlicher Verlauf von T_s , v_{lv} und G_s



- 1-graphic of T_g ,k
 2-graphic of v_{sl} ,m/c
 3-graphic of G_s ,W/cm**2

Bild 14: Zeitlicher Verlauf von T_g , v_{sl} und G_s



- 1-graphic of p_l ,bar
 2-graphic of x_l ,cm
 3-graphic of x_v ,cm

Bild 15: Zeitlicher Verlauf von p_l , x_l und x_v

3.4. Beispiel 3: Laserbestrahlung von Keramik

In der letzten Zeit erfolgen intensive Forschungen auf dem Gebiet supraleitender Keramiken. Dabei werden solche Technologien wie die Laserbestrahlung von Keramiken mit dem Ziel angewandt, die geforderten Eigenschaften zu erreichen und dünne, durch Lasermaterialverdampfung erzeugte, supraleitende Schichten zu bilden. Eine grundlegende Besonderheit solcher Operationen ist die schwierige Prognosierbarkeit der Resultate, bedingt in erster Linie durch die nicht bis ins einzelne erforschte Physik der Prozesse. Keramiken gehören zu den Materialien mit sehr komplizierter chemischer Zusammensetzung und wenig untersuchten optischen und thermophysikalischen Charakteristiken, was die Bestimmung optimaler Bearbeitungsregimes erschwert. Die Rolle der mathematischen Modellierung dieser Prozesse wächst dabei bedeutend.

Wir betrachten ein Regime, wie es für Lasermaterialverdampfung von Keramik der Form $\text{YBa}_2\text{Cu}_3\text{O}_{7-x}$ charakteristisch ist. Aus Experimenten ist bekannt, daß die optischen und thermophysikalischen Charakteristiken nur schwach von der Temperatur abhängen und sich im Bereich

$$\begin{aligned} \kappa &= 10^4 \dots 10^5 \text{ cm}^{-1}, & C_p &= 0.3 \dots 0.8 \text{ J}/(\text{K} \cdot \text{g}), \\ \lambda &= \lambda_s = \lambda_l = 0.03 \text{ W}/(\text{cm K}) \end{aligned}$$

befinden. Verwendet werden deshalb mittlere und konstante Werte:

$$\begin{aligned} \kappa &= 5 \cdot 10^4 \text{ cm}^{-1}, & C_p &= C_{ps} = C_{pl} = 0.5 \text{ J}/(\text{K} \cdot \text{g}), \\ \lambda &= \lambda_s = \lambda_l = 0.03 \text{ W}/(\text{cm K}) \end{aligned}$$

Somit gehört Keramik zu den Materialien mit (im Vergleich zu Metallen) niedriger Temperaturleitfähigkeit α und verhältnismäßig hoher Strahlungsdurchlässigkeit κ .

Experimente zeigen weiterhin, daß Keramik $\text{YBa}_2\text{Cu}_3\text{O}_{7-x}$ analog zu Metallen über das Schmelzstadium verdampft. Jedoch wird infolge anderer Verhältnisse der Parameter α und κ die Laserenergie in ausgeprägter Form volumenmäßig freigesetzt.

Folgende weitere optische und thermophysikalische Parameter wurden gewählt (wegen unzureichender experimenteller Ergebnisse als konstant und gleich für beide Phasen angenommen):

$$T_{\text{I}}=1300^{\circ}\text{K}, \quad T_{\text{V}}=2000^{\circ}\text{K}, \quad L_{\text{I}}=L_{\text{V}}=2.5 \cdot 10^2 \text{ J/(g K)},$$

$$\rho_{\text{S}}=\rho_{\text{L}}=6.43\text{g/cm}, \quad A_{\text{S}}=A_{\text{L}}=80\%$$

Es sei darauf hingewiesen, daß die Erforschung der Charakteristiken von Keramik einer besonderen Betrachtung bedarf, die aber in der vorliegenden Arbeit nicht erfolgt.

Betrachtet werden nun einige allgemeine Gesetzmäßigkeiten des Schmelzens und Verdampfens einer dünnen Keramikschicht ($x_{\text{L}}=5 \mu\text{m}$) durch einen Laserimpuls mit $\tau=50 \text{ ns}$, $G_0=10^7 \text{ W/cm}^2$.

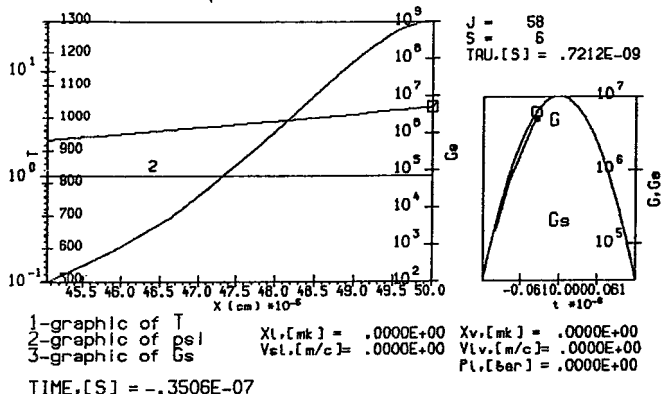


Bild 16: Verteilungen der Temperatur $T(x)$ und der Strahlungsintensität $G(x)$ in Keramik vor dem Schmelzen

Im Bild 16 ist ein für eine volumenförmige Quelle charakteristisches Temperaturprofil $T(x)$ unmittelbar vor Schmelzbeginn dargestellt.

Das erhaltene Profil unterscheidet sich von einem entsprechenden Profil bei oberflächenförmiger Energieeinwirkung durch einen geringeren Gradienten in Ortskoordinatenrichtung, was zu einem langsameren Anwachsen der Schmelzfrontgeschwindigkeit führt (vgl. Bild 22). Der Schmelzprozeß beginnt an der Oberfläche, aber die volumenförmige Quelle führt zur Herausbildung des Temperaturmaximums im Innern der Festkörperphase (Bilder 17-19), wobei das Maximum etwa 50 Grad über der Schmelztemperatur T_g liegt. Folglich bildet sich ein Gebiet der Dicke von ca. $0.5 \mu\text{m}$, in dem sich das Material im überhitzten metastabilen Zustand befindet. Die Ausdehnung des überhitzten Gebietes und der Grad der Überhitzung hängen von der Temperaturleitfähigkeit und der Absorptionsfähigkeit des Materials sowie von der Intensität der Quelle ab.

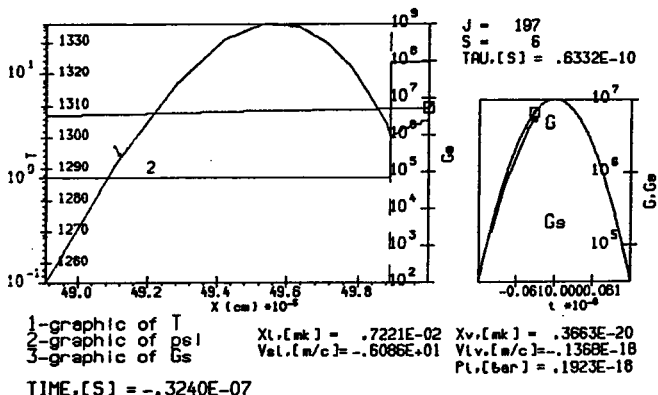


Bild 17: Verteilungen $T(x)$ und $G(x)$ nach dem Schmelzen und die Herausbildung eines überhitzten metastabilen Gebietes in der festen Phase von Keramik

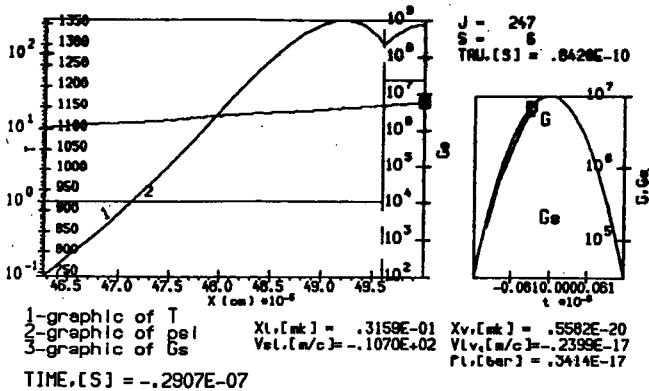


Bild 18: Wie Bild 17, zu einem späteren Zeitpunkt

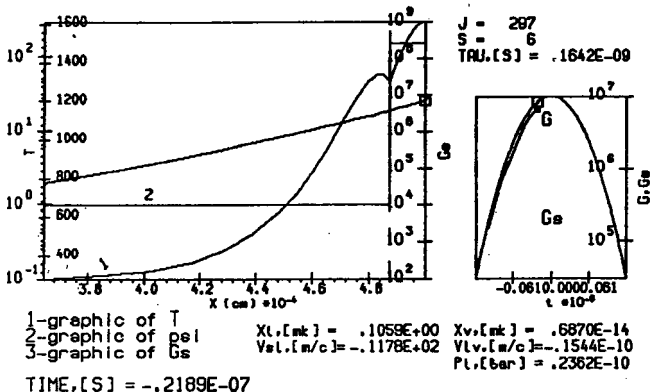


Bild 19: Wie Bild 17, zu einem späteren Zeitpunkt

Entsprechend der zunehmenden Erwärmung wächst die Flüssigphase schnell von einer Dicke von 8 Å zum Schmelzbeginn auf ca. 0.1 µm nach der Hälfte des Impulses an (vgl. Bild 20). Die Vergrößerung der Flüssigphase führt dazu, daß ein immer größerer Teil der Strahlung in der Flüssigkeit absorbiert wird, was zu deren weiterer Erwärmung bis auf die Temperatur T_v der ausgebildeten Verdampfung führt. Gleichzeitig gelangt ein immer kleinerer Teil der Strahlung in die Festkörperphase, so daß deren Überhitzung zurückgeht und vollständig verschwindet (das Temperaturprofil bleibt aber stark nichtmonoton). In der Flüssigphase führt die Verdampfung an der Oberfläche in Kombination mit der volumenförmigen Freisetzung der Laserenergie zur Bildung eines neuen metastabilen Gebietes mit einem Temperaturmaximum in einer gewissen Entfernung von der Oberfläche (vgl. Bild 20). Im Unterschied zur metastabilen Festkörperphase verschwindet dieses Gebiet bis zum Impulsende nicht.

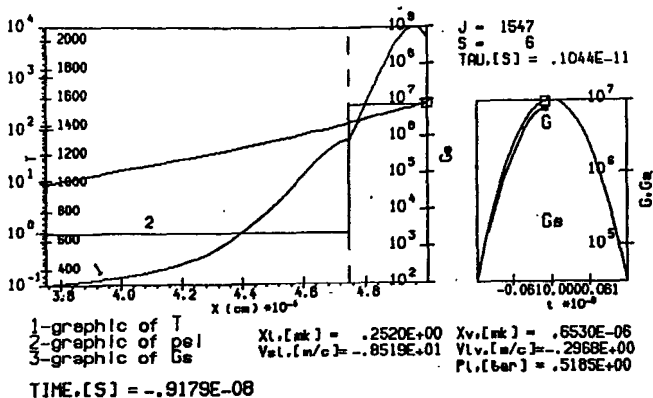
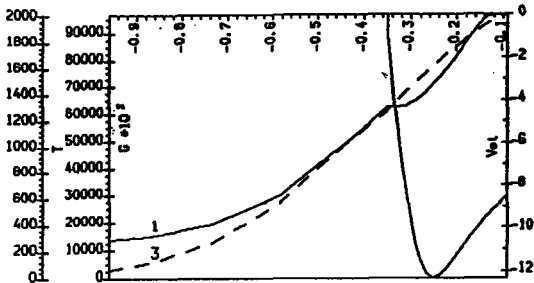
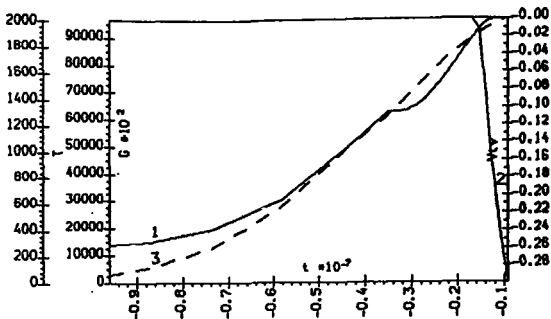


Bild 20: Herausbildung eines überhitzten metastabilen Gebietes in der Flüssigkeitsphase



- 1-graphic of T_s
 2-graphic of $v_{sl}, m/c$
 3-graphic of $G, W/cm^2$

Bild 21: Zeitliche Verläufe von T_s , v_{sl} und G



- 1-graphic of T_s
 2-graphic of $v_{lv}, m/c$
 3-graphic of $G, W/cm^2$

Bild 22: Zeitliche Verläufe von T_s , v_{lv} und G

Es ist notwendig, darauf hinzuweisen, daß das mathematische Modell ([1], Formeln (10)-(15)) die Bildung einer flüssigen Phase im Innern bzw. eine Verdampfung aus dem Innern heraus nicht

berücksichtigt, die Kinetik solcher Prozesse also mit diesen Modellen auch nicht untersucht werden kann. In dem mathematischen Modell wird zudem angenommen, daß die metastabile Phase verhältnismäßig beständig ist und bis zum Impulsende nicht verschwindet. Die dargestellten Rechenergebnisse haben deshalb das Ziel, die Aufmerksamkeit der Forscher auf das mögliche Auftreten länger beständiger metastabiler Phasen zu lenken. Eine tiefere Erforschung dieser Prozesse erfordert in erster Linie weitere experimentelle Untersuchungen und die Ausarbeitung neuer mathematischer Modelle. Die praktische Bedeutung der erhaltenen Ergebnisse besteht zum heutigen Zeitpunkt darin, daß es die mathematische Modellierung ermöglicht, Bedingungen zu ermitteln, unter denen metastabile Situationen entstehen können. Die reale Lebensdauer dieser Zustände ist unbekannt. In Wirklichkeit ist ein schlagartiger Zerfall der metastabilen Phasen infolge Verdampfung aus dem Innern heraus möglich. Das ist bei der Ausarbeitung und Anwendung von Lasertechnologien zu berücksichtigen, da der schlagartige Zerfall einer metastabilen Phase nicht nur den Prozeß des Materialabtrages beschleunigen kann, sondern auch zu ernsthaften Problemen beim Auf- und Abtragen dünner Schichten und bei der Herstellung von Elementen mit Abmessungen unter einem Mikrometer führen kann.

4. Schlußfolgerung

Die durchgeführten numerischen Simulationen auf Grundlage mathematischer Modellierung zeigen das breite Anwendungsspektrum des Programmpaketes LASTEC-1 bei Aufgaben der Laserbearbeitung homogener Materialien. Das Paket ist auf PC-Technik orientiert. Seine Anwendung liefert ausführliche Informationen über den Verlauf von Phasenumwandlungen bei Impulseinwirkung und erlaubt, die Bewegungsgeschwindigkeiten und Lagen der Phasengrenzen für ein breites Impulsspektrum zu bestimmen.

Die in [1] dargelegte Methode der numerischen Lösung von Stefan-Problemen besitzt eine hohe Effektivität und kann leicht auf räumlich mehrdimensionale Probleme und auf nichthomogene Materialien, z.B. auf die Bearbeitung von Mehrschichtsystemen, übertragen werden. Die Möglichkeit der Verwendung ungeglätteter, sich sprunghaft ändernder optischer und thermophysikalischer Charakteristiken erhöht deutlich die Genauigkeit der Berechnungen in der Umgebung der Phasengrenzen.