

# Mathematische Modellierung von wellenoptischer Absorption beim Laserschneiden

Von der Fakultät für Mathematik und Physik an der Universität Stuttgart zur Erlangung der Würde eines Doktors der Naturwissenschaften (Dr. rer. nat.) genehmigte Abhandlung

Vorgelegt von  
Maximilian Klumpp  
aus Nürtingen

Hauptberichter: Prof. Dr. Guido Schneider  
Mitberichter: Prof. Dr. Thomáš Dohnal  
Prof. Dr. Hannes Uecker

Tag der mündlichen Prüfung: 14.12.2022

Institut für Analysis, Dynamik und Modellierung der Universität Stuttgart  
2022



# Inhaltsverzeichnis

Abkürzungsverzeichnis	5
Abstract	7
<b>1 Physikalische und mathematische Grundlagen des Laserschneidens</b>	<b>11</b>
1.1 Wellenoptik . . . . .	13
1.2 Interaktion mit dem Werkstück . . . . .	27
1.3 Lösungstheorie partieller Differentialgleichungen . . . . .	31
<b>2 Vereinfachte Modelle</b>	<b>37</b>
2.1 Raytracing . . . . .	40
2.2 Wellenoptische Modelle . . . . .	52
2.3 Modellauswahl . . . . .	71
<b>3 Reflexionsmodell</b>	<b>73</b>
3.1 Gesamtmodell . . . . .	75
3.2 Simulation des Schnittspalts . . . . .	78
3.3 Modellvalidierung . . . . .	80
<b>4 Analytische Resultate</b>	<b>89</b>
4.1 Schrödingerapproximation im Freiraum . . . . .	89
4.2 Schrödingerapproximation bei senkrechter Wand . . . . .	94
4.3 Schrödingerapproximation bei waagrechter Wand . . . . .	101
<b>5 Ergebnisse</b>	<b>109</b>
5.1 Zusammenfassung . . . . .	109
5.2 Ausblick . . . . .	110
<b>A Anhang</b>	<b>113</b>
A.1 Verwendete Sätze und Notationen . . . . .	113
A.2 Nebenrechnungen . . . . .	116
<b>Literatur</b>	<b>136</b>
<b>Abbildungsverzeichnis</b>	<b>138</b>



# Abkürzungsverzeichnis

Formelzeichen	Bedeutung
$E, \mathbf{E}$	elektrisches Feld
$\mathbf{B}$	magnetische Flussdichte
$\mathbf{D}$	elektrische Flussdichte
$\mathbf{H}$	magnetische Feldstärke
$x, y, z, \mathbf{x}$	Ort
$t$	Zeit
$\varepsilon_0$	elektrische Feldkonstante
$\mu_0$	magnetische Feldkonstante
$\lambda$	Wellenlänge
$k = \frac{2\pi}{\lambda}$	Wellenzahl
$z_R$	Rayleighlänge
$M^2$	Beugungsmaßzahl
$w$	Strahlradius
$P$	Leistung
$\mathbf{S}$	Poynting-Vektor
$I$	Intensität
TEM	transverse electromagnetic mode (transversalelektromagnetische Welle)
$\partial_t = \frac{\partial}{\partial t}$	partielle Ableitung nach $t$
$\ \cdot\ $	Norm
$L^p$	$L^p$ -Raum
$L_s^p$	gewichteter $L^p$ -Raum
$H^s$	Sobolev-Raum
$C^n$	Raum der $n$ -fach stetig differenzierbaren Funktionen
$B_r(\mathbf{a})$	Ball mit Radius $r$ um Punkt $\mathbf{a}$
$\mathbf{v}$	vektorielle Größe
$v^*$	komplex Konjugierte von $v$
$\Re, \Im$	Real- und Imaginärteil



# Abstract

In this work, the interaction of a laser beam with a metallic workpiece is investigated wave-optically.

In chapter 1, the mathematical and physical fundamentals of laser cutting are introduced by a review of the existing literature. In addition, some lemmas and corollaries are proved which are relevant for the further course of the thesis.

From Maxwell's equations, the Helmholtz equation is derived in chapter 1.1. For this purpose, it is mainly used that the spectrum of the laser is very narrow banded. However, the Helmholtz equation is not considered as a classical boundary value problem, but as an initial value problem. Since this yields an ill-posed initial value problem, multiple approximation results are proved using a multi-scale approach (Chapter 4): One can approximate the solution of the Helmholtz equation using the Schrödinger equation in the case of free space propagation, with a vertical and a horizontal metallic surface. By the well-posed initial value problem obtained in this way, the propagation of the laser beam through these geometries can be described.

However, for a general intersection geometry, the simulation of the initial value problem turns out to be difficult because the solution is highly oscillatory (wavenumber  $k \approx 6 \cdot 10^7 \text{ m}^{-1}$ ). In order to reproduce all wave-optical effects (interference, diffraction, reflection from walls...), two models are developed: The first one describes the propagation through a slit with 100% absorption coefficient (chapter 2.2), the second one the reflection of the field at the walls (chapter 3). More precisely, the first model describes how the incident field is shadowed behind an obstacle. For this purpose, different submodels are developed, which consider different aspects. The final propagation model takes into account as many properties of these submodels as possible while minimizing the simulation time.

In the second model, the electric field is decomposed into its Fourier modes and geometric considerations are applied to each plane wave, which are needed to derive the Fresnel equations. As a result, one can express the reflected field in terms of the incident field.

In combination (chapter 3.1), these two models provide the electric field in the interface at a given initial condition  $E_0$ . From this, the intensity of the absorbed electric field can

be calculated. The overall model is applied to the kerf in chapter 3.2. Different approximations were used to speed up the simulation. Accordingly, the overall model is validated in chapter 3.3.



# Kurzzusammenfassung

In dieser Arbeit wird die Interaktion eines Laserstrahls mit einem metallischen Werkstück wellenoptisch untersucht.

In Kapitel 1 werden die mathematischen und physikalischen Grundlagen des Laserschneidens durch einen Überblick der vorhandenen Literatur vorgestellt. Zusätzlich werden einige Lemmas und Korrolare bewiesen, die für den weiteren Verlauf der Dissertation von Relevanz sind.

Aus den Maxwellgleichungen wird in Kapitel 1.1 die Helmholtzgleichung hergeleitet. Dafür wird hauptsächlich verwendet, dass das Spektrum des Lasers sehr schmalbandig ist. Die Helmholtzgleichung wird jedoch nicht als klassisches Randwertproblem betrachtet, sondern als Anfangswertproblem. Da diese ein schlecht gestelltes Anfangswertproblem liefert, werden mithilfe eines Multi-Skalen-Ansatzes mehrere Approximationsresultate bewiesen (Kapitel 4): Man kann im Fall der Freiraumpropagation, bei einer senkrechten und einer waagrechten metallischen Oberfläche die Lösung der Helmholtzgleichung mithilfe der Schrödingergleichung approximieren. Durch das dadurch gewonnene wohlgestellte Anfangswertproblem kann die Propagation des Laserstrahls durch diese Geometrien beschrieben werden.

Für eine allgemeine Schlitzspaltgeometrie gestaltet sich die Simulation des Anfangswertproblems jedoch als schwierig, da die Lösung hochoszillatorisch ist (Wellenzahl  $k \approx 6 \cdot 10^7 \text{ m}^{-1}$ ). Um alle wellenoptischen Effekte (Interferenz, Beugung, Reflexion an Wänden...) wiedergeben zu können, werden zwei Modelle entwickelt: Das erste beschreibt die Propagation durch einen Schlitzspalt mit 100% Absorptionsgrad (Kapitel 2.2), das zweite die Reflexion des Feldes an den Wänden (Kapitel 3). Genauer gesagt beschreibt das erste Modell wie das einfallende Feld hinter einem Hindernis abgeschattet wird. Dazu werden verschiedene Teilmodelle entwickelt, die unterschiedliche Aspekte berücksichtigen. Das finale Propagationsmodell berücksichtigt möglichst viele Eigenschaften dieser Teilmodelle bei gleichzeitiger Minimierung der Simulationsdauer.

Im zweiten Modell wird das elektrische Feld in seine Fouriermoden zerlegt und für jede ebene Welle werden geometrische Überlegungen angewendet, die zur Herleitung der Fresnel'schen Formeln benötigt werden. Dies hat zur Folge, dass man das reflektierte Feld durch das einfallende Feld ausdrücken kann.

In Kombination (Kapitel 3.1) liefern diese beiden Modelle das elektrische Feld im Schlittspalt zu einer gegebenen Anfangsbedingung  $E_0$ . Daraus lässt sich die Intensität des absorbierten elektrischen Feldes berechnen. Das Gesamtmodell wird in Kapitel 3.2 auf den Schlittspalt angewendet. Um die Simulation zu beschleunigen, werden verschiedene Näherungen verwendet. Das Gesamtmodell wird dementsprechend in Kapitel 3.3 validiert.

# Physikalische und mathematische Grundlagen des Laserschneidens

Laser ist ein Akronym für light amplification by stimulated emission of radiation (Lichtverstärkung durch stimulierte Emission von Strahlung). Albert Einstein beschrieb diese stimulierte Emission bereits 1916 [Ein16], 1928 wies Rudolf Ladenburg sie experimentell nach [KL28]. Schließlich erzeugte Theodor Maimann 1960 den ersten Laserstrahl aus einem Rubinkristall [Mai60].

Laser sind aus der modernen Welt nicht mehr wegzudenken: Bei industriellen Prozessen [War13] wird der Laser zum Schneiden von Metallen verwendet, in der Medizin [WWH13] in Operationen oder in der Informatik [WHO<sup>+</sup>13] beim Aufbau von Quantencomputern.

Auch aus mathematischer Sicht ist das Thema höchstinteressant: Es kombiniert die wichtigen Themenblöcke mathematische Physik, Modellierung und Simulation. Außerdem kommen beim Laser Themen wie nichtlineare Gleichungen, Welleninteraktionen, Selbstfokussierung, Singularitäten, schwache Lösungen, Solitonen, Attraktoren, Bifurkationen, Turbulenz [NM92, S. 1 ff] uvm. zusammen. Dabei werden Modelle auf verschiedenen Größenskalen (von der Quantenebene [Dum05] bis hin zu makroskopischen Effekten [Mes09, S. 127ff]) erstellt. Eine Simulation des Schneidprozesses (makroskopisch) mit einer mikroskopischen Ortsauflösung ist jedoch momentan mit einem handelsüblichen Rechner unmöglich zu simulieren. Deshalb müssen Modelle gefunden werden, die analytische und numerische Lösbarkeit mit guter Approximation der Wirklichkeit verbinden.

Obwohl diese Anwendung bereits seit mehreren Jahrzehnten experimentell und theoretisch untersucht wurde, gibt es bisher kein umfassendes Modell zur Beschreibung der Laser-Material-Wechselwirkung. Um optimale Bearbeitungsparameter zu finden, werden in der Regel umfangreiche experimentelle Parameterstudien durchgeführt. Das ist jedoch sehr teuer und ohne theoretischen Hintergrund auch wenig zielführend.

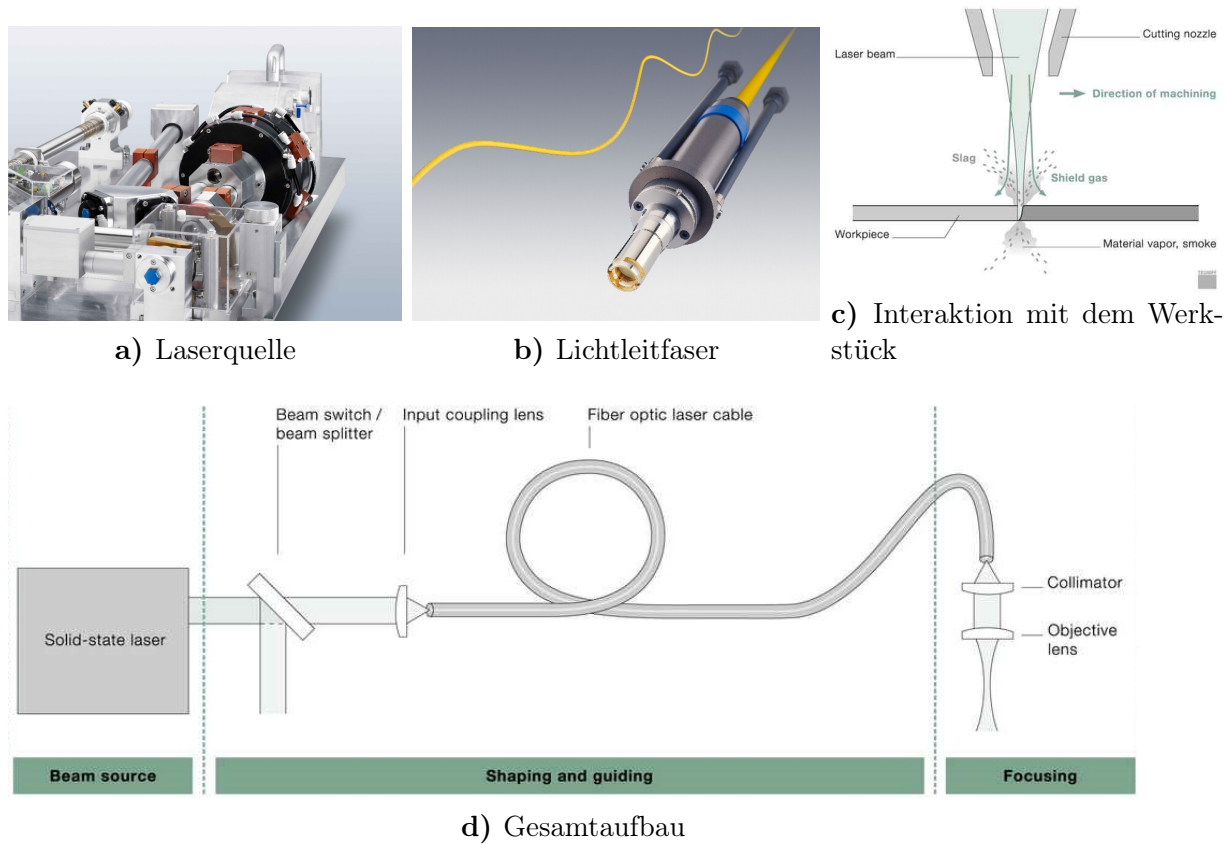


Abbildung 1.1: Von der Laserquelle wird das elektrische Feld durch eine Faser zum Werkstück geführt, dort interagiert es mit der metallischen Oberfläche. Quelle: Trumpf

In dieser Dissertation werden verschiedene Modelle im Bereich Laserschneiden dargelegt. Einen Überblick über die einzelnen Komponenten des Laserschnitts ist in Abbildung 1.1 zu sehen. In dieser Arbeit beschäftigen wir uns mit dem, was nach dem Objektiv bis zur Absorption in Metall geschieht. Das beinhaltet ein Strahlenmodell, ein Absorptionsmodell und die Implementierung derselben. Insbesondere wurde ein konsistenter Übergang zwischen Strahlen- und Absorptionsmodell gefunden, meistens werden diese Modelle getrennt voneinander betrachtet. Die Modelle wurden in Matlab implementiert.

Die Qualität des Laserschnitts ist teilweise noch nicht auf dem gewünschten Niveau (siehe Abbildung 1.2), das möchte man mit Strahlformung (vor allem Intensität und Polarisation) verbessern. Ein geeignetes Absorptionsmodell unterstützt diesen Prozess, da zum Beispiel die entsprechenden Parameter gezielter angepasst werden können. Außerdem ist eine Simulation in Matlab mit einem validierten Modell schneller und sparsamer (Kosten/Energie) als ein Experiment mit Werkstück, Spezialoptiken und Laser. Auch ist die Erstellung von Simulationsmodellen Teil der Digitalisierungsstrategie vieler Firmen.

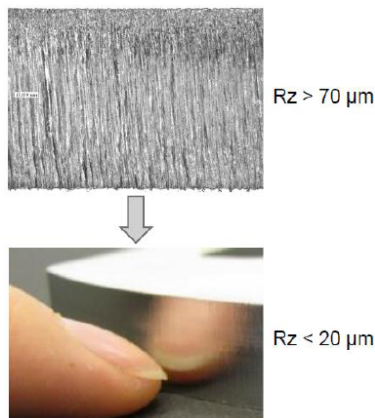


Abbildung 1.2: Die Kantenrauheit beim Laserschneiden variiert stark je nach Laser/Werkstück und kann z.T. noch verbessert werden. Quelle: Trumpf

Diese Dissertation entstand in Kooperation mit der Trumpf-Gruppe, im folgenden Text Trumpf genannt. Dementsprechend wird das Absorptionsmodell direkt in der Arbeitsalltag bei Trumpf integriert werden. Das Modell wurde in enger Zusammenarbeit mit Kollegen aus der Polarisationsforschung erstellt. Die Firma Trumpf stellte Messdaten vom Werkstück, vom Laser und vom Lichtleitkabel zur Verfügung, die in das Modell einfließen.

Im folgenden Abschnitt werden die für das Laserschneiden relevanten Differentialgleichungen vorgestellt und Eigenschaften der Lösungen in eigenen Lemmas/Korrollaren bewiesen.

## 1.1 Wellenoptik

Für die wellenoptische Beschreibung eines Laserstrahls sind die Maxwellgleichungen

$$\begin{aligned}
 \nabla \times \mathbf{E} + \partial_t \mathbf{B} &= 0, & (\text{Induktionsgesetz}) \\
 \nabla \times \mathbf{H} - \partial_t \mathbf{D} &= \mathbf{j}, & (\text{Durchflutungsgesetz}) \\
 \nabla \cdot \mathbf{D} &= \rho, & (\text{Gaußsches Gesetz der Elektrostatik}) \\
 \nabla \cdot \mathbf{B} &= 0 & (\text{Gaußsches Gesetz des Magnetismus})
 \end{aligned} \tag{1.1}$$

die Basis. James Clerk Maxwell gilt mit seiner Forschung [Max65] als Begründer der Elektrodynamik. In (1.1) sind die elektrische Feldstärke  $\mathbf{E} \in \mathbb{R}^3$ , die magnetische Flussdichte  $\mathbf{B} \in \mathbb{R}^3$ , die magnetische Feldstärke  $\mathbf{H} \in \mathbb{R}^3$ , die elektrische Flussdichte  $\mathbf{D} \in \mathbb{R}^3$  und die Stromdichte  $\mathbf{j} \in \mathbb{R}^3$  vektorielle Größen, die vom Ort  $\mathbf{x} \in \mathbb{R}^3$  und von der Zeit  $t \in \mathbb{R}$  abhängen. Die Ladungsdichte  $\rho \in \mathbb{R}$  hängt auch vom Ort und der Zeit ab,  $\nabla$  ist der Nabla-Operator und

$\partial_t = \frac{\partial}{\partial t}$  ist die partielle Ableitung nach der Zeit. Zusätzlich müssen die Maxwellgleichungen um konstitutive Materialgleichungen ergänzt werden, die  $\mathbf{D}$  und  $\mathbf{H}$  mit  $\mathbf{B}$  und  $\mathbf{E}$  in Beziehung setzen. Dies wird in den folgenden Abschnitten gemacht. Zusammen mit den Materialgleichungen löst man die Maxwellgleichungen nach  $(\mathbf{E}, \mathbf{B})$  auf und erhält dadurch  $(\mathbf{D} = \mathbf{D}(\mathbf{E}, \mathbf{B}), \mathbf{H} = \mathbf{H}(\mathbf{E}, \mathbf{B}))$ . Im folgenden Lemma wird eine wichtige Eigenschaft der Lösung  $(\mathbf{E}, \mathbf{B}, \mathbf{D}, \mathbf{H})$  der Maxwellgleichungen beschrieben.

**Lemma 1.1.1.** *Falls die Felder  $(\mathbf{E}, \mathbf{B}, \mathbf{D}, \mathbf{H})$  eine Lösung der Maxwellgleichungen (1.1) sind, es Konstanten  $\varepsilon, \mu, \sigma \in \mathbb{C}$  gibt mit  $\mathbf{D} = \varepsilon \mathbf{E}, \mathbf{B} = \mu \mathbf{H}, \mathbf{j} = \sigma \mathbf{E}$  und  $\mathbf{E}, \mathbf{B} \in C^1(\mathbb{R}^4)$  gilt, dann sind die Komponenten  $\mathbf{E} \cdot \mathbf{e}_i$  und  $\mathbf{B} \cdot \mathbf{e}_i$  analytisch mit einem beliebigen karthesischen Koordinatenvektor  $\mathbf{e}_i \in \{\mathbf{e}_x, \mathbf{e}_y, \mathbf{e}_z\}$ .*

*Beweis.* Siehe [CK12, S. 194] □

Da die Bedingungen dieses Lemmas beim Laserschneiden in unserem Anwendungsfall erfüllt sind (Näheres dazu in Kapitel 1.1.3), können im Folgenden die partiellen Ableitungen nach dem Satz von Schwartz<sup>1</sup> vertauscht werden.

### 1.1.1 Propagation in Vakuum

Im Vakuum gilt  $\mathbf{D} = \varepsilon_0 \mathbf{E}$  und  $\mathbf{B} = \mu_0 \mathbf{H}$  mit der elektrischen Feldkonstante  $\varepsilon_0$  und der magnetischen Feldkonstante  $\mu_0$ . Die beiden Naturkonstanten definieren die Lichtgeschwindigkeit  $c := (\varepsilon_0 \mu_0)^{-\frac{1}{2}}$ . Außerdem ist im Vakuum  $\rho = 0, \mathbf{j} = \mathbf{0}$ . Es folgt

$$\begin{aligned} c^2 \Delta \mathbf{E} - \partial_t^2 \mathbf{E} &= 0 \\ c^2 \Delta \mathbf{B} - \partial_t^2 \mathbf{B} &= 0 \end{aligned}$$

mit dem Laplace-Operator  $\Delta = \partial_x^2 + \partial_y^2 + \partial_z^2$ . Die Felder  $\mathbf{E}$  und  $\mathbf{B}$  erfüllen dementsprechend die Wellengleichung. Wendet man Fouriertransformation<sup>2</sup> in der Zeit auf die Wellengleichung an, ergibt sich die Helmholtzgleichung

$$c^2 \Delta \check{\mathbf{E}} + \omega^2 \check{\mathbf{E}} = 0 \Leftrightarrow \Delta \check{\mathbf{E}} + k_0^2 \check{\mathbf{E}} = 0$$

mit  $k_0 := \omega/c$  und  $\check{\mathbf{E}}(\mathbf{x}, \omega) = \mathcal{F}[\mathbf{E}(\mathbf{x}, \cdot)](\omega)$ . Da die Wellen- bzw. die Helmholtzgleichung für jede Komponente  $E$  von  $\mathbf{E}$  gilt, genügt es, nur eine Komponente  $E$  des elektrischen Felds  $\mathbf{E}$

<sup>1</sup>Siehe Anhang A.1.1 auf Seite 113

<sup>2</sup>Definition in Anhang A.1.3 auf Seite 113

und die skalare Helmholtzgleichung

$$\Delta E + k^2 E = 0$$

bzw. die skalare Wellengleichung  $c^2 \Delta E = \partial_t^2 E$  zu betrachten, um eine Lösung der Maxwellgleichungen zu finden.

### Komplexe Felder

Statt mit dem reellen Feld  $\mathbf{E}$  zu rechnen, ist es oft einfacher die komplexe Darstellung für eine Fouriermode  $\mathbf{E} = \Re(\tilde{\mathbf{E}}e^{-i\omega t})$  zu nutzen. Dabei ist  $i = \sqrt{-1}$  die imaginäre Einheit und  $e = \exp(1)$  die Eulersche Zahl. Das komplexe Feld  $\tilde{\mathbf{E}}$  löst genauso die Helmholtzgleichung und  $\mathbf{E}_c(x, y, z, t) = \tilde{\mathbf{E}}(x, y, z)e^{-i\omega t}$  löst die Wellengleichung. Im folgenden Text wird ab jetzt das komplexe Feld  $\mathbf{E}_c$  wieder  $\mathbf{E}$  genannt. Über die Realteilbildung erhält man dann das physikalisch messbare elektrische Feld. Analog wird mit dem magnetischen Feld verfahren.

Ebene Wellen  $E(x, y, z, t) = \exp(i\mathbf{k}\mathbf{x} - i\omega t)$  sind Lösungen der skalaren Wellengleichung, wenn die Dispersionsrelation  $\omega = c|\mathbf{k}|$  erfüllt ist. Sie sind jedoch keine physikalisch sinnvolle Lösung, da sie eine unendliche Ausbreitung ( $|E| = 1$ ) und unendliche Energie besitzen. Mit dem Ansatz

$$E(x, y, z, t) = E_s(x, y, z) \exp(ikz - i\omega t) \quad (1.2)$$

und der Vernachlässigung des Terms  $\partial_z^2 E_s$  [Gra09, S. 31] ergibt sich die paraxiale Wellengleichung

$$\partial_x^2 E_s + \partial_y^2 E_s = -2ik\partial_z E_s. \quad (1.3)$$

Diese Näherung wird in [NM92, S.41ff] durch ein schmalbandiges Spektrum begründet und die dabei gemachten Fehler werden in [MS97] analysiert. Wie groß der gemacht Fehler dabei ist, wird in Kapitel 3.3 untersucht und eine mathematisch rigorose Herleitung der paraxialen Wellengleichung durchgeführt. Ersetzt man die Evolutionsvariable  $z$  durch die Zeit  $t$ , ergibt sich die Schrödingergleichung in zwei Raumdimensionen. Für eine gegebene Anfangsbedingung  $E_0 = E_s|_{z=0} \in L^2(\mathbb{R}^2)$  ist die eindeutige Lösung von (1.3) durch

$$E_s(x, y, z) = \mathcal{F}^{-1} \left[ \hat{E}_0(k_x, k_y) \exp\left(-i\frac{k_x^2 + k_y^2}{2k}z\right) \right] (x, y) \quad (1.4)$$

gegeben. Dabei ist  $\widehat{E} = \mathcal{F}[E]$  die Fouriertransformation in  $(x, y) \leftrightarrow (k_x, k_y)$ . Setzt man die Anfangsbedingung  $E_s(x, y, 0) = E_0 \exp\left(-\frac{x^2+y^2}{w_0}\right)$  in (1.4) ein, ergibt sich die Gaußmode

$$\begin{aligned} E_s(x, y, z) &= E_0 \frac{iz_R}{z + iz_R} \exp\left(-\frac{ik}{2} \frac{x^2 + y^2}{z + iz_R}\right) \\ &= \frac{E_0 z_R}{\sqrt{z^2 + z_R^2}} \exp\left(-\frac{kz_R}{2} \frac{x^2 + y^2}{z^2 + z_R^2} + i \frac{kz}{2} \frac{x^2 + y^2}{z^2 + z_R^2} + i \arctan\left(\frac{z}{z_R}\right)\right) \end{aligned} \quad (1.5)$$

mit  $z_R = \frac{w_0^2 k}{2}$ . Sie ist die Grundmode ( $n = 0 = m$ ) der TEM<sub>mn</sub>-Moden (transversalelektromagnetische Moden, Herleitung in [Gra09, S. 29ff])

$$\begin{aligned} E_s(x, y, z) &= \text{TEM}_{mn}(x, y, z) \\ &= E_0 \frac{w_0}{w(z)} \psi_m\left(\frac{\sqrt{2}x}{w(z)}\right) \cdot \psi_n\left(\frac{\sqrt{2}y}{w(z)}\right) \exp(i\Phi_{mn}(x, y, z)) \end{aligned} \quad (1.6)$$

mit

$$\begin{aligned} w(z) &= w_0 \sqrt{1 + \left(\frac{z}{z_R}\right)^2}, \\ \psi_m(x) &= H_m(x) \exp\left(-\frac{x^2}{2}\right), \\ \Phi_{mn}(x, y, z) &= -\frac{k}{2} \frac{x^2 + y^2}{R(z)} - (m + n + 1) \arctan\left(\frac{z}{z_R}\right), \\ R(z) &= z_R \left(\frac{z}{z_R} + \frac{z_R}{z}\right). \end{aligned}$$

Der Winkel  $\arctan\left(\frac{z}{z_R}\right)$  wird Goy-Phase genannt und  $H_n(x) = (-1)^n e^{x^2} \partial_x^n e^{-x^2}$  sind die Hermite-Polynome,  $z_R = \pi w_0^2 / \lambda$  ist die Rayleighlänge und  $w_0 \in \mathbb{R}^+$  ist der Strahlradius des Lasers bei  $z = 0$ . Die Hermite-Gauss-Moden  $\psi_m$  sind orthogonal in  $L^2(\mathbb{R})$  [Hau12, S. 507ff] und die TEM<sub>mn</sub>-Moden sind Lösungen der paraxialen Wellengleichung [Hau12, S. 105f], dementsprechend eignen sich Linearkombinationen besonders gut zur Modellierung eines beliebigen Laserstrahls. Für die Anwendung sind die TEM<sub>mn</sub>-Moden relevant, da sie unter anderem die Fokussierung des Laserstrahls elegant beschreiben. Außerdem ist

$$\mathbf{E} = \left( \mathbf{e}_x T + \frac{ik}{\omega^2 \mu_0 \varepsilon_0} \mathbf{e}_z \partial_x T \right) \exp(ikz - i\omega t) = \left( \mathbf{e}_x T + \frac{i}{k} \mathbf{e}_z \partial_x T \right) \exp(ikz - i\omega t) \quad (1.7)$$



eine Lösung der Maxwellgleichungen im Vakuum für eine beliebige TEM<sub>mn</sub>-Mode  $T$  [Hau12, S. 104f]. Für das Gaußsche Gesetz der Elektrostatik

$$\nabla \cdot \mathbf{E} = 0$$

muss hierzu die paraxiale Näherung  $|\partial_z \partial_x T| \ll k |\partial_x T|$  genutzt werden.

Sei

$$\langle x^n \rangle = \frac{\int_{\mathbb{R}^2} x^n |E(x, y, z)|^2 dx dy}{\int_{\mathbb{R}^2} |E(x, y, z)|^2 dx dy}$$

das  $n$ -te Moment in  $x$ -Richtung von  $E$ ,

$$\sigma_x(z) := \sqrt{\langle x^2 \rangle - \langle x \rangle^2}$$

die Varianz des Strahls und

$$M_x^2 := \frac{\pi}{\lambda} w_0 \arctan \left( \lim_{z \rightarrow \infty} \frac{2\sigma_x(z)}{z} \right).$$

die Beugungsmaßzahl in  $x$ -Richtung. Diese gibt an wie paraxial bzw. wie fokussiert der Strahl ist: Eine möglichst kleine Strahltaillie und ein möglichst kleiner Öffnungswinkel

$$\phi := \arctan \left( \lim_{z \rightarrow \infty} \frac{2\sigma_x(z)}{z} \right)$$

ergeben eine besonders gute Strahlqualität ( $M_x^2$  minimal). Für die TEM-Moden gilt [HG13, S. 23]

$$M_x^2 = \frac{k w_0}{2} \arctan \left( \frac{2\sqrt{2n+1}}{w_0 k} \right) \approx \sqrt{2n+1}.$$

Analoges ergibt sich in  $y$ -Richtung. Für ein allgemeines Feld  $E(\cdot, \cdot, z) \in H^1(\mathbb{R}^2)$  mit  $\widehat{E}(\cdot, \cdot, z) \in H^1(\mathbb{R}^2)$  gilt

$$M_x^2 \geq 1. \tag{1.8}$$

Dabei ist  $H^1(\mathbb{R}^2)$  der Sobolevraum, der im Anhang A.1.4 auf Seite 114 definiert wird. Einen Beweis dieser Aussage, der aus einfacher Operatortheorie folgt, ist im Anhang A.2.1 auf Seite 116 zu finden.

**Lemma 1.1.2.** Für eine Lösung  $E$  der paraxialen Wellengleichung mit  $E(\cdot, \cdot, z), \widehat{E}(\cdot, \cdot, z) \in H^1(\mathbb{R}^2)$  und  $\|E(\cdot, \cdot, z)\|_{L^2(\mathbb{R}^2)} \neq 0$  gilt: Es gibt  $w_0, z_R \in \mathbb{R}$  mit der Eigenschaft

$$2\sigma_x(z) = w_0 \sqrt{1 + \left(\frac{z - z_0}{z_R}\right)^2}.$$

*Beweis.* Sei  $\text{ObdA} \langle x \rangle = 0$ . Mit dem Satz von Plancherel<sup>3</sup> gilt dann

$$\sigma_x(z) = \frac{\|xE\|_{L^2(\mathbb{R}^2)}}{\|E\|_{L^2(\mathbb{R}^2)}} = \frac{\|\partial_{k_x}\widehat{E}\|_{L^2(\mathbb{R}^2)}}{\|\widehat{E}\|_{L^2(\mathbb{R}^2)}}.$$

Da für eine Lösung der paraxialen Wellengleichung

$$\begin{aligned} \widehat{E} = \widehat{E}_0 \exp\left(-i\frac{k_x^2 + k_y^2}{2k}z\right) &\Rightarrow \partial_{k_x}\widehat{E} = \left(\partial_{k_x}\widehat{E}_0 - i\frac{k_x z}{k}\widehat{E}_0\right) \exp\left(-i\frac{k_x^2 + k_y^2}{2k}z\right), \\ \|\widehat{E}\|_{L^2(\mathbb{R}^2)} &= \|\widehat{E}_0\|_{L^2(\mathbb{R}^2)} \end{aligned}$$

gilt, folgt

$$\sigma_x(z) = \frac{\|\partial_{k_x}\widehat{E}_0 - i\frac{k_x z}{k}\widehat{E}_0\|_{L^2(\mathbb{R}^2)}}{\|\widehat{E}_0\|_{L^2(\mathbb{R}^2)}}.$$

Mit der komplexen Darstellung  $\frac{\partial_{k_x}\widehat{E}_0}{\|\widehat{E}_0\|_{L^2(\mathbb{R}^2)}} = a + ib$ ,  $\frac{\frac{k_x}{k}\widehat{E}_0}{\|\widehat{E}_0\|_{L^2(\mathbb{R}^2)}} = c + id$  folgt

$$\begin{aligned} \sigma_x^2(z) &= \int_{\mathbb{R}^2} |a + ib - (c + id)iz|^2 dk_x dk_y \\ &= \int_{\mathbb{R}^2} (a + dz)^2 + (b - cz)^2 dk_x dk_y \\ &=: A + Bz + Cz^2. \end{aligned}$$

Vergleicht man das mit der gewünschten Darstellung

$$4\sigma_x^2(z) = w_0^2 \left(1 + \left(\frac{z - z_0}{z_R}\right)^2\right) = w_0^2 + w_0^2 \frac{z_0^2}{z_R^2} - w_0^2 \frac{2z_0}{z_R^2} z + \frac{w_0^2}{z_R^2} z^2,$$

<sup>3</sup>Siehe Anhang A.1.5 auf Seite 114

folgt aus einem Koeffizientenvergleich

$$\begin{aligned}\frac{w_0^2}{4z_R^2} &= C \\ -\frac{w_0^2 z_0}{2z_R^2} &= B \\ \frac{w_0^2}{4} + \frac{w_0^2 z_0^2}{4z_R^2} &= A.\end{aligned}$$

Daraus ergeben sich die Parameter  $z_R, z_0$  und  $w_0$ : Wählt man

$$\begin{aligned}z_R &= \frac{w_0}{2\sqrt{C}} \\ \Rightarrow -2Cz_0 &= B \Leftrightarrow z_0 = -\frac{B}{2C} \\ \Rightarrow \frac{w_0^2}{4} + z_0^2 C &= A \Leftrightarrow w_0 = 2\sqrt{A - \frac{B^2}{4C}},\end{aligned}$$

so ergibt sich die gewünschte Darstellung. Zu zeigen ist nur noch  $B^2 < 4AC$  und  $C \neq 0$ , um wohldefinierte Werte  $w_0, z_0, z_R \in \mathbb{R}$  zu erhalten. Berechne dazu

$$C = \int_{\mathbb{R}^2} c^2 + d^2 \, dk_x \, dk_y = \frac{\|k_x \widehat{E}_0\|_{L^2(\mathbb{R}^2)}^2}{k^2 \|\widehat{E}_0\|_{L^2(\mathbb{R}^2)}^2}.$$

Es gilt

$$\begin{aligned}\|k_x \widehat{E}_0\|_{L^2(\mathbb{R}^2)} = 0 &\Leftrightarrow k_x \cdot \widehat{E}_0(k_x, k_y) = 0 \text{ f.ü.} \\ &\Leftrightarrow \widehat{E}_0(k_x, k_y) = 0 \text{ f.ü.,}\end{aligned}$$

was einen Widerspruch zu unseren Voraussetzungen darstellt. Dementsprechend gilt  $C \neq 0$  und daher ist  $z_R, w_0, z_0$  wohldefiniert. Außerdem folgt  $z_0 \in \mathbb{R}$  und es gilt

$$\begin{aligned}B &= 2 \int_{\mathbb{R}^2} ad - bc \, dk_x \, dk_y = 2 \int_{\mathbb{R}^2} \Im((a - ib)(c + id)) \, dk_x \, dk_y \\ &\leq 2 \int_{\mathbb{R}^2} |a - ib| \cdot |c + id| \, dk_x \, dk_y \\ &\leq \|a + ib\|_{L^2(\mathbb{R}^2)} \cdot \|c + id\|_{L^2(\mathbb{R}^2)} \\ &= AC \leq 4AC\end{aligned}$$

und daher  $w_0 \in \mathbb{R}$ . Daraus folgt  $z_R \in \mathbb{R}$ . □

Für  $w(z) := 2\sigma_x(z)$  gilt somit  $w(z_0 + z_R) = \sqrt{2}w(z_0)$ . Das wird auch häufig als Definition von  $z_R$  verwendet.

**Korollar 1.1.3.** Für  $E(\cdot, \cdot, z), \widehat{E}(\cdot, \cdot, z) \in H^1(\mathbb{R}^2)$  gilt

$$M_x^2 = \frac{z_{R,00}}{w_0} \arctan\left(\frac{w_0}{z_R}\right),$$

wobei  $z_{R,00} = w_0^2 k/2$  die Rayleighlänge der  $TEM_{00}$ -Mode ist.

*Beweis.* Wir nutzen die Definition der Strahlqualität und Lemma 1.1.2:

$$\begin{aligned} M_x^2 &\stackrel{\text{Definition}}{=} \frac{\pi}{\lambda} w_0 \arctan\left(\lim_{z \rightarrow \infty} \frac{2\sigma_x(z)}{z}\right) \stackrel{\text{Lemma 1.1.2}}{=} \frac{\pi}{\lambda} w_0 \arctan\left(\lim_{z \rightarrow \infty} \frac{w_0 \sqrt{1 + \left(\frac{z-z_0}{z_R}\right)^2}}{z}\right) \\ &= \frac{\pi}{\lambda} w_0 \arctan\left(\lim_{z \rightarrow \infty} w_0 \sqrt{\frac{1}{z^2} + \frac{(1 - \frac{z_0}{z})^2}{z_R^2}}\right) = \frac{\pi}{\lambda} w_0 \arctan\left(\frac{w_0}{z_R}\right) \\ &= \frac{2\pi}{\lambda} \frac{w_0^2}{2w_0} \arctan\left(\frac{w_0}{z_R}\right) = \frac{z_{R,00}}{w_0} \arctan\left(\frac{w_0}{z_R}\right). \end{aligned}$$

□

Insbesondere gilt  $M_x^2 \approx \frac{z_{R,00}}{z_R}$  und somit  $z_R \approx \frac{w_0^2 k}{2M^2}$  für  $w_0 \ll z_R$ . Im folgenden Text wird  $M^2 := M_x^2$  abgekürzt.

Elektromagnetische Wellen  $\mathbf{E}$ , die orthogonal zum Wellenvektor  $\mathbf{k}$  schwingen, nennt man transversale elektromagnetische Wellen (TE-Wellen). Zum Beispiel ist  $\mathbf{E} = (E_x, E_y, 0)$  für  $\mathbf{k} = (0, 0, k_z)$  eine in der  $xy$ -Ebene polarisierte TE-Welle. Je nach Phasen- und Amplitudenverhältnis von  $E_x$  und  $E_y$  spricht man von linearer, elliptischer oder zirkularer Polarisierung (mehr dazu in Kapitel 1.2.1). Besitzt sowohl das elektrische Feld  $\mathbf{E}$  als auch das magnetische Feld  $\mathbf{B}$  in Ausbreitungsrichtung keine Komponente, spricht man von einer TEM-Welle. Diese Definition gab den  $TEM_{mn}$ -Moden ihren Namen.

## 1.1.2 Materie

Im weiteren Verlauf werden Lösungen der Maxwellgleichungen nicht nur im Vakuum bzw. in Luft gesucht, sondern auch in Materie. Die meisten Autoren [HG09, S. 9ff] [Mes09, S. 37ff]

[Rei16, S. 5] gehen vom Ansatz

$$\mathbf{D} = \varepsilon_0 \tilde{\varepsilon}_r \mathbf{E} =: \varepsilon \mathbf{E}, \quad \mathbf{B} = \mu_0 \mu_r \mathbf{H} =: \mu \mathbf{H} \quad (1.9)$$

mit  $\mu_r, \varepsilon_r \in \mathbb{R}$  und  $\tilde{\varepsilon}_r := \varepsilon_r + i \frac{\sigma}{\varepsilon_0 \omega} \in \mathbb{C}$  aus [Mic14, S.23f]. Damit kann man den komplexen Brechungsindex  $N = n + i\kappa := \sqrt{\tilde{\varepsilon}_r \mu_r}$  definieren, mit dessen Hilfe man viele Phänomene aus Experimenten erklären kann. Man kann den Brechungsindex zwar nicht direkt messen, jedoch zum Beispiel die Ausbreitungsgeschwindigkeit<sup>4</sup> des Lichts  $c/n$  oder den Absorptionskoeffizienten  $\kappa\omega/c$  aus Messdaten bestimmen. Der Brechungsindex hängt vom Material, von der Temperatur, der Wellenlänge [Mic14, S. 43ff, S.152ff], der Intensität [Mes09, S. 127ff], der Polarisation und vielen anderen Parametern ab. Aus den Maxwellgleichungen folgt dann für einen stückweise konstanten Brechungsindex

$$\begin{aligned} \Delta \mathbf{E} - \mu \varepsilon \partial_t^2 \mathbf{E} &= \frac{1}{\varepsilon} \nabla \rho + \mu \partial_t \mathbf{j}, \\ \Delta \mathbf{H} - \mu \varepsilon \partial_t^2 \mathbf{H} &= \nabla \times \mathbf{j}, \\ \varepsilon \nabla \cdot \mathbf{E} &= \rho, \\ \nabla \cdot \mathbf{H} &= 0. \end{aligned}$$

Nimmt man an, dass sich das elektrische Feld in einer Faser ohne freie Ladungsträger ( $\rho = 0, \mathbf{j} = \mathbf{0}$ ) ausbreitet, folgt

$$\Delta \mathbf{E} - \mu \varepsilon \partial_t^2 \mathbf{E} = 0 \Leftrightarrow c^2 \Delta \mathbf{E} - n^2 \partial_t^2 \mathbf{E} = 0$$

mit  $n = \sqrt{\varepsilon \mu} \in \mathbb{R}$  und die Dispersionrelation  $n\omega = c|\mathbf{k}|$ . Für monochromatisches Licht muss dementsprechend die Helmholtzgleichung

$$\begin{aligned} c^2 \Delta E + n^2 \omega^2 E &= 0 \\ \Leftrightarrow \Delta E + n^2 k_0^2 E &= 0 \end{aligned} \quad (1.10)$$

für jede Komponente  $E$  von  $\mathbf{E}$  gelöst werden.

---

<sup>4</sup>Eine ebene Welle  $E \sim e^{i(\mathbf{k}\mathbf{x} - \omega t)}$  hat eine fixe Phase für  $\mathbf{k}\mathbf{x} - \omega t = \text{const.} \Rightarrow \mathbf{k} \partial_t \mathbf{x} - \omega = 0 \Rightarrow v_{ph} := |\partial_t \mathbf{x}| = \frac{\omega}{k} = \frac{c}{\sqrt{\varepsilon_r \mu_r}} = \frac{c}{n}$  ist die Phasengeschwindigkeit.

### 1.1.3 Laserschneiden

Beim Laserschneiden betrachten wir hauptsächlich die Interaktion des Laserlichts mit Metall bzw. speziell mit der Metallschmelze. Da Metalle keine starken Bindungselektronen zwischen Atomkern und Valenzelektronen vorweisen, bildet sich ein fast frei bewegliches Elektronengas, das für die hohe elektrische Leitfähigkeit von Metallen verantwortlich ist [SB33]. Dementsprechend gilt  $\mathbf{D} \approx \varepsilon_0 \mathbf{E}$ .

Außerdem liegt die Schmelztemperatur von Stahl bei ca.  $1400^\circ\text{C}$ . Die Curie-Temperatur, ab der ferromagnetische Effekte kaum noch zu beobachten sind, liegt mit  $760^\circ\text{C}$  [Ver] somit deutlich darunter. Folglich treten in der Metallschmelze nur noch paramagnetische Effekte auf, das heißt  $\mathbf{B} \approx \mu_0 \mu_r \mathbf{H}$ . Es gilt sogar  $\mu_r \approx 1$  [LLP84, S. 252ff], weil die betrachteten Laserfrequenzen  $\omega \sim 10^{15} \text{ Hz}$  sehr groß sind. Genaueres zum Spektrum des betrachteten Lasers findet sich in Abschnitt 1.1.3.1.

Nur im Aufschmelzprozess, bevor der Laserschnitt beginnt, sind ferromagnetische Effekte zu beachten. Das macht die entsprechenden Differentialgleichungen komplizierter, dieser Prozess wird in dieser Dissertation jedoch nicht betrachtet. Außerdem wird Plasmabildung nicht betrachtet: Sobald die Luft ionisiert wird, bricht der Laser den Schneidprozess ab.

Um den Laserschnitt durch Strahlformung positiv zu beeinflussen, nutzt man manchmal ausgefallene Intensitätsformen. In dieser Dissertation werde ich mich jedoch hauptsächlich auf rotations- bzw. achsensymmetrische Intensitäten beschränken.

#### 1.1.3.1 Zeitlicher Verlauf

Im folgenden Abschnitt wird der zeitliche Verlauf des elektrischen Feldes eines Festkörperlaser betrachtet. Dazu nutzen wir den Separationsansatz  $\mathbf{E}(\mathbf{x}, t) = \tilde{\mathbf{E}}(\mathbf{x}) \cdot E_2(t)$  mit dem zeitlichen Verlauf  $E_2(t)$ . Diese zeitliche Oszillation ( $\sim 10^{15} \text{ Hz}$ ) des elektrischen Feldes ist schwierig im Experiment zu messen.

Das Spektrum des True-Disc-Lasers von Trumpf weist zwei Peaks mit ähnlicher Amplitude bei fast der gleichen Frequenz auf. Diese Frequenzen können als  $\omega_0 \pm \omega_1$  mit  $\omega_0 \approx 1,9 \cdot 10^{15} \text{ Hz}$  und  $\omega_1 \approx 3,0 \cdot 10^{12} \text{ Hz}$  dargestellt werden. Damit gilt

$$E_2(t) = \exp(-i(\omega_0 + \omega_1)t) + \exp(-i(\omega_0 - \omega_1)t + i\phi_0) = \tilde{A} \exp(-i\omega_0 t) \cos(\omega_1 t + \tilde{\phi}_0) \quad (1.11)$$

mit einem  $\tilde{A} \in \mathbb{C}$  und einem  $\tilde{\phi}_0 \in \mathbb{R}$ . Das entspricht einer Oszillation mit Frequenz  $\omega_0$  und einer Einhüllenden mit Frequenz  $\omega_1$ .

Das Spektrum eines Lasers ist jedoch keine Delta-Distribution, sondern eher eine Gaußkurve mit kleiner Varianz ( $\omega_2 \approx 7,5 \cdot 10^{11} \text{ Hz}$ ). Für

$$A(\omega) = \frac{1}{\sqrt{2\pi\omega_2}} \exp\left(-\frac{(\omega - \omega_0)^2}{2\omega_2^2}\right)$$

und  $E_2(t) = \int_{\mathbb{R}} A(\omega) \exp(-i\omega t) d\omega$  gilt

$$E_2(t) = \exp(-i\omega_0 t) \exp(-\omega_2^2 t^2) \quad (1.12)$$

In Kombination mit den bereits erwähnten zwei Peaks ergibt sich

$$\begin{aligned} A(\omega) &= \frac{1}{2\sqrt{2\pi\omega_2}} \left( \exp\left(-\frac{(\omega - (\omega_0 - \omega_1))^2}{2\omega_2^2}\right) + \exp\left(-\frac{(\omega - (\omega_0 + \omega_1))^2}{2\omega_2^2}\right) \right) \\ \Rightarrow E_2(t) &= \exp(-i\omega_0 t) \exp(-\omega_2^2 t^2) \cos(\omega_1 t). \end{aligned}$$

Für  $\omega_1 \rightarrow 0$  und  $\omega_2 \rightarrow 0$  folgt der monochromatische Fall  $E_2(t) \sim \exp(-i\omega_0 t)$ .

Die schnelle zeitliche Fluktuation hat auch Auswirkungen auf die räumliche Situation: Im Vakuum gilt  $k = \frac{\omega}{c} \approx 6 \cdot 10^6 \text{ m}^{-1}$  und dementsprechend fluktuiert das Feld räumlich auf einer Skala von  $\Delta x \sim k^{-1} \approx 0,2 \mu\text{m}$ . Das wiederum hat zur Folge, dass eine direkte Simulation des Feldes numerisch sehr aufwändig ist und vereinfachte Modelle zur Berechnung gefunden werden müssen. Mehr Informationen dazu sind in Kapitel 2 zu finden.

### 1.1.3.2 Leistungsberechnung

Seien die komplexen Felder  $\mathbf{E}_c(\mathbf{x}, t) = \mathbf{E}(\mathbf{x})e^{i\omega t}$ ,  $\mathbf{H}_c(\mathbf{x}, t) = \mathbf{H}(\mathbf{x})e^{i\omega t}$  für einen monochromatischen Laser mit Frequenz  $\omega = \omega_0$  gegeben. Dann kann man den komplexen Poynting-Vektor  $\mathbf{S} := \mathbf{E} \times \mathbf{H}^*$  alleine aus dem elektrischen Feld berechnen: Es gilt

$$\nabla \times \mathbf{E} - i\omega\mu_0\mathbf{H} = 0 \Leftrightarrow \mathbf{H}^* = \frac{\nabla \times \mathbf{E}^*}{-i\omega\mu_0} \quad (1.13)$$

und somit

$$\mathbf{S} = \frac{\mathbf{E} \times (\nabla \times \mathbf{E}^*)}{-i\omega\mu_0}.$$

Mit dem reellen Poynting-Vektor  $\mathbf{S}_r := \mathbf{E}_r \times \mathbf{H}_r$  und den reellen Feldern  $\mathbf{E}_r := \Re(\mathbf{E}_c)$ ,  $\mathbf{H}_r := \Re(\mathbf{H}_c)$  ist die Intensität auf einer Fläche  $\Omega$  mit Normalenvektor  $\mathbf{n}$  gegeben durch

$$I := \langle \mathbf{S}_r \rangle \cdot \mathbf{n}.$$

Dabei ist  $\langle \mathbf{S}_r \rangle = \frac{1}{2T} \int_{-T}^T \mathbf{S}_r dt$  mit der Periodendauer  $T = \frac{2\pi}{\omega}$  und es gilt

$$\begin{aligned} \mathbf{E}_r &= \frac{1}{2} (\mathbf{E} e^{i\omega t} + \mathbf{E}^* e^{-i\omega t}), \mathbf{H}_r = \frac{1}{2} (\mathbf{H} e^{i\omega t} + \mathbf{H}^* e^{-i\omega t}) \\ \Rightarrow \langle \mathbf{S}_r \rangle &= \langle \mathbf{E}_r \times \mathbf{H}_r \rangle = \frac{1}{4} (\langle 1 \rangle (\mathbf{E} \times \mathbf{H}^* + \mathbf{E}^* \times \mathbf{H}) + \langle e^{2i\omega t} \rangle (\mathbf{E} \times \mathbf{H}) + \langle e^{-2i\omega t} \rangle (\mathbf{E}^* \times \mathbf{H}^*)) \\ &= \frac{1}{4} (\mathbf{E} \times \mathbf{H}^* + \mathbf{E}^* \times \mathbf{H}) = \frac{1}{2} \Re(\mathbf{E} \times \mathbf{H}^*) = \Re(\mathbf{S}). \end{aligned}$$

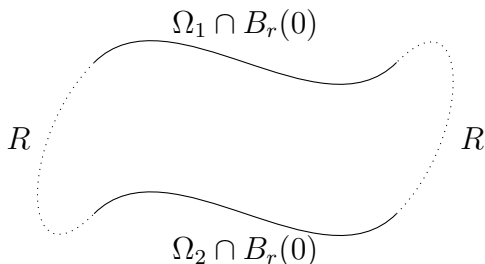
Damit lässt sich die Leistung eines Lasers, der sich zum Beispiel in  $z$ -Richtung ausbreitet, berechnen durch

$$P := \int_{\Omega} \langle \mathbf{S}_r \rangle \mathbf{n} dA = \int_{\Omega} \langle \mathbf{S}_r \rangle \mathbf{n} dA = \int_{\Omega} I dA$$

mit  $\Omega = \{(x, y, 0) \in \mathbb{R}^3 \mid x, y \in \mathbb{R}\}$ .

**Lemma 1.1.4.** *Für eine Lösung der Maxwellgleichungen gilt: Die Leistung  $P$  ist unabhängig von  $\Omega$ , sofern  $V\Omega := \{(x, y) \in \mathbb{R}^2 \mid \exists z : (x, y, z) \in \Omega\} = \mathbb{R}^2$  und  $\Omega \in C^1$  gilt.*

*Beweis.* Gegeben seien  $\Omega_1 \neq \Omega_2 \subset \mathbb{R}^3$  mit  $V\Omega_i = \mathbb{R}^2$ , zu zeigen ist  $\int_{\Omega_1} \langle \mathbf{S}_r \rangle \mathbf{n} dA = \int_{\Omega_2} \langle \mathbf{S}_r \rangle \mathbf{n} dA$ . Um technische Details zu vermeiden, wird in diesem Beweis  $\Omega_1 \cap \Omega_2 = \emptyset$  angenommen. Sei  $M_r := (\Omega_1 \cap B_r(0)) \cup (\Omega_2 \cap B_r(0)) \cup R \in C^1$ .



Skizze:

Dann gilt  $|\int_R \langle \mathbf{S}_r \rangle \mathbf{n} dA| \leq C 2\pi r \sup_{\|x\|=r} \|\langle \mathbf{S}_r \rangle\|_{\mathbb{R}^3} \rightarrow 0$  für  $r \rightarrow \infty$  wegen  $\|\mathbf{S}\| \sim \|\mathbf{E}\|^2 = \mathcal{O}(r^{-2})$  [CK12, S. 24]. Daraus folgt  $\int_{M_r} \langle \mathbf{S}_r \rangle \mathbf{n} dA \rightarrow \int_{\Omega_1} \langle \mathbf{S}_r \rangle \mathbf{n} dA - \int_{\Omega_2} \langle \mathbf{S}_r \rangle \mathbf{n} dA$  für  $r \rightarrow \infty$ . Um  $\int_{M_r} \langle \mathbf{S}_r \rangle \mathbf{n} dA = 0$  zu zeigen und damit den Beweis abzuschließen, nutzen wir  $\nabla \cdot (\mathbf{E} \times \mathbf{H}) = -\frac{1}{2} \partial_t (\mathbf{D}\mathbf{E} + \mathbf{H}\mathbf{B})$  [NM92, S. 25]. Daraus folgt mit dem Gaußschen



Integralsatz<sup>5</sup> und dem Satz von Fubini-Tonelli<sup>6</sup>

$$\begin{aligned} \int_{M_r} \mathbf{S}_r \mathbf{n} \, dA &= \int_N \nabla \cdot \mathbf{S}_r \, dV = -\frac{1}{2} \int_N \partial_t (\varepsilon_0 \mathbf{E}^2 + \mu_0 \mathbf{H}^2) \, dV \\ &\Rightarrow \int_{\Omega_1} \langle \mathbf{S}_r \rangle \mathbf{n} \, dA - \int_{\Omega_2} \langle \mathbf{S}_r \rangle \mathbf{n} \, dA \stackrel{r \rightarrow \infty}{\leftarrow} \int_{M_r} \langle \mathbf{S}_r \rangle \mathbf{n} \, dA = 0 \end{aligned}$$

mit der konvexen Hülle  $N := \text{conv}(M_r) \Rightarrow M_r = \partial N$  und  $\langle \partial_t \mathbf{E}^2 \rangle = 0 = \langle \partial_t \mathbf{H}^2 \rangle$ .  $\square$

Für eine ebene Welle im Vakuum lassen sich alle genannten Größen einfach und elegant darstellen<sup>7</sup>

$$\begin{aligned} \mathbf{E} &= \mathbf{E}_0 e^{i(\mathbf{k}\mathbf{x} - \omega t)} \\ \Rightarrow \mathbf{S} &= \frac{1}{\omega \mu_0} \|\mathbf{E}_0\|_{\mathbb{C}^3}^2 \mathbf{k} \\ \Rightarrow I &= \frac{\varepsilon_0 c}{2} \|\mathbf{E}_0\|_{\mathbb{C}^3}^2. \end{aligned} \tag{1.14}$$

Für ein allgemeines Feld in einem homogenen Medium gilt [LL85, S. 139, 341-345, 356]  $I \sim \|\mathbf{E}\|_{\mathbb{C}^3}^2$  und dementsprechend  $P \sim \|\mathbf{E}\|_{L^2(\mathbb{R}^2, \mathbb{C}^3)}^2$ . Überlagert man zwei Felder  $\mathbf{E} = \mathbf{E}_1 + \mathbf{E}_2$ , ergibt sich  $I = \frac{\varepsilon_0 c}{2} (\|\mathbf{E}_1\|_{\mathbb{C}^3}^2 + \|\mathbf{E}_2\|_{\mathbb{C}^3}^2 + 2\Re(\mathbf{E}_1 \mathbf{E}_2^*)) = I_1 + I_2 + I_{\text{Interferenz}}$ . Da die Hermite-Gauß-Moden, die in Kapitel 1.1.1 zur Beschreibung der TEM-Moden benutzt wurden, orthogonal sind, gilt für die Überlagerung von zwei verschiedenen TEM-Moden  $P = P_1 + P_2 = \frac{\varepsilon_0 c}{2} (\|\mathbf{E}_1\|_{L^2(\mathbb{R}^2, \mathbb{C}^3)}^2 + \|\mathbf{E}_2\|_{L^2(\mathbb{R}^2, \mathbb{C}^3)}^2)$  [Flo22]. Da der Laser immer  $P < \infty$  erfüllt, werden in dieser Dissertation nur  $\mathbf{E} \in L^2(\mathbb{R}^2, \mathbb{C}^3)$  bzw.  $I \in L^2(\mathbb{R}^2, \mathbb{R})$  betrachtet.

### 1.1.3.3 Kohärenzgrad

Überlagert man mehrere elektrischen Felder und berechnet die resultierende Intensität

$$I_{\text{koh}} = \frac{\varepsilon_0 n c}{2} \left| \sum_{n=1}^N E_n \right|^2, \tag{1.15}$$

spricht man von einer kohärenten Überlagerung. Im Gegensatz dazu spricht man bei der Überlagerung der Intensitäten

$$I_{\text{ink}} = \frac{\varepsilon_0 n c}{2} \sum_{n=1}^N |E_n|^2 \tag{1.16}$$

<sup>5</sup>Siehe Anhang A.1.6 auf Seite 114

<sup>6</sup>Siehe Anhang A.1.7 auf Seite 115

<sup>7</sup>Rechnung siehe Anhang A.2.3 auf Seite 121

von einer inkohärenten Überlagerung. Ein Mittelweg zwischen diesen beiden Fällen ist die partielle Kohärenz, dabei wird die Intensität durch

$$I_{par} = I_{ink} + \varepsilon_0 n c \sum_{\substack{n,m=1 \\ n \neq m}}^N \Re(\gamma_{nm} E_n E_m^*) \quad (1.17)$$

berechnet mit einem Kohärenzgrad  $\gamma_{nm} \in \mathbb{C}$ ,  $0 \leq |\gamma_{nm}| \leq 1$ . Für  $\gamma_{nm} = 1$  ergibt sich die kohärente Situation, für  $\gamma_{nm} = 0$  die inkohärente und ansonsten beliebige Fälle dazwischen.

Diese unterschiedlichen Vorgehensweisen haben verschiedene Vor- und Nachteile. So werden bei der inkohärenten Überlagerung zum Beispiel Interferenzeffekte vernachlässigt. Die partiell kohärente Überlagerung ist der komplizierteste Fall (da er die meisten Freiheitsgrade hat), beinhaltet aber die meisten Effekte. Dieser Fall dauert am längsten zu simulieren, die kohärente und die inkohärente Rechnungen sind Spezialfälle von (1.17). Im folgenden Abschnitt wird dargelegt, wie man mit einer wellenoptischen Simulation alle drei Fälle berechnen kann.

Die wellenoptische Simulation ist optimal für die kohärente Berechnung der Intensität: Berechnet man das elektrische Feld durch ein Anfangswertproblem wie in (1.3), kann man die Anfangswerte für jedes Einzelfeld aufsummieren, das Gesamtfeld für die Anfangsbedingung  $E_0 = E_{0,1} + \dots + E_{0,N}$  berechnen und danach die Intensität nach (1.15) bilden. Man benötigt also nur eine wellenoptische Simulation für beliebig viele Felder, die kohärent überlagert werden. Der Rechenaufwand ist  $\mathcal{O}(1)$ .

Für die inkohärente Überlagerung müssen  $N$  wellenoptische Simulationen gemacht werden, um  $E_1, \dots, E_N$  zu berechnen und dann wird die Intensität nach (1.16) berechnet. Der Rechenaufwand ist  $\mathcal{O}(N)$ .

Schlussendlich kann auch der partiell kohärente Fall mit wellenoptischen Simulationen berechnet werden. Dazu werden wie beim inkohärenten Fall die Felder einzeln durch  $N$  wellenoptische Simulationen berechnet und dann in (1.17) eingesetzt. Zusätzlich zu (1.16) muss eine weitere Summe mit  $N(N - 1)$  Summanden berechnet werden. Nimmt man jedoch an, dass die Summation der berechneten Felder deutlich weniger Zeit in Anspruch nimmt als die Simulation der Felder, ist der Rechenaufwand wieder  $\mathcal{O}(N)$ .

In Kapitel 1.1 wurden die Maxwellgleichungen, die Helmholtzgleichung und die Schrödingergleichung dargelegt. Außerdem wurde herausgearbeitet, welche Effekte für das Laserschneiden von Relevanz sind. Dabei lag der Fokus hauptsächlich auf der Propagation des elektrischen

Feldes in  $z$ -Richtung. Trifft das Feld jedoch auf ein Hindernis, kommt es zu Abschattungs- und Beugungseffekten. Die Interaktion mit dem metallischen Werkstück soll im folgenden Abschnitt genauer untersucht werden.

## 1.2 Interaktion mit dem Werkstück

Mithilfe der Wellenoptik kann beschrieben werden, wie sich das elektrische Feld ausbreitet. Trifft es auf das Werkstück, kommt es zur Absorption, Reflexion und Transmission der elektromagnetischen Welle.

Am Übergang zwischen Luft und Werkstück ist die Tangentialkomponente von  $\mathbf{E}$  und  $\mathbf{H}$  stetig<sup>8</sup>. Im Fall einer ebenen Welle lässt sich das elektrische Feld im Werkstück als

$$\mathbf{E}(\mathbf{x}, t) = \mathbf{E}_0 \exp(i(\mathbf{k}\mathbf{x} - \omega t)) = \mathbf{E}_0 \exp\left(i\omega \left(\frac{N}{c}\mathbf{s}\mathbf{x} - t\right)\right) \quad (1.18)$$

schreiben. Dabei ist  $\mathbf{s} := \mathbf{k}/\|\mathbf{k}\|_{\mathbb{R}^3}$  der Einheitsvektor in Ausbreitungsrichtung und  $N = n + i\kappa$  der komplexe Brechungsindex des Materials. Für  $\mathbf{s} = (0, 0, 1)$  und  $\mathbf{x} = (x, y, z)$  lässt sich die Intensität des elektrischen Feldes als

$$I(\mathbf{x}) = \frac{c\varepsilon_0}{2\mu_r} \|\mathbf{E}_0\|_{\mathbb{C}^3}^2 \exp\left(-2\omega \frac{n_2}{c} z\right) =: I_0 \exp(-\alpha z). \quad (1.19)$$

berechnen<sup>9</sup>. Dieser Zusammenhang ist als Beersches Gesetz [HG09, S. 39] bekannt. Es hat zur Folge, dass die Intensität innerhalb einiger Nanometer auf einen Bruchteil von  $I_0$  abfällt. Dementsprechend wird die meiste Intensität direkt an der Oberfläche absorbiert, man kann die absorbierte Intensität mit einer Oberflächenquelle modellieren.

Beim Laserschneiden wird der Laserstrahl über die Oberfläche bewegt, im einfachsten Fall mit konstanter Geschwindigkeit in eine konstante Richtung. Im Schnittspalt bildet sich dementsprechend eine Geometrie aus, die sich wie in Abbildung 1.3 durch einen gekippten Zylinder modellieren lässt.

<sup>8</sup>Eine Herleitung dieser Aussage aus den Maxwellgleichungen (1.1) ist im Anhang A.2.4 auf Seite 122 zu finden

<sup>9</sup>Zum Zusammenhang zwischen elektrischem Feld und Intensität findet sich im Anhang A.2.3 auf Seite 121 eine Rechnung

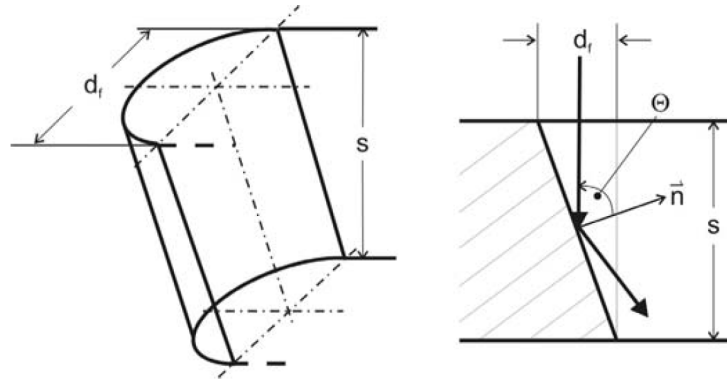


Abbildung 1.3: Zylindermodell, Quelle: [HG09, S. 133]

### 1.2.1 Fresnelsche Formeln

Mithilfe der Fresnelschen Gleichungen und dem Brechungsgesetz von Snellius können der Reflexions- bzw. Absorptionsgrad für  $s$ - und  $p$ -polarisiertes Licht hergeleitet werden. Dabei ist die Polarisierung die Richtung des elektrischen Feldvektors  $\mathbf{E}$ , sie wird auch Polarisationsrichtung genannt. Sei  $V = \text{span}\{\mathbf{n}, \mathbf{k}\}$  mit dem Normalenvektor der Materialoberfläche und dem  $k$ -Vektor des elektrischen Feldes, dann ist der  $p$ -polarisierte Teil des Feldes parallel zu  $V$  und der  $s$ -polarisierte Teil des elektrischen Feldes senkrecht dazu. Für diese beiden Anteile sind

$$r_s = \frac{m \cos \Theta - \sqrt{N^2 - m^2 \sin^2 \Theta}}{m \cos \Theta + \sqrt{N^2 - m^2 \sin^2 \Theta}}, \quad (1.20)$$

$$r_p = \frac{N^2 \cos \Theta - m \sqrt{N^2 - m^2 \sin^2 \Theta}}{N^2 \cos \Theta + m \sqrt{N^2 - m^2 \sin^2 \Theta}} \quad (1.21)$$

die Reflexionskoeffizienten<sup>10</sup>. Dabei ist  $N \in \mathbb{C}$  der Brechungsindex des Materials,  $m \approx 1$  der Brechungsindex der Luft und  $\Theta$  der Einfallswinkel (zu sehen in Abbildung 1.3). Die Intensitätsreflektivität ist dementsprechend durch  $R_s := |r_s|^2$  bzw.  $R_p := |r_p|^2$  gegeben [Mic14, S. 33]. Für zufällig polarisiertes Licht kann man den Reflexionsgrad durch  $R_r = \frac{R_s + R_p}{2}$  berechnen. Analoge Formeln kann man für die Absorptionsgrade  $a_s, a_p, A_s, A_p$  herleiten.

Sei  $z$  die Koordinate normal zur Oberfläche,  $I_0$  die Intensität vor dem Eindringen in das Material und  $R(\Theta) \in \{R_p, R_s, R_r\}$ . Dann lässt sich die absorbierte Leistungsdichte berechnen durch [AAK<sup>+</sup>17]

$$Q_{abs} = \alpha I_0 (1 - R(\Theta)) \cos(\Theta) \exp(-\alpha z). \quad (1.22)$$

<sup>10</sup>Eine Herleitung dieser Formeln aus (1.1) und (A.9) findet sich im Anhang A.2.5 auf Seite 123

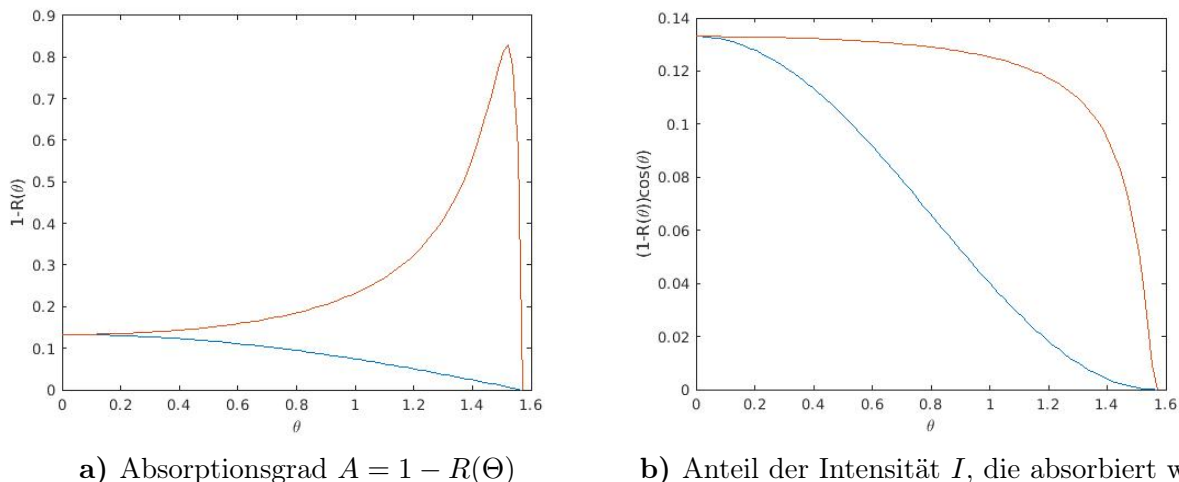


Abbildung 1.4: Winkelabhängigkeit der Absorption für  $s$ - und  $p$ -Polarisation bei  $\lambda = 10 \mu m$

Dabei wurde der Transmissionsgrad  $T = 0$  und dementsprechend  $A + R = 1$  angenommen. Die Annahme, dass keine elektromagnetische Welle transmittiert wird, ist dadurch gerechtfertigt, dass  $\exp(-\alpha z)$  schnell abfällt. Statt der Abfallrate  $\alpha$  kann man äquivalent dazu auch ein Eindringtiefe  $\delta$  definieren. Diese sinkt mit steigender Frequenz  $\omega$  [TMT08], was man im Fall einer ebene Welle in (1.19) leicht durch  $\delta = \frac{c}{2\omega\kappa c}$  sehen kann.

Um den Laserschneidprozess zu beschleunigen, muss man unter anderem durch einen geeigneten Laserstrahl die absorbierte Leistung maximieren: Eine erhöhte Absorption bedeutet unter anderem einen höheren Vorschub, das heißt eine höhere Produktivität oder eine bessere Schnittqualität. Dies kann man zum Beispiel durch eine geeignete Polarisationsanpassung, Strahlformung oder eine veränderte Wellenlänge erreichen.

In den letzten Jahren hat sich bei Trumpf ein Wechsel vom  $CO_2$ -Laser hin zum Festkörperlaser vollzogen. Vom  $CO_2$ -Laser zum Festkörperlaser hat sich die Wellenlänge  $\lambda$  geändert, damit auch die Wellenzahl  $k = \frac{2\pi}{\lambda}$ , dadurch die Frequenz  $\omega$ , dadurch der Brechungsindex  $n = n(\omega)$  und damit schlussendlich der Absorptionsgrad  $A = A(n)$ . Den im Vergleich zu Abbildung 1.4 ( $CO_2$ -Laser) erhöhten Absorptionsgrad sieht man in Abbildung 1.5. Neben der Wellenlänge kann wie bereits erwähnt auch die Polarisation den Absorptionsgrad positiv beeinflussen: Da

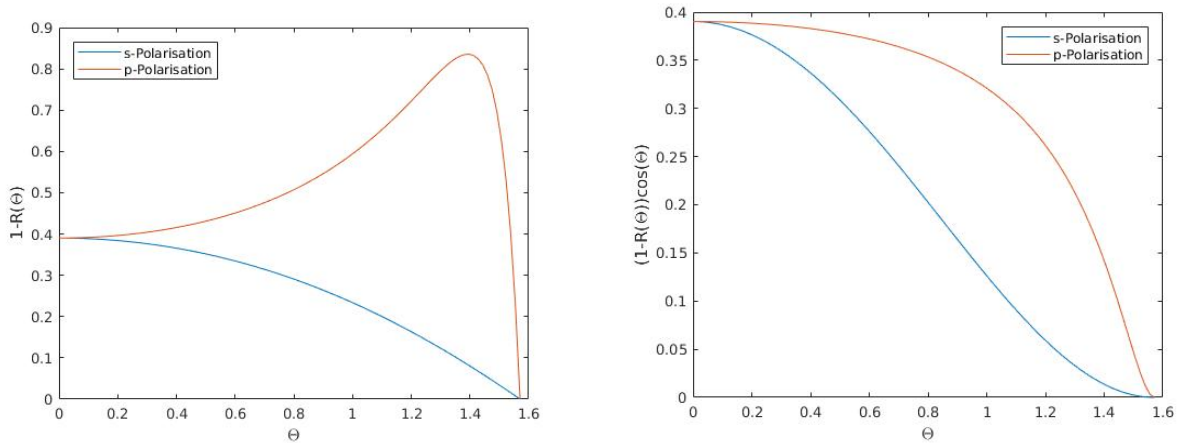
$$\lim_{\theta \rightarrow \frac{\pi}{2}} \frac{A_s}{A_p} = 0$$

gilt, folgt

$$\begin{aligned} \lim_{\theta \rightarrow \frac{\pi}{2}} \frac{A_p}{A_r} &= \lim_{\theta \rightarrow \frac{\pi}{2}} \frac{A_p}{\frac{A_p + A_s}{2}} \\ &= \lim_{\theta \rightarrow \frac{\pi}{2}} \frac{2}{1 + \frac{A_s}{A_p}} \\ &= 2 \end{aligned}$$

und sogar  $1 \leq \frac{A_p}{A_r} \leq 2$  für alle Winkel  $0 \leq \theta \leq \frac{\pi}{2}$ . Somit kann man mit einer gezielten Polarisationsanpassung bis zu doppelt so viel Leistung absorbieren im Vergleich zu einem zufällig polarisierten Strahl.

Da ab jetzt die Unterscheidung zwischen reellem Brechungsindex  $n$  und komplexem Brechungsindex  $N$  nicht mehr relevant ist, wird im folgenden Text  $n$  für den komplexen Brechungsindex genutzt.



a) Absorptionsgrad  $A = 1 - R(\Theta)$

b) Anteil der Intensität  $I$ , die absorbiert wird

Abbildung 1.5: Winkelabhängigkeit der Absorption für  $s$ - und  $p$ -Polarisation bei  $\lambda = 1 \mu\text{m}$

## 1.2.2 Leontovitch-Randbedingungen

Wie in Kapitel 1.1.1 beschrieben wurde, erfüllt das elektrische Feld im Schlitzspalt näherungsweise die Schrödingergleichung. Zusammen mit geeigneten Randbedingungen ergibt dies auf einem beschränkten Gebiet  $\Omega \subset \mathbb{R}^3$  ein wohlgestelltes Anfangswertproblem. Zum Beispiel in [Tie11, S. 10ff] werden dazu die Leontovich-Randbedingungen für das Laserschweißen aus den Fresnelschen Formeln hergeleitet, die Leontovich bereits 1944 in Verbindung mit Radio-

wellen veröffentlichte [Leo44]. Das elektrische Feld beim Laserschneiden wird hierbei in einem lokalen Koordinatensystem  $\{\mathbf{s}, \mathbf{p}_1, \mathbf{p}_2\}$  ausgedrückt:

$$\begin{aligned} \mathbf{E} &= E_s \mathbf{s} + E_{p_1} \mathbf{p}_1 + E_{p_2} \mathbf{p}_2 \\ \Rightarrow \partial_\nu E_s + ikn E_s &= 0, \quad \partial_\nu E_{p_1} + \frac{ik}{n} E_{p_1} = 0, \quad \partial_\nu E_{p_2} + \frac{ik}{n} E_{p_2} = 0 \end{aligned} \quad (1.23)$$

mit der Normalenableitung  $\partial_\nu = \mathbf{n} \cdot \nabla$ , der Normalenvektor  $\mathbf{n}$  zeigt dabei vom Metall in die Luft. Dabei ist  $\mathbf{s}$  parallel zu  $\mathbf{n}$  und  $\mathbf{p}_1, \mathbf{p}_2$  bilden zusammen mit  $\mathbf{s}$  eine Orthogonalbasis von  $\mathbb{R}^3$ . Die Robin-Randbedingungen (1.23) mit komplexen Koeffizienten wurden erst vor Kurzem auf spektrale Eigenschaften untersucht [Lan21]. Diese Randbedingungen kann man einfach mit dem Reflexionsgrad in Verbindung setzen: Wie in [BKL22] Theorem 2.1 beschrieben wird, ist dabei der Koeffizient  $\alpha \in \{ikn, \frac{ik}{n}\}$  ausschlaggebend. Je größer  $|\alpha|$  ist, desto mehr wird reflektiert. Das steht im Einklang mit den Fresnelschen Formeln: Für  $p$ -Polarisation wird weniger reflektiert und mehr absorbiert als bei  $s$ -Polarisation. Die Extremfälle 100% Absorption und 100% Reflexion entsprechen dabei den Neumann- bzw. den Dirichlet-Randbedingungen für das elektrische Feld.

**Bemerkung 1.2.1.** *In dieser Dissertation werden ausreichend glatte Gebiete  $\Omega$  betrachtet, sodass die Normalenableitungen sinnvoll definiert werden. Zum Beispiel ist dazu bereits ein Lipschitz-Rand ausreichend.*

**Bemerkung 1.2.2.** *Die Leontovitch-Randbedingungen werden auch Impedanz-Randbedingungen genannt.*

## 1.3 Lösungstheorie partieller Differentialgleichungen

In diesem Kapitel sollen die Helmholtzgleichung und die Schrödingergleichung genauer beleuchtet werden. Es werden grundlegende Eigenschaften der partiellen Differentialgleichungen und Lösungsformeln dargelegt. Sei dazu  $H^s(\mathbb{R}^n)$  der Sobolevraum wie er im Anhang A.1.4 auf Seite 114 definiert wird.

### 1.3.1 Helmholtzgleichung

Zuerst wird die Helmholtzgleichung  $(\Delta + k^2)E(\mathbf{x}) = 0$  mit einer Funktion  $E \in C^2(\mathbb{R}^3)$ ,  $\mathbf{x} \in \mathbb{R}^3$  untersucht. Für eine Lösung  $u \in C^2(\mathbb{R}^3)$  der Helmholtzgleichung  $\Delta u + k^2 u = 0$  gilt, dass  $u$  analytisch ist [KH15, S. 102].

Klassischerweise wird die Helmholtzgleichung als Randwertproblem behandelt. Mit der dafür passenden Theorie kann man beweisen, dass die Helmholtzgleichung mit passenden Randbedingungen [KH15, S. 91ff] eine eindeutige Lösung hat [KH15, S. 121ff]. Beispielsweise kann man das Feld dazu in einen einfallenden Teil  $u_{inc}$  und einen reflektierten Teil  $u_s$  unterteilen:

$$u = u_{inc} + u_s$$

Dabei löst  $u_{inc}$  die Helmholtzgleichung ohne Material (Freiraumpropagation) und  $u_s$  (wird gesucht) interagiert mit dem Material [KH15, S. 95ff]. Dann gilt: Für ein beschränktes Gebiet  $D$  und gegebenes  $u_{inc}$  mit  $\Delta u_{inc} + k^2 u_{inc} = 0$  gibt es genau ein  $u \in C^2(\mathbb{R}^3 \setminus \overline{D}) \cap C^1(\mathbb{R}^3 \setminus D)$  mit

$$\begin{aligned} \Delta u + k^2 u &= 0 \text{ in } \mathbb{R}^3 \setminus \overline{D} \\ \partial_\nu u &= 0 \text{ auf } \partial D \\ \partial_r u_s(\mathbf{x}) - i k u_s(\mathbf{x}) &= \mathcal{O}\left(\frac{1}{r^2}\right) \end{aligned}$$

mit der Normalenableitung  $\partial_\nu$  und  $r = \|\mathbf{x}\|_{\mathbb{R}^3}$  [KH15, S. 131].

Man kann die Lösung der Helmholtzgleichung auch durch Einfach- bzw. Doppelschichtpotentiale darstellen: Sowohl das Einfachschichtpotential [AS07, S. 49]

$$u(\mathbf{x}) := (Vw)(\mathbf{x}) := \int_{\partial D} w(\mathbf{y}) \Phi(\mathbf{x}, \mathbf{y}) \, dA(\mathbf{y})$$

als auch das Doppelschichtpotential [AS07, S. 50]

$$u(\mathbf{x}) := (Ww)(\mathbf{x}) := \int_{\partial D} w(\mathbf{y}) \partial_\nu \Phi(\mathbf{x}, \mathbf{y}) \, dA(\mathbf{y})$$

sind eine Lösung der Helmholtzgleichung. Dabei ist  $\partial_\nu$  die Normalenableitung,

$$\Phi(x, y) = \frac{e^{ik\|\mathbf{x}-\mathbf{y}\|_{\mathbb{R}^3}}}{4\pi\|\mathbf{x}-\mathbf{y}\|_{\mathbb{R}^3}}$$

die Fundamentallösung der Helmholtzgleichung und  $w$  eine noch unbekannt Funktion. Diese lässt sich durch den kombinierten Ansatz

$$u := (W - i\eta V)w$$



mit einem Parameter  $0 \neq \eta \in \mathbb{C}$  eindeutig bestimmen [AS07, S. 50]: Damit  $u$  die Randbedingungen erfüllt, muss  $w$  die Operatorgleichung

$$\left(\frac{1}{2} + W - i\eta V\right) w = a$$

erfüllen, das ist immer eindeutig möglich. Dabei ist  $a$  eine Funktion, die aus  $u_{inc}$  und den Randbedingungen berechnet werden kann [KH15, S. 157].

Man erhält eine Lösung der monochromatischen Maxwellgleichungen durch [KH15, S. 75ff]

$$\begin{aligned} \mathbf{E} &= \nabla \times (\mathbf{x} \cdot u(\mathbf{x})) \\ \mathbf{H} &= \frac{\nabla \times \mathbf{E}(\mathbf{x})}{i\omega\mu}. \end{aligned}$$

Im folgenden Text wird die Helmholtzgleichung als Anfangswertproblem in  $\mathbb{R}^3$  zu den Anfangswerten  $E|_{z=0} = E_0, \partial_z E|_{z=0} = E_1 \in L^2(\mathbb{R}^2)$  aufgefasst:

$$\begin{aligned} \partial_z^2 E &= -(k^2 + \partial_x^2 + \partial_y^2)E & (1.24) \\ \Leftrightarrow \partial_z^2 \widehat{E} &= -(k^2 - k_x^2 - k_y^2)\widehat{E} \end{aligned}$$

$$\begin{aligned} \Leftrightarrow \widehat{E} &= \widehat{E}_+ e^{ik_z z} + \widehat{E}_- e^{-ik_z z} \\ \Leftrightarrow E(x, y, z) &= \mathcal{F}^{-1} \left[ \widehat{E}_+ e^{ik_z z} + \widehat{E}_- e^{-ik_z z} \right] (x, y) & (1.25) \end{aligned}$$

mit den Funktionen

$$\begin{aligned} \widehat{E}_+ &= \frac{1}{2} \left( \widehat{E}_0 + \frac{\widehat{E}_1}{ik_z} \right), \\ \widehat{E}_- &= \frac{1}{2} \left( \widehat{E}_0 - \frac{\widehat{E}_1}{ik_z} \right), \\ k_z &= \sqrt{k^2 - k_x^2 - k_y^2}. \end{aligned}$$

Da die Helmholtzgleichung ein elliptisches System ist, ist das Evolutionssystem (1.24) in  $z$  im Allgemeinen ein schlecht gestelltes Anfangswertproblem.

Für Anfangsbedingungen  $E_0, E_1 \in L^2(\mathbb{R}^2)$ , für die (1.25) wohldefiniert ist, bleibt der Fourier-

support erhalten:

$$\begin{aligned}
\widehat{E} &= \widehat{E}_+ e^{ik_z z} + \widehat{E}_- e^{-ik_z z} \\
&= \frac{1}{2} \left( \widehat{E}_0 + \frac{\widehat{E}_1}{ik_z} \right) e^{ik_z z} + \frac{1}{2} \left( \widehat{E}_0 - \frac{\widehat{E}_1}{ik_z} \right) e^{-ik_z z} \\
&= \widehat{E}_0 \frac{e^{ik_z z} + e^{-ik_z z}}{2} + \frac{\widehat{E}_1}{k_z} \frac{e^{ik_z z} - e^{-ik_z z}}{2i} \\
&= \widehat{E}_0 \cos(k_z z) + \widehat{E}_1 \frac{\sin(k_z z)}{k_z} \\
\Rightarrow \text{supp}(\widehat{E}) &\subset \text{supp}(\widehat{E}_0) \cup \text{supp}(\widehat{E}_1).
\end{aligned}$$

Probleme, die die Lösungsformel (1.25) mit sich bringen: Für  $E_0, E_1 \in L^2(\mathbb{R}^2)$  gilt im Allgemeinen  $\widehat{E}_+, \widehat{E}_- \notin L^2(\mathbb{R}^2)$  wegen der zusätzlichen Singularität in  $k_x^2 + k_y^2 = k^2$ . Außerdem gilt  $ik_z \in \mathbb{R}$  für  $k_x^2 + k_y^2 > k^2$  und dann gilt  $-ik_z > 0$ . Eine kleine Störung in den Anfangsbedingungen steigt somit im Allgemeinen exponentiell an und sorgt damit nach kurzer Propagationsdistanz für große Fehler in der Lösungsformel:

$$\forall \varepsilon, z > 0 \exists \widehat{E}_{1+}, \widehat{E}_{1-} \exists \widehat{E}_{2+}, \widehat{E}_{2-} : \|E_1(\cdot, \cdot, 0) - E_2(\cdot, \cdot, 0)\|_{L^2(\mathbb{R}^2)} < \varepsilon, \|E_1(\cdot, \cdot, z) - E_2(\cdot, \cdot, z)\|_{L^2(\mathbb{R}^2)} > \varepsilon^{-1}$$

Das Anfangswertproblem ist somit schlecht gestellt. Es gilt

$$\|E(\cdot, \cdot, z)\|_{L^2(\mathbb{R}^2)} \begin{cases} \leq \|E(\cdot, \cdot, 0)\|_{L^2(\mathbb{R}^2)}, & E_- = 0, z \geq 0 \\ \geq \|E(\cdot, \cdot, 0)\|_{L^2(\mathbb{R}^2)}, & E_+ = 0, z \geq 0 \\ = \|E(\cdot, \cdot, 0)\|_{L^2(\mathbb{R}^2)}, & E_{\mp} = 0, \text{supp}(E_{\pm}) \subseteq B_k(\mathbf{0}) \end{cases}$$

für die Lösung

$$E(x, y, z) = \frac{1}{2\pi} \int_{\mathbb{R}^2} \widehat{E}_+(k_x, k_y) e^{i(k_x x + k_y y + \sqrt{k^2 - k_x^2 - k_y^2} z)} + \widehat{E}_-(k_x, k_y) e^{i(k_x x + k_y y - \sqrt{k^2 - k_x^2 - k_y^2} z)} dk_x dk_y$$

der Helmholtzgleichung. Betrachtet man (1.25) mit  $\widehat{E}_- = 0$  und nutzt die Taylorapproximation  $k_z \approx k - \frac{k_x^2 + k_y^2}{2k}$ , ergibt sich

$$E(x, y, z) \approx e^{ikz} \mathcal{F}^{-1} \left[ \widehat{E}_+(k_x, k_y) \exp \left( -i \frac{k_x^2 + k_y^2}{2k} z \right) \right] (x, y).$$

Dabei löst  $\tilde{E} := \mathcal{F}^{-1} \left[ \hat{E}_+ \exp \left( -i \frac{k_x^2 + k_y^2}{2k} z \right) \right]$  die Schrödingergleichung

$$-2ik \partial_z \tilde{E} = (\partial_x^2 + \partial_y^2) \tilde{E}. \quad (1.26)$$

Das heißt

$$\begin{array}{ccc} \Delta E + k^2 E = 0 & \xleftrightarrow{\partial_z^2 \tilde{E} \approx 0} & -2ik \partial_z \tilde{E} = (\partial_x^2 + \partial_y^2) \tilde{E} \\ \hat{E}_z = 0 & \Leftrightarrow & \Leftrightarrow \\ E = \mathcal{F}^{-1} [\hat{E}_+ e^{ik_z z}] & \xleftrightarrow{k_z \approx k - \frac{k_x^2 + k_y^2}{2k}} & \tilde{E} = \mathcal{F}^{-1} \left[ \hat{E}_+ e^{-i \frac{k_x^2 + k_y^2}{2k} z} \right] \end{array}$$

Dieses Zusammenspiel zwischen Helmholtz- und Schrödingergleichung ist in Kapitel 3.3 genauer beschrieben.

### 1.3.2 Schrödingergleichung

Die Schrödingergleichung lautet (in skalierten Variablen, damit alle Konstanten gleich eins sind)

$$\partial_t u(\mathbf{x}, t) = i \Delta u(\mathbf{x}, t) \quad (1.27)$$

mit der Evolutionsvariable  $t \in \mathbb{R}$ , den Ortsvariablen  $\mathbf{x} \in \mathbb{R}^n$  und  $u \in C^1(\mathbb{R}, C^2(\mathbb{R}^n))$ . In (1.26) erfüllte  $t = z$  die Rolle der Evolutionsvariablen und  $\mathbf{x} = (x, y)$  waren die Ortsvariablen. Man weiß über diese Gleichung, dass eine eindeutige Lösung  $u \in C^0(\mathbb{R}, L^2(\mathbb{R}^n))$  für gegebene Anfangsbedingung  $u(\cdot, t) \in L^2(\mathbb{R}^2)$  existiert. Diese lautet

$$u(\cdot, t) = \mathcal{F}^{-1} \left[ \hat{u}(\cdot, 0) e^{-i k^2 t} \right] \quad (1.28)$$

und erfüllt folgende Eigenschaften

$$\begin{aligned} \|u(\cdot, t)\|_{H^s(\mathbb{R}^n)} &= \|u(\cdot, 0)\|_{H^s(\mathbb{R}^n)} \quad \forall s \in \{0, 1, 2\} \\ \|u(\cdot, t)\|_{L^p(\mathbb{R}^n)} &= \|u(\cdot, 0)\|_{L^p(\mathbb{R}^n)} \quad \forall p \in [1, \infty[. \end{aligned} \quad (1.29)$$

Die Eindeutigkeit der Lösung lässt sich einfach beweisen: Seien  $u_1, u_2$  zwei Lösungen von (1.27) zur Anfangsbedingung  $u_0$ , dann erfüllt die Differenz  $D := u_2 - u_1$  die Differentialgleichung  $\partial_t D = i \Delta D$  und  $D(\mathbf{x}, 0) = 0$ . Mit (1.28) folgt  $D(\mathbf{x}, t) = 0$  und somit  $u_2 = u_1$ . Aus (1.29) folgt: Die Leistung, die in Kapitel 1.1.3.2 definiert wurde, bleibt erhalten, wenn der Laser propagiert.

Für ein beschränktes Gebiet  $\Omega$  braucht es zur eindeutigen Lösbarkeit von (1.27) noch passende Randbedingungen. Zum Beispiel ist die paraxiale Wellengleichung ausgestattet mit Robin-Randbedingungen auf einem  $C^1$ -Rand  $\partial\Omega$  ausreichend für die eindeutige Lösbarkeit. Insbesondere sind die Leontovich-Randbedingungen, die in Kapitel 1.2.2 hergeleitet wurden, Robin-Randbedingungen für das elektrische Feld.

Damit schließt Kapitel 1, es enthält die theoretischen Grundlagen wie sie in der physikalischen und ingenieurwissenschaftlichen Literatur verwendet und die im Folgenden gebraucht werden.

# Vereinfachte Modelle

Eine Möglichkeit partielle Differentialgleichungen numerisch zu lösen, ist es die entsprechenden Ableitungen durch finite Differenzenquotienten zu ersetzen. Das reduziert die Differentialgleichung auf eine einfache algebraische Gleichung. In Kapitel 1 wurde hergeleitet, dass das elektrische Feld die Helmholtzgleichung

$$\Delta E + n^2 k^2 E = 0 \text{ auf } H := \mathbb{R}^2 \times \mathbb{R}_0^+ \quad (2.1)$$

erfüllen muss mit  $n = n(\mathbf{x})$  stückweise konstant,  $n$  springt am Übergang von Luft zu Metall  $\Gamma \subset H$ . Diese Differentialgleichung ergibt mit den Rand- bzw. Anfangswerten

$$E(\cdot, \cdot, 0) = E_0, \partial_z E(\cdot, \cdot, 0) = E_1, \quad (2.2)$$

$$E(r \cos(\phi), r \sin(\phi), z) \rightarrow 0 \text{ für } r \rightarrow \infty \quad (2.3)$$

ein Anfangswertproblem. Das Problem bei der Helmholtzgleichung (2.1) mit ortsabhängigen Koeffizienten  $n = n(\mathbf{x})$  ist, dass das elektrische Feld bei Sprüngen im Brechungsindex fein aufgelöst werden muss und entsprechende Kontinuitätsbedingungen

$$E \in C^1 \text{ auf } \Gamma$$

erforderlich sind. Dabei ergeben sich jedoch mehrere Probleme: Zum einen ist die Helmholtzgleichung ein schlecht gestelltes Anfangswertproblem, zum anderen ist die Anfangsbedingung  $E_1$  in der Anwendung sehr schwierig bzw. unmöglich zu messen. Beide Probleme löst die paraxiale Näherung: Nutzt man  $E = e^{iknz} E_s, \partial_z^2 E_s \approx 0$ , ergibt sich das wohlgestellte Anfangswertproblem

$$-2ikn \partial_z E_s = (\partial_x^2 + \partial_y^2) E_s \text{ auf } H \quad (2.4)$$

$$E_s(\cdot, \cdot, 0) = E_0,$$

$$E_s(r \cos(\phi), r \sin(\phi), z) \rightarrow 0 \text{ für } r \rightarrow \infty,$$

$$E_s \in C^1 \text{ auf } \Gamma.$$

Obwohl die Finite-Differenzen-Methoden immer weiter verbessert wurde [Vas92, YSU<sup>+</sup>97, SH98, CCC00], ist für eine allgemeine Geometrie mit einem allgemeinen elektrischen Feld eine gute Lösungsapproximation durch finite Differenzen nur mit einer feinen Diskretisierung möglich. Der Rechenaufwand steigt wie  $N \sim \frac{V}{\Delta x \Delta y \Delta z}$  an für ein Simulationsgebiet mit Volumen  $V$  und braucht dementsprechend lange für eine numerische Lösung: Für  $V = 10 \text{ mm} \cdot 1 \text{ mm} \cdot 0,5 \text{ mm}$  und  $\Delta x = \Delta y = \Delta z = 1 \text{ nm}$  ergibt sich bereits  $N \sim 5 \cdot 10^{18}$ . In [Tie11] dauert die Simulation eines Schnittspalts mit finiten Elementen deshalb trotz vielfältiger numerischer Optimierungsmethoden ungefähr einen Tag. Selbst mit diesem großen Implementierungsaufwand werden zum Beispiel Reflexionsgesetze wie „Einfallswinkel gleich Ausfallswinkel“ nicht korrekt wiedergegeben, das ist in Abbildung 2.1 zu sehen. Außerdem

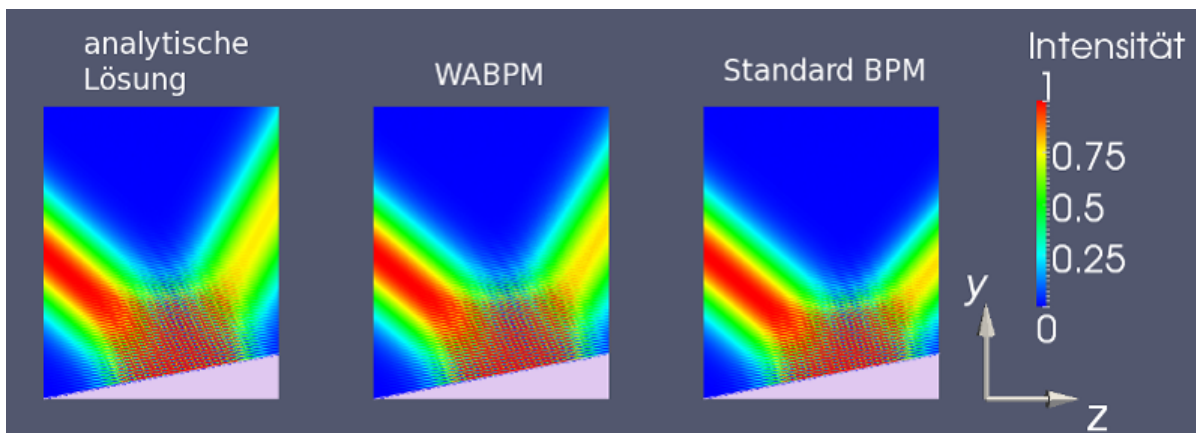


Abbildung 2.1: Standard beam propagation method (rechts), wide-angle beam propagation method (mitte), analytische Lösung (links) Quelle: [Tie11, S.47]

liefert eine numerische Lösung durch Finite Differenzen keine neuen Erkenntnisse über das Propagationsverhalten des elektrischen Feldes im Schnittspalt. Dementsprechend werden in den folgenden Kapiteln weitere Methoden untersucht, mit denen man (2.1) bzw. (2.4) lösen kann.

Statt die Helmholtzgleichung auf dem Halbraum  $H$  zu lösen, kann man mit den Leontovitch-Randbedingungen die Absorption und Reflexion des Lichts an der metallischen Oberfläche modellieren und die Helmholtzgleichung auf dem beschränkten Gebiet

$$\Omega := \{(x, y, z) \in \mathbb{R}^3 \mid n(x, y, z) = 1\} \subset ]-\infty, 0] \times [-a, a] \times [0, d]$$

lösen mit der Schnittspaltbreite  $a$ , der Blechdicke  $d$  und dem Schnittspaltende  $x_0 = 0$ . Das hat mehrere Vorteile: Die Beschränkung auf ein endliches Gebiet in zwei Dimensionen erleichtert die Numerik, der Brechungsindex ist konstant  $n \equiv 1$  in diesem Gebiet, außerdem modellieren die Randbedingungen bereits Effekte, die wir aus den Maxwellgleichungen übernehmen

möchten. Insgesamt ergibt sich dadurch

$$\begin{aligned} \Delta E + k^2 E &= 0 \text{ auf } \Omega, \\ E(\cdot, \cdot, 0) &= E_0, \partial_z E(\cdot, \cdot, 0) = E_1, \\ \partial_\nu E_s + iknE_s &= 0, \quad \partial_\nu E_{p_1} + \frac{ik}{n}E_{p_1} = 0, \quad \partial_\nu E_{p_2} + \frac{ik}{n}E_{p_2} = 0. \end{aligned}$$

Dabei lassen sich  $E_s, E_{p_1}$  und  $E_{p_2}$  aus dem lokalen Koordinatensystem berechnen, das in Kapitel 1.2.2 eingeführt wurde. Zusammen mit der paraxialen Näherung ergibt sich das Anfangswertproblem

$$\begin{aligned} -2ik\partial_z E &= (\partial_x^2 + \partial_y^2)E \text{ auf } \Omega, \\ E(\cdot, \cdot, 0) &= E_0, \\ \partial_\nu E_s + iknE_s &= 0, \quad \partial_\nu E_{p_1} + \frac{ik}{n}E_{p_1} = 0, \quad \partial_\nu E_{p_2} + \frac{ik}{n}E_{p_2} = 0. \end{aligned} \tag{2.5}$$

Aus mathematischer Sicht ist dies ein vollständiges Modell, um die Interaktion des Lasers mit einer metallischen Oberfläche zu beschreiben. Die Lösung dieses Problems numerisch zu berechnen gestaltet sich jedoch als schwierig bzw. sehr zeitaufwändig [Tie11], da die wellenoptische Lösung in allen 3 Raumrichtungen schnell fluktuiert. Deshalb liefern Standard-Solver von Matlab wie z.B. pdepe keine numerisch stabile Lösung von (2.5) für die gewünschte Wellenzahl  $k = \frac{2\pi}{1\mu\text{m}}$ .

Eine Lösung dieses Problems der langen Simulationszeit ist Raytracing, mehr dazu in Kapitel 2.1. Mit Raytracing kann man schnell und einfach die Intensität der Lösung näherungsweise berechnen. Von der dort berechneten Intensität kommt man jedoch nur noch schwierig zurück zum elektrischen Feld, da die Phaseninformation verloren gegangen ist. Man benötigt zusätzlich z.B. den Gerchberg-Saxton-Algorithmus, um das elektrische Feld zu erhalten. Außerdem werden manche wellenoptische Effekte in der Simulation durch Raytracing vernachlässigt.

Trotzdem braucht man die Ideen, die hinter dem Raytracing stehen, um zum Beispiel die Absorption/Reflexion nach Fresnel zu modellieren oder die Leontovitch-Randbedingungen zu implementieren: Das dabei verwendete Koordinatensystem basiert auf den Strahlenkoordinaten. Einen konsistenten Übergang zwischen Wellenoptik und Raytracing ist jedoch nichttrivial, dementsprechend werden in Kapitel 2.2 verschiedene Modelle aufgezeigt. Dabei muss darauf geachtet werden wo inkohärent und wo wird kohärent gerechnet wird (siehe Kapitel 1.1.3.3).

Eine andere Möglichkeit die lange Simulationszeit von (2.5) zu reduzieren, ist es die Freiraumpropagation (1.3) zu simulieren, die Lösung auf  $\Omega$  einzuschränken und die Reflexion an den Wänden durch ein anderes Modell als die Leontovitch-Randbedingungen zu modellieren. Das wird in Kapitel 3 gemacht.

## 2.1 Raytracing

### 2.1.1 Laserstrahl

Eine Möglichkeit den Laserstrahl zu modellieren ist das Raytracing-Verfahren. Dabei werden Lichtstrahlen kohärent oder inkohärent überlagert. Die Ausbreitung im Schlitzspalt, Absorption und Reflexion der Lichtstrahlen wird basierend auf Strahlengeometrie berechnet.

Die Beschreibung des Laserstrahls durch die inkohärente Überlagerung von Lichtstrahlen approximiert vor allem den Multimode besonders gut: Der Laserstrahl, der für den industriellen Laserschnitt eingesetzt wird, weist einen geringen Kohärenzgrad ( $|\gamma| < 0.1$ ) auf [PKH21]. Dies ist hauptsächlich auf eine lange Faser und die spektrale Dichte der verwendeten Laserquelle [BW13, PHB<sup>+</sup>20, Coh98, Fla13] zurückzuführen. Daher wird in diesem Kapitel eine völlig inkohärente Situation betrachtet.

Die Strahlenoptik ist wegen ihrer Einfachheit bekannt und kann zur Analyse komplizierter optischer Systeme mit Hilfe von Raytracing-Techniken eingesetzt werden [BW13]. Um eine genaue Beschreibung der Laserausbreitung zu gewährleisten, muss man die Strahlendichte (räumliche Information) und den Strahlenwinkel (Richtungsinformation) entsprechend bestimmen. Die Phaseninformation wird in diesem Kapitel vernachlässigt. Crooker *et al.* stellen bereits einen Ansatz zur Modellierung des Gaußschen Strahls ( $TEM_{00}, M^2 = 1$ ) mit geometrischer Optik [CCB06] vor. Des Weiteren modellierten Beaudette *et al.* einen aus einer doppelwandigen Faser emittierten Laserstrahl [BSR<sup>+</sup>18]. Es gibt Ansätze den Laserstrahl durch gebogene Lichtstrahlen zu beschreiben [Mic14] wie in Abbildung 2.2 zu sehen ist. Dadurch kann die Intensität von TEM-Moden bei der Freiraumpropagation korrekt wiedergegeben werden. Bestimmte Abschattungseffekte, die aus dem Experiment und der Theorie bekannt sind, konnten jedoch nicht modelliert werden. Ein Beispiel dafür ist in Abbildung 2.3 zu sehen. Im folgenden Text wird sich jedoch auf klassisches Raytracing konzentriert, bei dem die Lichtstrahlen sich auf Geraden ausbreiten. In der geometrischen Optik enthält jeder linear polarisierte Strahl die folgenden Informationen:



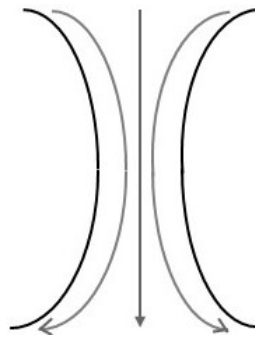


Abbildung 2.2: Die Lichtstrahlen (grau) folgen der Kaustik (schwarz).

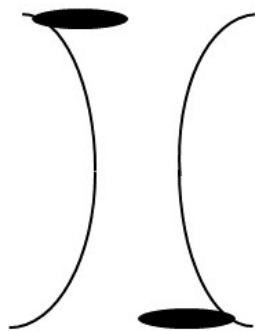


Abbildung 2.3: Wird der Laserstrahl oben links abgeschattet, so wirkt sich das nach dem Fokusbereich mit einem Schatten unten rechts aus.

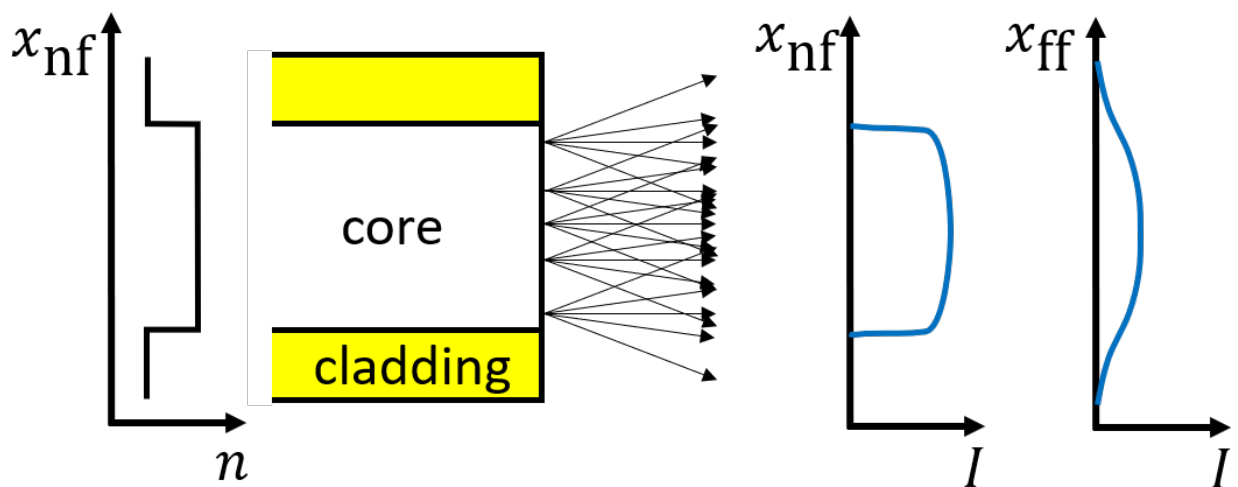


Abbildung 2.4: Links: Schematische Darstellung des Strahlenmodells auf der Basis einer Stufenindexfaser, rechts: repräsentative Intensitätsprofile im Nah- und Fernfeld

- $\mathbf{k}$  ist der Wellenvektor und  $\|\mathbf{k}\| = k$  ist die Wellenzahl,
- $\mathbf{E}(x, y, z)$  ist der elektrische Feldvektor, wobei  $\|\mathbf{E}\|_{\mathbb{C}^3}^2 \sim I$  dem Energiefluss des Strahls entspricht.

Wie in Abbildung 2.4 gezeigt, entspricht die Strahldichte am Faserende ( $z = 0$ ) der Intensitätsverteilung  $I(x, y, 0)$ . Dabei steht die Abkürzung nf für Nahfeld und ff für Fernfeld. Die Strahlen werden unter den Winkeln  $\theta_x, \theta_y$  zur Strahlachsenrichtung emittiert, die Dichte der Strahlen folgt der Intensitätsverteilung  $I(x, y, z)$ . Aufgrund der konstanten Brechungsindexverteilung entlang des Faserkerns und der in industriellen Anwendungen erlaubten recht großen Biegeradien  $R_{\text{bend}} > 30 \text{ cm}$  wird angenommen, dass das Winkelspektrum  $P(\theta_x, \theta_y)$  entlang  $r = \sqrt{x^2 + y^2}$  konstant ist. Die durch Raytracing berechnete Intensität nach Ausbreitung zu einer Ebene mit Abstand  $z$  kann durch folgendes Integral dargestellt werden:

$$I(x, y, z) = \int_{[-\frac{\pi}{2}, \frac{\pi}{2}]^2} I(x - \tan(\theta_x)z, y - \tan(\theta_y)z, 0) P_1(\theta_x, \theta_y) d\theta_x d\theta_y. \quad (2.6)$$

Dabei ist  $P_1$  das reellwertige Winkelspektrum der Raytracing-Quelle und  $z = 0$  ist die Fokusebene des Laserstrahl oder das Faserende. Wenn man neue Variablen  $k_x, k_y$  definiert<sup>1</sup> und  $\tan(\theta_x) = \frac{k_x}{k}$ ,  $\tan(\theta_y) = \frac{k_y}{k}$  in (2.6) substituiert, erhält man

$$I(x, y, z) = \int_{\mathbb{R}^2} I\left(x - \frac{k_x}{k}z, y - \frac{k_y}{k}z, 0\right) P_2(k_x, k_y) dk_x dk_y. \quad (2.7)$$

Hierbei kann

$$P_2(k_x, k_y) = P_1\left(\arctan\left(\frac{k_x}{k}\right), \arctan\left(\frac{k_y}{k}\right)\right) \cdot \frac{k^2}{(k^2 + k_x^2)(k^2 + k_y^2)}$$

aus  $P_1$  berechnet werden und umgekehrt, daher sind Gleichung (2.6) und (2.7) äquivalente Formulierungen<sup>2</sup>.

Die Intensität kann in der Regel direkt mit einer Kamera gemessen werden und wird in der Standard-Kaustikauswertung angegeben. Daher muss nur noch das Winkelspektrum bestimmt werden. Das Winkelspektrum, das durch zwei Intensitätsprofile<sup>3</sup>  $I_z$  und  $I_0$  bei zwei

<sup>1</sup>Nicht zu verwechseln mit den Komponenten  $(k_1, k_2)$  des Strahlenrichtungsvektors  $\mathbf{k} = (k_1, k_2, k_3)$ . Allerdings gilt  $(\frac{k_x}{k}, \frac{k_y}{k}) = (\sin(\theta_x), \sin(\theta_y))$  und somit  $(k_1, k_2) \approx (k_x, k_y)$

<sup>2</sup> $P_1$  ist einheitenlos und  $[P_2] = \text{m}^2$ , weil  $[k_x] = \text{m}^{-1}$  und  $[k_y] = \text{m}^{-1}$ .

<sup>3</sup>Es gilt  $I_z \in L^1(\mathbb{R}^2, \mathbb{R})$  siehe Seite 25

beliebigen Ebenen definiert ist, lautet

$$P_2(k_x, k_y) = \mathcal{F}^{-1} \left[ \frac{z^2 \mathcal{F}[I_z]}{2\pi k^2 \mathcal{F}[I_0]} \right] \left( \frac{z}{k} k_x, \frac{z}{k} k_y \right) \quad (2.8)$$

mit  $I_z = I(\cdot, \cdot, z)$ .

*Beweis.* Gleichung (2.7) kann für  $z \neq 0$  mit der Substitution  $u = \frac{k_x}{k} z, v = \frac{k_y}{k} z$  umgeschrieben werden als

$$\begin{aligned} I(x, y, z) &= \frac{k^2}{z^2} \int_{\mathbb{R}^2} I(x - u, y - v, 0) P_2 \left( \frac{k}{z} u, \frac{k}{z} v \right) du dv \\ &= \frac{k^2}{z^2} \int_{\mathbb{R}^2} I(x - u, y - v, 0) P_{2,z}(u, v) du dv \\ &= \frac{k^2}{z^2} (I(\cdot, \cdot, 0) * P_{2,z})(x, y). \end{aligned} \quad (2.9)$$

Dabei ist  $P_{2,z}(u, v) := P_2\left(\frac{k}{z}u, \frac{k}{z}v\right)$  für  $z \neq 0$  wohldefiniert und  $P_2$  kann aus  $P_{2,z}$  berechnet werden. Nun kann die Intensität durch (2.9) über eine Faltung von zwei Funktionen ausgedrückt werden. Anwendung der Fouriertransformation  $\mathcal{F}$  in den Variablen  $(x, y) \leftrightarrow (k_x, k_y)$  ergibt

$$\begin{aligned} \mathcal{F}[I_z](k_x, k_y) &= 2\pi \frac{k^2}{z^2} \mathcal{F}[I_0](k_x, k_y) \cdot \mathcal{F}[P_{2,z}](k_x, k_y) \\ \Leftrightarrow \mathcal{F}[P_{2,z}](k_x, k_y) &= \frac{z^2 \mathcal{F}[I_z](k_x, k_y)}{2\pi k^2 \mathcal{F}[I_0](k_x, k_y)} \\ \Leftrightarrow P_{2,z}(u, v) &= \mathcal{F}^{-1} \left[ \frac{z^2 \mathcal{F}[I_z]}{2\pi k^2 \mathcal{F}[I_0]} \right] (u, v) \\ \Leftrightarrow P_2 \left( \frac{k}{z} u, \frac{k}{z} v \right) &= \mathcal{F}^{-1} \left[ \frac{z^2 \mathcal{F}[I_z]}{2\pi k^2 \mathcal{F}[I_0]} \right] (u, v) \\ \Leftrightarrow P_2(k_x, k_y) &= \mathcal{F}^{-1} \left[ \frac{z^2 \mathcal{F}[I_z]}{2\pi k^2 \mathcal{F}[I_0]} \right] \left( \frac{z}{k} k_x, \frac{z}{k} k_y \right). \end{aligned}$$

□

Wenn das Raytracing-Modell (2.7) korrekt ist und das entsprechende Integral konvergiert, dann konvergiert das Fourier-Integral (2.8) auch.

Mit dem Winkelspektrum in Gleichung (2.8) gibt es nun eine Strahlenquelle, die die Intensität in der gegebenen  $z$ -Ebene korrekt wiedergibt. Für jedes beliebige Winkelspektrum gibt (2.6) und (2.7) die korrekte Intensität bei  $z = 0$  wieder.

**Lemma 2.1.1.** *Aus (2.8) und  $I_z \in L^1(\mathbb{R}^2)$  folgt, dass  $P_2$  folgende Bedingungen erfüllt:*

$$1) \int_{\mathbb{R}^2} P_2(k_x, k_y) dk_x dk_y = 1 \quad (2.10)$$

2) Falls  $x_0, y_0 \in \mathbb{R}$  und  $\tilde{I}$  mit  $I(x, y, z) = \tilde{I}(x - x_0, y - y_0, z)$ ,  $\tilde{I}(-x, y, z) = \tilde{I}(x, y, z)$ ,  $\tilde{I}(x, -y, z) = \tilde{I}(x, y, z)$  existieren, dann ist  $P_2$  reellwertig mit  $P_2(-k_x, k_y) = P_2(k_x, k_y)$ ,  $P_2(k_x, -k_y) = P_2(k_x, k_y)$

*Beweis.* Man kann 1) direkt nachrechnen:

$$\begin{aligned} & \int_{\mathbb{R}^2} P_2(k_x, k_y) dk_x dk_y \\ &= \int_{\mathbb{R}^2} \mathcal{F}^{-1} \left[ \frac{z^2 \mathcal{F}[I_z]}{2\pi k^2 \mathcal{F}[I_0]} \right] \left( \frac{z}{k} k_x, \frac{z}{k} k_y \right) dk_x dk_y \\ &= \frac{1}{2\pi} \int_{\mathbb{R}^2} \frac{z^2 \mathcal{F}[I_z](a, b)}{2\pi k^2 \mathcal{F}[I_0](a, b)} \int_{\mathbb{R}^2} e^{i\left(\frac{z}{k} k_x a + \frac{z}{k} k_y b\right)} dk_x dk_y da db \\ &= \int_{\mathbb{R}^2} \frac{z^2 \mathcal{F}[I_z](a, b)}{k^2 \mathcal{F}[I_0](a, b)} \delta\left(\frac{z}{k} a\right) \delta\left(\frac{z}{k} b\right) da db \\ &= \int_{\mathbb{R}^2} \frac{\mathcal{F}[I_z]\left(\frac{ku}{z}, \frac{kv}{z}\right)}{\mathcal{F}[I_0]\left(\frac{ku}{z}, \frac{kv}{z}\right)} \delta(u) \delta(v) du dv \\ &= \frac{\mathcal{F}[I_z](0, 0)}{\mathcal{F}[I_0](0, 0)} \\ &= \frac{\|I_z\|_{L^1(\mathbb{R}^2)}}{\|I_0\|_{L^1(\mathbb{R}^2)}} \\ &= 1 \end{aligned}$$

mit der Delta-Distribution  $\delta$  und dem Energieerhaltungssatz  $\|I_z\|_{L^1(\mathbb{R}^2)} = \|I_0\|_{L^1(\mathbb{R}^2)}$ .

Für 2) betrachten wir nur die  $x$ -Richtung, in  $y$ -Richtung verläuft der Beweis analog. Zum Beweis nutzen wir folgende Eigenschaften der Fouriertransformation:

- a)  $f(x)$  gerade und reellwertig  $\Leftrightarrow \hat{f}(k_x)$  gerade und reellwertig
- b)  $\mathcal{F}[f(x - x_0)](k_x) = \mathcal{F}[f(x)](k_x) e^{-ik_x x_0}$

Es gilt

$$\begin{aligned}
\frac{\mathcal{F}[I_z](u, v)}{\mathcal{F}[I_0](u, v)} &= \frac{\mathcal{F}[I(x, y, z)](u, v)}{\mathcal{F}[I(x, y, 0)](u, v)} \\
&= \frac{\mathcal{F}[\tilde{I}(x - x_0, y, z)](u, v)}{\mathcal{F}[\tilde{I}(x - x_0, y, 0)](u, v)} \\
&= \frac{\mathcal{F}[\tilde{I}(x, y, z)](u, v)e^{-iux_0}}{\mathcal{F}[\tilde{I}(x, y, 0)](u, v)e^{-iux_0}} \\
&= \frac{\mathcal{F}[\tilde{I}(x, y, z)](u, v)}{\mathcal{F}[\tilde{I}(x, y, 0)](u, v)} \\
&= \frac{\mathcal{F}[\tilde{I}_z](u, v)}{\mathcal{F}[\tilde{I}_0](u, v)}. \tag{2.11}
\end{aligned}$$

$\tilde{I}_z$  gerade und reellwertig  $\Rightarrow \mathcal{F}[\tilde{I}_z]$  gerade und reellwertig  $\Rightarrow \frac{\mathcal{F}[\tilde{I}_z]}{\mathcal{F}[\tilde{I}_0]}$  gerade und reellwertig  
 $\Rightarrow P_2\left(\frac{zk_x}{k}, \frac{zk_y}{k}\right) = \mathcal{F}\left[\frac{\mathcal{F}[\tilde{I}_z]}{\mathcal{F}[\tilde{I}_0]}\right](k_x, k_y)$  gerade und reellwertig  $\Rightarrow P_2(k_x, k_y)$  gerade und reellwertig.  $\square$

Wie bereits in Kapitel 1.1.3 beschrieben werden in dieser Arbeit hauptsächlich rotations-symmetrische Intensitäten betrachtet. Für rotationssymmetrische Intensitätsverteilungen sind die Voraussetzungen von Lemma 2.1.1 erfüllt und folglich ist das Winkelspektrum  $P_2$  reellwertig und gerade.

Bislang wurden nur zwei beliebige Ebenen betrachtet. Um die Berechnung auf die gesamte Kaustik auszudehnen, was bedeutet, dass die Intensität an jedem Punkt  $(x, y, z) \in \mathbb{R}^3$  korrekt modelliert wird, darf das Winkelspektrum nicht von  $z$  abhängen. Daher muss

$$\partial_z \left( \mathcal{F}^{-1} \left[ \frac{z^2 \mathcal{F}[I_z]}{\mathcal{F}[I_0]} \right] \left( \frac{z}{k} k_x, \frac{z}{k} k_y \right) \right) = 0 \tag{2.12}$$

für alle  $(k_x, k_y, z) \in \mathbb{R}^2 \times \mathbb{R}^+$  erfüllt sein. Zusammenfassend kann man sagen: Wenn (2.12) erfüllt ist mit (2.8) als Winkelspektrum, dann ist die Intensität des Raytracingmodells genau die gleiche wie die gemessene Intensität  $I$ .

Um schnell und einfach zu überprüfen, ob (2.12) erfüllt ist, werden im folgenden spezielle Intensitätsverteilungen untersucht. Wir nehmen an, dass die Intensitätsverteilung in  $xy$ -Richtung separiert und bei der Propagation nur in Größe und Amplitude skaliert. Konkret

gilt dann

$$\begin{aligned}
I(x, y, z) &= I_x(x, z) \cdot I_y(y, z), \\
I_x(x, z) &= I_x\left(\frac{w_0}{w(z)}x, 0\right) \frac{w_0}{w(z)}, \\
I_y(y, z) &= I_y\left(\frac{w_0}{w(z)}y, 0\right) \frac{w_0}{w(z)}, \\
w(z) &= w_0 \sqrt{1 + \left(\frac{z}{z_R}\right)^2}
\end{aligned} \tag{2.13}$$

mit  $z_R = \frac{w_0^2 k}{2M^2}$ . Das Einsetzen von (2.13) in (2.12) ergibt die Bedingung

$$f'_x\left(\frac{w(z)}{w_0}k_x\right) \frac{w_0}{w(z)} f_x(k_x) = f'_x(k_x) f_x\left(\frac{w(z)}{w_0}k_x\right) \tag{2.14}$$

für die Intensität in der Fokusebene mit  $f_x = \mathcal{F}[I_x(\cdot, 0)]$ , analog in  $y$ -Richtung. Ein Beweis dieser Aussage ist im Anhang A.2.6 auf Seite 125 zu finden. Mit (2.14) ist es deutlich einfacher zu überprüfen, ob die Intensitätsverteilung durch das Raytracingmodell beschrieben werden kann. Im Vergleich zu (2.12) wird nur die Intensitätsverteilung in der Fokusebene und die Strahldivergenz benötigt.

Ein Spezialfall von (2.13) ist die Gaußsche Intensitätsverteilung:

$$I(x, y, z) = \exp\left(-2\frac{x^2 + y^2}{w^2(z)}\right) \frac{w_0^2}{w^2(z)} \tag{2.15}$$

beschreibt einen Laserstrahl mit gaußförmiger Intensitätsverteilung und beliebiger Strahlqualität  $M^2 \geq 1$ . Die Intensitätsverteilung erfüllt (2.14) und daher kann die Intensität mit Raytracing in jedem Punkt  $(x, y, z) \in \mathbb{R}^3$  korrekt modelliert werden. Setzt man (2.15) in (2.8) ein, so ergibt sich als Winkelspektrum

$$P_2(k_x, k_y) = \frac{1}{2\pi} \left(\frac{w_0}{M^2}\right)^2 \exp\left(-2\frac{k_x^2 + k_y^2}{k_0^2}\right) \tag{2.16}$$

mit  $k_0 = 2M^2/w_0$ . Das Winkelspektrum (2.16) ist wieder gaußförmig, das war bereits durch Fourieroptik zu erwarten [Goo05, S. 74]. Man beachte, dass höhere TEM-Moden nicht mit Hilfe von Raytracing nach (2.7) modelliert werden können, da Interferenzeffekte in diesem Modell nicht berücksichtigt werden. Das ist in folgendem Lemma dargestellt.

**Lemma 2.1.2.** *Für jede TEM<sub>mn</sub>-Mode gilt: Wenn (2.14) erfüllt ist, dann gilt  $m = 0 = n$ .*

*Beweis.* Sowohl die Intensität als auch die Fouriertransformation der Intensität einer

TEM-Mode ist eine mit einem Polynom multiplizierte Gaußfunktion:

$$I_x(x, 0) = \sum_{l=0}^N b_l \left( \frac{x}{w_0} \right)^l \exp \left( -2 \frac{x^2}{w_0^2} \right) \quad (2.17)$$

$$\begin{aligned} \Rightarrow f_x(k_x) &= \sum_{l=0}^N \tilde{a}_l (w_0 k_x)^l \exp \left( -\frac{k_x^2}{b} \right) \\ &= \sum_{l=0}^N a_l k_x^l \exp \left( -\frac{k_x^2}{b} \right) \end{aligned} \quad (2.18)$$

mit Konstanten  $b_l, \tilde{a}_l, b, a_l \in \mathbb{C}$  unabhängig von  $x, k_x, z$ . Setzt man (2.18) in (2.14) ein und kürzt die Gaußfunktionen, so erhält man

$$\begin{aligned} \sum_{l=0}^N a_l \left( l \left( \frac{w}{w_0} k_x \right)^{l-1} - \frac{2}{b} \left( \frac{w}{w_0} k_x \right)^{l+1} \right) \frac{w_0}{w} \sum_{l=0}^N a_l k_x^l \\ = \sum_{l=0}^N a_l \left( l k_x^{l-1} - \frac{2}{b} k_x^{l+1} \right) \sum_{l=0}^N a_l \left( \frac{w}{w_0} k_x \right)^l \end{aligned} \quad (2.19)$$

mit  $w = w(z)$ . Definiert man  $\tilde{w} := \frac{w}{w_0}$  und differenziert (2.19)  $N$  mal nach  $\tilde{w}$ , so erhält man

$$\begin{aligned} -\frac{2}{b} k_x^{N+1} \sum_{l=0}^N a_l k_x^l &= \sum_{l=0}^N a_l \left( l k_x^{l-1} - \frac{2}{b} k_x^{l+1} \right) k_x^N \\ \Leftrightarrow \sum_{l=0}^N a_l k_x^{l+1} &= \sum_{l=0}^N a_l \left( k_x^{l+1} - \frac{b}{2} l k_x^{l-1} \right) \\ \Leftrightarrow 0 &= \sum_{l=0}^N a_l l k_x^{l-1} \\ \Leftrightarrow 0 &= \sum_{l=1}^N a_l l k_x^{l-1} \\ \Leftrightarrow 0 &= \sum_{l=0}^{N-1} a_{l+1} (l+1) k_x^l. \end{aligned} \quad (2.20)$$

Dies ist eine Polynomgleichung, die für alle  $k_x \in \mathbb{R}$  gelten muss. Daher müssen alle Koeffizienten gleich Null sein:

$$\begin{aligned} a_{l+1} (l+1) &= 0 \text{ für } l \geq 0 \\ \Leftrightarrow a_l &= 0 \text{ für } l \geq 1. \end{aligned} \quad (2.21)$$

Ähnliches gilt für die  $y$ -Richtung. Wir folgten also, dass  $(m, n) = (0, 0)$  gelten muss.  $\square$

Nur für  $\text{TEM}_{00}$  erhält man also überall in  $\mathbb{R}^3$  die korrekte Intensität und für jede andere  $\text{TEM}_{mn}$ -Mode kann man die exakte Intensitätsverteilung in maximal zwei  $z$ -Ebenen wiedergeben.

Um eine der zahllosen Anwendungen dieses Strahlenmodells zu zeigen, wird die Ausbreitung eines Gaußstrahls mit  $M^2 = 13$  durch Raytracing bzw. den ABCD-Matrixformalismus berechnet. Die entsprechenden Kaustiken sind in Abbildung 2.5 dargestellt. Es ist eine gute

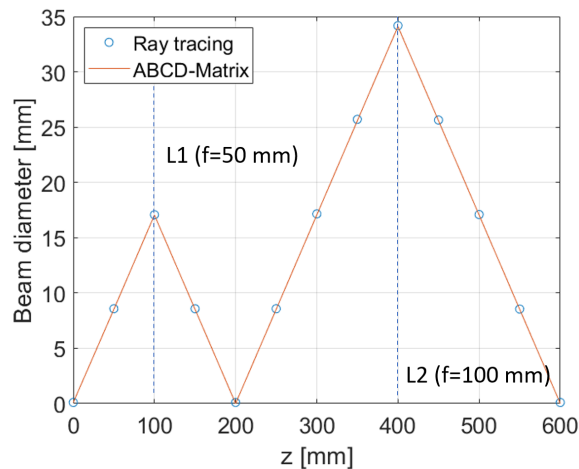


Abbildung 2.5: Vergleich des Strahldurchmessers berechnet durch Raytracing (blauer Kreis) und ABCD-Matrix (rote Linie)

Übereinstimmung zwischen den Ergebnissen des Raytracingverfahrens (blaue Kreise) und der ABCD-Matrix (rote Linie) zu erkennen. Außerdem kann das Modell sogar die Kaustik eines Gaußstrahl prognostizieren, der sich durch Linsen ausbreitet vgl. Abbildung 2.5. Die hier dargelegten Ergebnisse und mehr kann in [PKH21] nachgelesen werden.

Für alle Intensitäten, die sich durch (2.7) darstellen lassen, gelten folgende Eigenschaften:

**Lemma 2.1.3.** *Aus (2.7) folgt:*

Für  $\int_{\mathbb{R}^2} P_2(k_x, k_y) dk_x dk_y = 1$  gilt

$$\|I(\cdot, \cdot, z)\|_{L^1(\mathbb{R}^2)} = \|I(\cdot, \cdot, 0)\|_{L^1(\mathbb{R}^2)}. \quad (2.22)$$



Für  $k_x^2 P_2(k_x, k_y) \in L^1(\mathbb{R}^2)$ ,  $P_2(-k_x, k_y) = P_2(k_x, k_y)$  gilt

$$w(z) = w_0 \sqrt{1 + \frac{z^2}{z_R^2}}. \quad (2.23)$$

*Beweis.* Es gilt

$$\begin{aligned} \|I(\cdot, \cdot, z)\|_{L^1(\mathbb{R}^2)} &= \int_{\mathbb{R}^2} \int_{\mathbb{R}^2} I\left(x - \frac{k_x}{k}z, y - \frac{k_y}{k}z, 0\right) P_2(k_x, k_y) dk_x dk_y dx dy \\ &= \int_{\mathbb{R}^2} \int_{\mathbb{R}^2} I\left(x - \frac{k_x}{k}z, y - \frac{k_y}{k}z, 0\right) dx dy P_2(k_x, k_y) dk_x dk_y \\ &= \int_{\mathbb{R}^2} I(x, y, 0) dx dy \int_{\mathbb{R}^2} P_2(k_x, k_y) dk_x dk_y \\ &= \|I(\cdot, \cdot, 0)\|_{L^1(\mathbb{R}^2)} \end{aligned}$$

und somit (2.22). Für (2.23) sei O.b.d.A.  $\|I(\cdot, \cdot, 0)\|_{L^1(\mathbb{R}^2)} = 1$ , damit ist

$$\begin{aligned} w^2(z) &= 4 \frac{\|x^2 I(x, y, z)\|_{L^1(\mathbb{R}^2)}}{\|I(\cdot, \cdot, 0)\|_{L^1(\mathbb{R}^2)}} \\ &= 4 \int_{\mathbb{R}^2} x^2 I(x, y, z) dx dy \\ &= 4 \int_{\mathbb{R}^2} x^2 \int_{\mathbb{R}^2} I\left(x - \frac{k_x}{k}z, y - \frac{k_y}{k}z, 0\right) P_2(k_x, k_y) dk_x dk_y dx dy \\ &= 4 \int_{\mathbb{R}^4} \left(u + \frac{k_x}{k}z\right)^2 I(u, v, 0) P_2(k_x, k_y) du dv dk_x dk_y \\ &= 4 \int_{\mathbb{R}^2} P_2(k_x, k_y) \int_{\mathbb{R}^2} \left(u^2 + 2u \frac{k_x}{k}z + \frac{k_x^2}{k^2}z^2\right) I(u, v, 0) du dv dk_x dk_y \\ &= 4 \int_{\mathbb{R}^2} P_2(k_x, k_y) \left(\sigma_0^2 + 2\sigma_0 \frac{k_x}{k}z + \frac{k_x^2}{k^2}z^2\right) dk_x dk_y \\ &= 4 \left(\sigma_0^2 + 0 + \frac{\sigma_{0k}^2}{k^2}z^2\right) \\ &= 4\sigma_0^2 \left(1 + \frac{\sigma_{0k}^2}{\sigma_0^2 k^2}z^2\right) \\ &= w_0^2 \left(1 + \frac{z^2}{z_R^2}\right) \end{aligned}$$

mit  $w_0 = 2\sigma_0$  und  $z_R = \frac{\sigma_{0k}}{\sigma_{0k}}$ . □

### 2.1.2 Pulverstrahl

Das in Kapitel 2.1.1 beschriebene Modell kann auch verwendet werden, um andere Effekte zu modellieren: Der Pulverstrahl, der beim 3D-Druck verwendet wird, um das Material von der Düse an der richtigen Stellen aufzutragen, kann zum Beispiel mit dieser Methode modelliert und simuliert werden. Dabei liefert dieses Modell Ergebnisse, die besser mit Messungen aus dem Experiment übereinstimmen als bisherige Modelle [MMKT22].

Außerdem kann der Austritt aus einer Düse mit Radius  $r_0$  modelliert werden. Sei dazu

$$I(x, y, 0) := \chi_{B_{r_0}(0,0)}(x, y) = \begin{cases} 1, & x^2 + y^2 \leq r_0^2 \\ 0, & x^2 + y^2 > r_0^2 \end{cases},$$

$$P_2(k_x, k_y) := \frac{w_0^2}{2\pi} \exp\left(-w_0^2 \frac{k_x^2 + k_y^2}{2}\right)$$

Nach (2.7) lässt sich die Intensität dann berechnen als

$$\begin{aligned} I(x, y, z) &= \frac{w_0^2}{2\pi} \int_{\mathbb{R}^2} I\left(x - \frac{k_x}{k}z, y - \frac{k_y}{k}z, 0\right) P_2(k_x, k_y) dk_x dk_y \\ &= \frac{w_0^2}{2\pi} \int_{B_{\frac{kr_0}{z}}\left(\frac{xk}{z}, \frac{yk}{z}\right)} \exp\left(-w_0^2 \frac{k_x^2 + k_y^2}{2}\right) dk_x dk_y \\ &= \frac{w_0^2}{2\pi} \int_{B_{\frac{kr_0}{z}}(0,0)} \exp\left(-w_0^2 \frac{\left(k_x + \frac{xk}{z}\right)^2 + \left(k_y + \frac{yk}{z}\right)^2}{2}\right) dk_x dk_y \\ &= \frac{w_0^2}{2\pi} \int_0^{\frac{kr_0}{z}} \int_0^{2\pi} \exp\left(-w_0^2 \frac{\left(r \cos(\phi) + \frac{xk}{z}\right)^2 + \left(r \sin(\phi) + \frac{yk}{z}\right)^2}{2}\right) d\phi r dr \end{aligned}$$

$$\Rightarrow \tilde{I}(s, \psi, z) := I(s \cos(\psi), s \sin(\psi), z)$$

$$\begin{aligned} &= w_0^2 \int_0^{\frac{kr_0}{z}} \frac{1}{2\pi} \int_0^{2\pi} \exp\left(-w_0^2 \frac{rsk}{z} \cos(\phi - \psi)\right) d\phi r \exp\left(-\frac{w_0^2}{2} \left(r^2 + s^2 \frac{k^2}{z^2}\right)\right) dr \\ &= w_0^2 \exp\left(-\frac{w_0^2}{2} s^2 \frac{k^2}{z^2}\right) \int_0^{\frac{kr_0}{z}} I_0\left(w_0^2 r s \frac{k}{z}\right) r \exp\left(-\frac{w_0^2}{2} r^2\right) dr \\ &= 2 \exp\left(-\frac{w_0^2}{2} s^2 \frac{k^2}{z^2}\right) \int_0^{\frac{w_0 kr_0}{\sqrt{2}z}} I_0\left(\sqrt{2} w_0 u s \frac{k}{z}\right) u \exp(-u^2) du \end{aligned}$$

mit der modifizierten Besselfunktion nullter Ordnung  $I_0$ . Diese Intensität modelliert sowohl die scharfe Kante der Düse bei  $z = 0$  als auch die Dispersion der Intensität. Es gilt

$$\tilde{I}(r, \psi, z) \sim I_2(r, \psi, z) := \frac{\tilde{w}_0^2}{\tilde{w}^2(z)} \exp\left(-2\frac{r^2}{\tilde{w}^2(z)}\right) \quad \forall_{r, \psi \in \mathbb{R}} \text{ für } z \rightarrow \infty$$

Für eine exakte Formulierung dieser Aussage normieren wir beiden Intensitäten durch  $\|I(\cdot, \cdot, 0)\|_{L^1(\mathbb{R}^2)} = 1$ :

$$\begin{aligned} I_1(r, \psi, z) &:= \frac{\tilde{I}(r, \psi, z)}{\|r\tilde{I}(r, \psi, 0)\|_{L^1([0, \infty[ \times [0, 2\pi])}} \\ &= \frac{2}{\pi r_0^2} \exp\left(-\frac{w_0^2}{2} s^2 \frac{k^2}{z^2}\right) \int_0^{\frac{w_0 k r_0}{\sqrt{2}z}} I_0\left(\sqrt{2}w_0 u s \frac{k}{z}\right) u \exp(-u^2) du \\ I_3(r, \psi, z) &:= \frac{I_2(r, \psi, z)}{\|rI_2(r, \psi, 0)\|_{L^1([0, \infty[ \times [0, 2\pi])}} = \frac{2}{\pi \tilde{w}_0^2} \frac{\tilde{w}_0^2}{\tilde{w}^2(z)} \exp\left(-2\frac{r^2}{\tilde{w}^2(z)}\right), \end{aligned}$$

dann folgt

$$\frac{I_1(r, \psi, z) - I_3(r, \psi, z)}{I_3(r, \psi, z)} \xrightarrow{z \rightarrow \infty} 0 \quad \forall_{r, \psi \in \mathbb{R}}. \quad (2.24)$$

*Beweis.* Sei  $f(\alpha) := I_1(r, \psi, \alpha^{-1})$ ,  $g(\alpha) = I_3(r, \psi, \alpha^{-1})$ . Wir zeigen  $f(\alpha) - g(\alpha) = \mathcal{O}(\alpha^3)$  und  $g(\alpha) = b\alpha^2 + \mathcal{O}(\alpha^4)$  für  $\alpha \rightarrow 0$  mit einem  $b \in \mathbb{R}$ , dann folgt

$$\frac{f(\alpha) - g(\alpha)}{g(\alpha)} = \frac{\mathcal{O}(\alpha^3)}{b\alpha^2 + \mathcal{O}(\alpha^4)} = \frac{\mathcal{O}(\alpha)}{b + \mathcal{O}(\alpha^2)} \xrightarrow{\alpha \rightarrow 0} 0.$$

Es gilt

$$\begin{aligned} g(\alpha) &= \frac{2}{\pi \tilde{w}_0^2} \frac{\tilde{w}_0^2}{\tilde{w}^2\left(\frac{1}{\alpha}\right)} \exp\left(-2\frac{r^2}{\tilde{w}^2\left(\frac{1}{\alpha}\right)}\right) \\ &= \frac{2}{\pi \tilde{w}_0^2} \frac{1}{1 + \frac{1}{\alpha^2 z_R^2}} \exp\left(-2\frac{r^2}{\tilde{w}_0^2 \left(1 + \frac{1}{\alpha^2 z_R^2}\right)}\right) \\ &= \frac{2}{\pi \tilde{w}_0^2} \frac{\alpha^2}{\alpha^2 + \frac{1}{z_R^2}} \exp\left(-2\frac{r^2 \alpha^2}{\tilde{w}_0^2 \left(\alpha^2 + \frac{1}{z_R^2}\right)}\right) \\ &= \frac{2\alpha^2}{\pi \tilde{w}_0^2} (z_R^2 + \mathcal{O}(\alpha^2)) (1 + \mathcal{O}(\alpha^2)) \\ &= \frac{2z_R^2}{\pi \tilde{w}_0^2} \alpha^2 + \mathcal{O}(\alpha^4) \end{aligned}$$

mit  $z_R = \frac{\tilde{w}_0^2 k}{2}$  folgt  $b = \frac{\tilde{w}_0^2 k^2}{2\pi}$ .

Ähnlich wird  $f$  entwickelt, definiere dazu  $\beta_1 := -\frac{w_0^2}{2}s^2k^2$ ,  $\beta_2 := \frac{w_0kr_0}{\sqrt{2}}$  und  $\beta_3 := \sqrt{2}w_0sk$ . Dann folgt

$$\begin{aligned}
 f(\alpha) &= \frac{2}{\pi r_0^2} \exp(\beta_1 \alpha^2) \int_0^{\beta_2 \alpha} I_0(\beta_3 u \alpha) u e^{-u^2} du \\
 &= \frac{2}{\pi r_0^2} \exp(\beta_1 \alpha^2) \sum_{k_2=0}^{\infty} \frac{\beta_3^{2k_2}}{4^{k_2} (k_2!)^2} \alpha^{2k_2} \int_0^{\beta_2 \alpha} u^{2k_2+1} e^{-u^2} du. \\
 h(\alpha) &:= \int_0^{\beta_2 \alpha} u^{2k_2+1} e^{-u^2} du \\
 \Rightarrow h(0) &= 0 = h'(0) \\
 h''(0) &= \begin{cases} \beta_2^2, & k_2 = 0 \\ 0, & k_2 > 0 \end{cases} \\
 \Rightarrow h(\alpha) &= \delta_{0k_2} (\beta_2^2 \alpha^2 + \mathcal{O}(\alpha^3)) \\
 \Rightarrow f(\alpha) &= \frac{2}{\pi r_0^2} (1 + \mathcal{O}(\alpha^2)) (\beta_2^2 \alpha^2 + \mathcal{O}(\alpha^3)) \\
 &= \frac{2\beta_2^2}{\pi r_0^2} \alpha^2 + \mathcal{O}(\alpha^3) \\
 &= \frac{w_0^2 k^2}{\pi} \alpha^2 + \mathcal{O}(\alpha^3).
 \end{aligned}$$

Wähle also  $\tilde{w}_0 = \sqrt{2}w_0$ , dann gilt

$$f(\alpha) - g(\alpha) = b\alpha^2 + \mathcal{O}(\alpha^3) - (b\alpha^2 + \mathcal{O}(\alpha^4)) = \mathcal{O}(\alpha^3)$$

und somit (2.24). □

Interessanterweise hat der Düsenradius  $r_0$  keinen Einfluss auf das Verhalten im Unendlichen.

In diesem Kapitel wurde gezeigt, dass Strahlenoptik bereits viele Effekte beschreiben kann. Das folgende Kapitel konzentriert sich auf die wellenoptische Modellierung des Laserstrahls.

## 2.2 Wellenoptische Modelle

Das Ziel dieses Kapitels ist es eine Lösung des Anfangswertproblems (2.5) zu approximieren. Insbesondere sollen wichtige Eigenschaften der Lösung in dem Modell erhalten bleiben.

Die Frage ist jedoch, wie man die wellenoptische Natur der Lösung von (2.5) mit strahlenoptischen Ideen aus Kapitel 1.2.1 und 2.1 verbinden kann. Das Absorptionsmodell mit der Fresnelabsorption verwendet zum Beispiel Strahlenoptik für die  $k$ -Vektoren der ebenen Wellen, die aus der Fourieroptik kommen. Dementsprechend muss der Übergang zwischen diesen beiden Modellen konsistent beschrieben werden. Eine Herausforderung besteht darin, dass die Geometrie und dementsprechend der Brechungsindex  $n(\mathbf{x})$  nichttrivial ist.

### 2.2.1 „Löffelmodell“

Tritt ein elektrisches Feld  $E_0(x, y)$  in der  $z = 0$ -Ebene auf eine Kreisblende mit Radius  $R$ , dann lässt sich das elektrische Feld direkt nach der Blende beschreiben als  $E_0(x, y) \cdot t_R(x, y)$  mit  $t_R(x, y) = 1$  für  $x^2 + y^2 \leq R^2$  und  $t_R(x, y) = 0$  sonst. Nimmt man (1.25) für die Propagation in  $z$ -Richtung mit  $E_+ = E_0 \cdot t_R$  und  $E_- = 0$ , folgt

$$E(x, y, z) = \mathcal{F}^{-1}[\mathcal{F}[E_0 \cdot t_R] \cdot e^{ik_z z}](x, y). \quad (2.25)$$

Außerdem folgt<sup>4</sup> aus (2.25)

$$E(\mathbf{x}, z) \approx \tilde{E}(\mathbf{x}, z) := \frac{1}{2\pi} \int_{\mathbb{R}^2} \hat{E}_0(\mathbf{k}) e^{i(\mathbf{k}\mathbf{x} + k_z(\mathbf{k})z)} t_R \left( \mathbf{x} - \frac{z}{k_z(\mathbf{k})} \mathbf{k} \right) dk_x dk_y \quad (2.26)$$

mit  $\mathbf{x} = (x, y)$ ,  $\mathbf{k} = (k_x, k_y)$  und  $k_z(\mathbf{k}) = \sqrt{k^2 - \mathbf{k}^2}$ . Das hat die Interpretation, dass nur die  $\mathbf{k}$ -Werte aufintegriert werden, die von der Lochblende in den Punkt  $(\mathbf{x}, z)$  treffen<sup>5</sup>. Diese Approximation ergibt also genau das, was man aus der geometrischen Optik erwartet.

Jedoch weist das elektrische Feld hierbei im Vergleich zur exakten Berechnung mit Formel (2.25) eine gewisse Diskrepanz auf: Die Leistung

$$P = \|I\|_{L^1(\mathbb{R}^2)}$$

bleibt im Verlauf der  $z$ -Achse nicht erhalten wie in Abbildung 2.6 zu sehen ist. Hierbei wurde  $E_0(x, y) = \exp\left(-\frac{x^2+y^2}{w_0^2}\right)$  mit  $w_0 = 100 \mu\text{m}$  und  $R = 0.65w_0$  in Formel (2.26) eingesetzt. Das ist unphysikalisch und kommt daher, dass in dem Modell eine lineare Taylorentwicklung im Exponenten (vergleiche Fraunhofer-Näherung) verwendet wird. Deshalb verhält sich das elektrische Feld im „Löffelmodell“ anders für große  $z$ -Werte:

<sup>4</sup>Siehe Anhang A.2.7 auf Seite 127

<sup>5</sup>Beweis: Betrachte die Gerade  $g(t) := (\mathbf{x}, z) - t \cdot (\mathbf{k}, k_z(\mathbf{k}))$ . Sie trifft auf die  $z = 0$ -Ebene für  $t = z/k_z(\mathbf{k})$ . Der Schnittpunkt mit dieser Ebene liegt innerhalb der Lochblende  $\Leftrightarrow t_R(\mathbf{x} - z\mathbf{k}/k_z(\mathbf{k})) = 1$ .

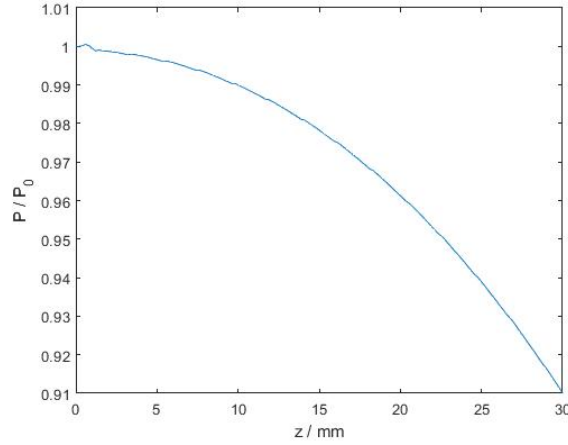


Abbildung 2.6: Die Leistung ist im Verlauf der Propagation nicht konstant

**Lemma 2.2.1.** Für  $\widehat{E}_0 \in L^\infty(\mathbb{R}^2)$  mit  $\text{supp}(\widehat{E}_0) \subset B_k(0, 0)$  gilt  $\tilde{E}(r, z) = \mathcal{O}\left(\frac{1}{z^2}\right)$  für  $z \rightarrow \infty$ .

*Beweis.* Es gilt

$$\begin{aligned}
& \left| \int_{\mathbb{R}^2} \widehat{E}_0(\mathbf{k}) e^{i(\mathbf{k}\mathbf{x} + k_z(\mathbf{k})z)} t_R \left( \mathbf{x} - \frac{z}{k_z(\mathbf{k})} \mathbf{k} \right) dk_x dk_y \right| \\
& \leq \int_{\mathbb{R}^2} |\widehat{E}_0(\mathbf{k})| |e^{ik_z(\mathbf{k})z}| t_R \left( \mathbf{x} - \frac{z}{k_z(\mathbf{k})} \mathbf{k} \right) dk_x dk_y \\
& \leq C_1 \int_{\mathbb{R}^2} t_R \left( \mathbf{x} - \frac{z}{k_z(\mathbf{k})} \mathbf{k} \right) dk_x dk_y \\
& \leq C_1 |M_z|
\end{aligned}$$

mit  $M_z := \left\{ \mathbf{k} \in \mathbb{R}^2 : \left\| \mathbf{x} - \mathbf{k} \frac{z}{\sqrt{k^2 - \mathbf{k}^2}} \right\|_{\mathbb{R}^2} < R \right\}$ . Da  $z \rightarrow \infty$  betrachtet wird, gilt

$$\begin{aligned}
& \left\| \frac{\mathbf{k}z}{\sqrt{k^2 - \mathbf{k}^2}} \right\| \gg \|\mathbf{x}\| \\
& \Rightarrow \frac{\left\| \mathbf{x} - \mathbf{k} \frac{z}{\sqrt{k^2 - \mathbf{k}^2}} \right\|}{\left\| \mathbf{k} \frac{z}{\sqrt{k^2 - \mathbf{k}^2}} \right\|} \xrightarrow{z \rightarrow \infty} 1 \\
& \Rightarrow |M_z| = \mathcal{O}(|N_z|)
\end{aligned}$$

mit  $N_z := \left\{ \mathbf{k} \in \mathbb{R}^2 : \left\| \mathbf{k} \frac{z}{\sqrt{k^2 - \mathbf{k}^2}} \right\|_{\mathbb{C}^2} < R \right\}$ . Es gilt  $\sqrt{k^2 - \mathbf{k}^2} \in \mathbb{R}$  wegen  $\text{supp}(\widehat{E}_0) \subset B_k(0, 0)$

und somit

$$\left\| \mathbf{k} \frac{z}{\sqrt{k^2 - \mathbf{k}^2}} \right\|_{\mathbb{C}^2} = \left\| \mathbf{k} \frac{z}{\sqrt{k^2 - \mathbf{k}^2}} \right\|_{\mathbb{R}^2} = \sqrt{\left( \mathbf{k} \frac{z}{\sqrt{k^2 - \mathbf{k}^2}} \right)^2}.$$

Betrachte also

$$\begin{aligned} \left( \mathbf{k} \frac{z}{\sqrt{k^2 - \mathbf{k}^2}} \right)^2 < R^2 &\Leftrightarrow \frac{\mathbf{k}^2}{k^2 - \mathbf{k}^2} < \left( \frac{R}{z} \right)^2 \\ &\Leftrightarrow \mathbf{k}^2 < \frac{R^2 k^2}{z^2 + R^2} \\ &\Rightarrow |N_z| = \mathcal{O}\left(\frac{1}{z^2 + R^2}\right) = \mathcal{O}\left(\frac{1}{z^2}\right) \\ &\Rightarrow \tilde{E}(r, z) = \mathcal{O}\left(\frac{1}{z^2}\right). \end{aligned}$$

□

In der Freiraumpropagation gilt jedoch nur  $E(r, z) = \mathcal{O}\left(\frac{1}{z}\right)$ , wie man zum Beispiel in (1.6) sieht. Eine Verbesserung erhofft man sich, indem man in der Taylorentwicklung eine quadratische Näherung

$$\begin{aligned} E(\mathbf{x}, z) &= \frac{1}{2\pi} \int_{\mathbb{R}^2} \hat{E}_0(\mathbf{k}) e^{i(\mathbf{k}\mathbf{x} + k_z(\mathbf{k})z)} A(\mathbf{k}, \mathbf{x}, z) dk_x dk_y \\ A(\mathbf{k}, \mathbf{x}, z) &\approx \int_{\mathbb{R}^2} \hat{t}_R(\tilde{\mathbf{k}}) e^{i\left(\tilde{\mathbf{k}}\left(\mathbf{x} - \frac{\mathbf{k}z}{k_z(\mathbf{k})}\right) - \frac{k^2 \tilde{\mathbf{k}}^2 z}{2k_z^3(\mathbf{k})}\right)} d\tilde{k}_x d\tilde{k}_y \end{aligned}$$

oder die entsprechende Näherung in den richtigen (kleinen) Variablen macht

$$A(\mathbf{k}, \mathbf{x}, z) \approx e^{-ik_z(\mathbf{k})z} \int_{\mathbb{R}^2} \hat{t}_R(\tilde{\mathbf{k}}) e^{i\left(\tilde{\mathbf{k}}\left(\mathbf{x} - \frac{\mathbf{k}z}{k_z(\mathbf{k})}\right) + k_z(\tilde{\mathbf{k}})z\right)} d\tilde{k}_x d\tilde{k}_y.$$

In beiden Fällen entspricht  $A$  (näherungsweise) einer propagierten Blendenfunktion ausgewertet an den Stellen, die durch die unpropagierte Blende treffen.

*Beweis.* Sei  $s(t) = (x, y, z) + t \cdot (k_x, k_y, k_z)$  eine Gerade. Sie schneidet die  $z = 0$ -Ebene für  $t = -\frac{z}{k_z}$  im Punkt  $(x - \frac{k_x}{k_z}z, y - \frac{k_y}{k_z}z, 0)$ . Mit  $\mathbf{x} = (x, y)$ ,  $\mathbf{k} = (k_x, k_y)$  und  $k_z = k_z(\mathbf{k})$  ist dieser Schnittpunkt genau  $(\mathbf{x} - \frac{\mathbf{k}z}{k_z(\mathbf{k})}, 0)$ . □

Eine anderer Ansatz ist dadurch gegeben, dass man die Blendenfunktion  $t_R$  glatter macht:

Nutzt man

$$t_{R,a}(r) := \begin{cases} 1, & r \leq R \\ e^{-a(r-R)}, & r > R \end{cases}$$

mit einer Dämpfungsrate  $a \in \mathbb{R}^+$ , gilt  $t_{R,a}(r) \xrightarrow{a \rightarrow \infty} t_R(r)$  und  $t_{R,a}(r) \xrightarrow{a \rightarrow 0} 1$ . Daraus folgt<sup>6</sup>

$$\int_{\mathbb{R}^2} \widehat{E}_0(\mathbf{k}) e^{i(\mathbf{k}\mathbf{x} + k_z(\mathbf{k})z)} t_{R,a} \left( \mathbf{x} - \frac{z}{k_z(\mathbf{k})} \mathbf{k} \right) d^2k \xrightarrow{a \rightarrow \infty} \int_{\mathbb{R}^2} \widehat{E}_0(\mathbf{k}) e^{i(\mathbf{k}\mathbf{x} + k_z(\mathbf{k})z)} t_R \left( \mathbf{x} - \frac{z}{k_z(\mathbf{k})} \mathbf{k} \right) d^2k$$

und

$$\int_{\mathbb{R}^2} \widehat{E}_0(\mathbf{k}) e^{i(\mathbf{k}\mathbf{x} + k_z(\mathbf{k})z)} t_{R,a} \left( \mathbf{x} - \frac{z}{k_z(\mathbf{k})} \mathbf{k} \right) d^2k \xrightarrow{a \rightarrow 0} \int_{\mathbb{R}^2} \widehat{E}_0(\mathbf{k}) e^{i(\mathbf{k}\mathbf{x} + k_z(\mathbf{k})z)} d^2k.$$

Die Funktion  $t_{R,a}$  interpoliert dementsprechend zwischen der harten Abschattung durch eine Blende und der Freiraumpropagation. Man kann dieses Verhalten folgendermaßen interpretieren: Die Blendenkante wird aufgeweicht, das elektrische Feld kann in das Material eindringen und trotzdem hinter der Blende weiter propagieren. Durch das Material wird das elektrische Feld jedoch gedämpft, das geschieht mit  $\exp(-a(r-R))$ .

Selbst mit dieser Aufweichung ist die Leistung nach einer Rayleighlänge jedoch klein, wie man in Abbildung 2.7 sehen kann. Deshalb wird im folgenden Abschnitt ein Modell dargestellt, das die Leistungs-/Energieerhaltung direkt im Modell enthalten hat.

### 2.2.2 „Zielscheibenmodell“

Ein zweites Modell ist gegeben durch einen Raytracer, bei dem ein Strahl die Ausdehnung eines Gaußstrahls hat. Die Strahlen werden inkohärent überlagert und der Fehler zu den Messdaten in den Parametern minimiert. Genauer gesagt ist

$$I(r', z') = \exp \left( - \frac{r'^2}{w_0'^2 \left( 1 + \left( \frac{z'}{z_R} \right)^2 \right)} \right)$$

<sup>6</sup>Aufgrund des Majorantenriteriums darf man Integral und Grenzwert vertauschen



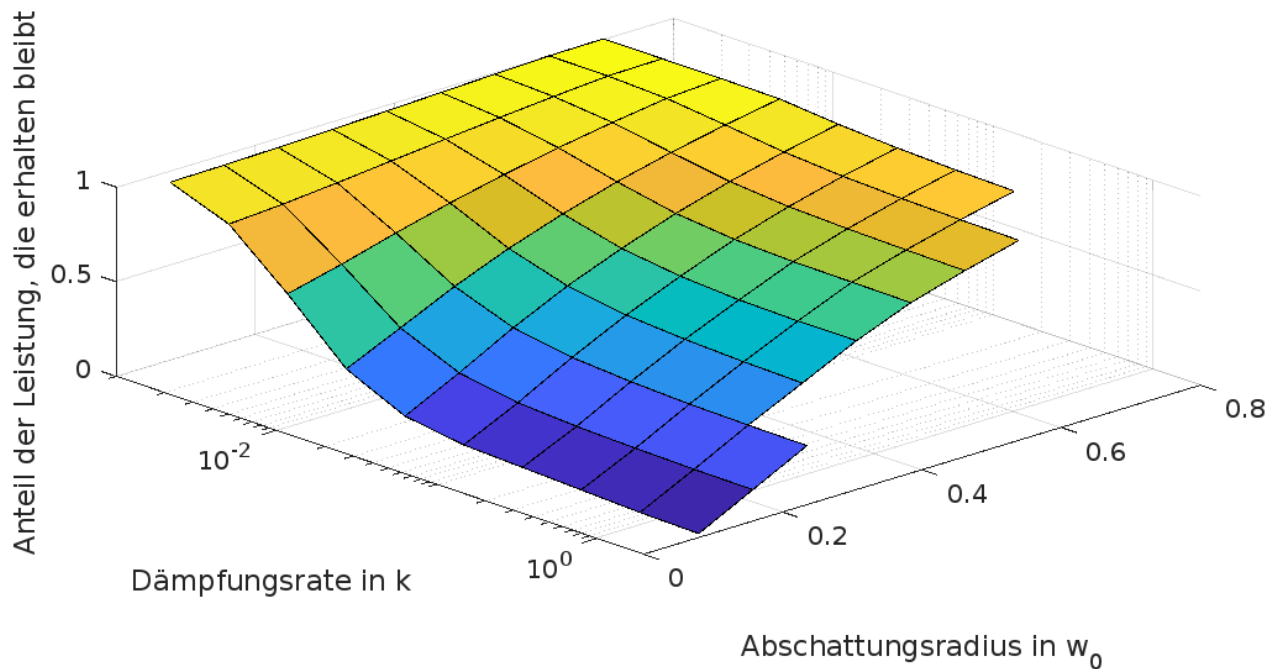


Abbildung 2.7: Leistungsabfall beim „Löffelmodell“

die Intensität jedes Strahls mit  $w'_0 \ll w_0, z'_R = z_R$  und

$$r' = r'(\alpha_i, x_{ij}, y_{ij}, x, y, z) = \cos(\alpha_i) \sqrt{(x - x_{ij})^2 + (y - y_{ij})^2} + \sin(\alpha_i)z$$

$$z' = z'(\alpha_i, x_{ij}, y_{ij}, x, y, z) = -\sin(\alpha_i) \sqrt{(x - x_{ij})^2 + (y - y_{ij})^2} + \cos(\alpha_i)z$$

sind die lokalend Koordinaten des Strahl. Der Strahl startet im Punkt  $(x_{ij}, y_{ij}) = r_i(\cos(\phi_j), \sin(\phi_j))$  im Winkel  $\alpha_j$ , es werden  $N_{ges} = N \cdot N_\phi$  Strahlen mit Amplitude  $A_{ij}$  inkohärent überlagert. Ein Beispiel, das dem Modell seinen Namen gegeben hat, kann man in Abbildung 2.8 sehen. Eine Rekonstruktion des elektrischen Feldes durch die kohärente Überlagerung von Gaußfunktionen ist auch möglich [TET09], jedoch aufwändiger. Dementsprechend wird im folgenden Text nur die inkohärente Überlagerung betrachtet und die Gesamtintensität ist gegeben durch

$$I_{ges}(\boldsymbol{\alpha}, \mathbf{A}, x, y, z) = \sum_{i,j=1}^{N, N_\phi} A_{ij} I(r'(\alpha_i, x_{ij}, y_{ij}, x, y, z), z'(\alpha_i, x_{ij}, y_{ij}, x, y, z)). \quad (2.27)$$

Dieses Modell ist motiviert durch Wellenpakete, die frei propagieren und die überlagert die gemessene Intensität ergeben. Dass die  $TEM_{00}$ -Moden unter bestimmten Winkeln ausgesendet werden, führt zu keinen Widerspruch im Fokus: Die Summe der  $k$ -Vektoren zeigt in Ausbreitungsrichtung des Laserstrahls (vgl. Fouriertransformation: Viele ebene Wellen mit

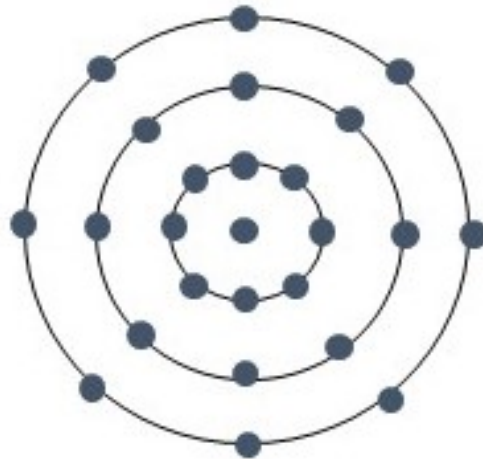


Abbildung 2.8: Die Startpunkte der Ansatzfunktionen sind rotationssymmetrisch in der  $xy$ -Ebene verteilt.

unterschiedlichen  $k$ -Vektoren geben eine Gesamtmode mit  $k$ -Vektor in Ausbreitungsrichtung). Durch die Ausdehnung der Strahlen können Effekte modelliert werden, die durch einen klassischen Raytracer nicht modelliert werden können. So kann dieses Modell sowohl den Fokus als auch das Fernfeld korrekt beschreiben (siehe Abbildung 2.9). Außerdem ist eine sehr viel

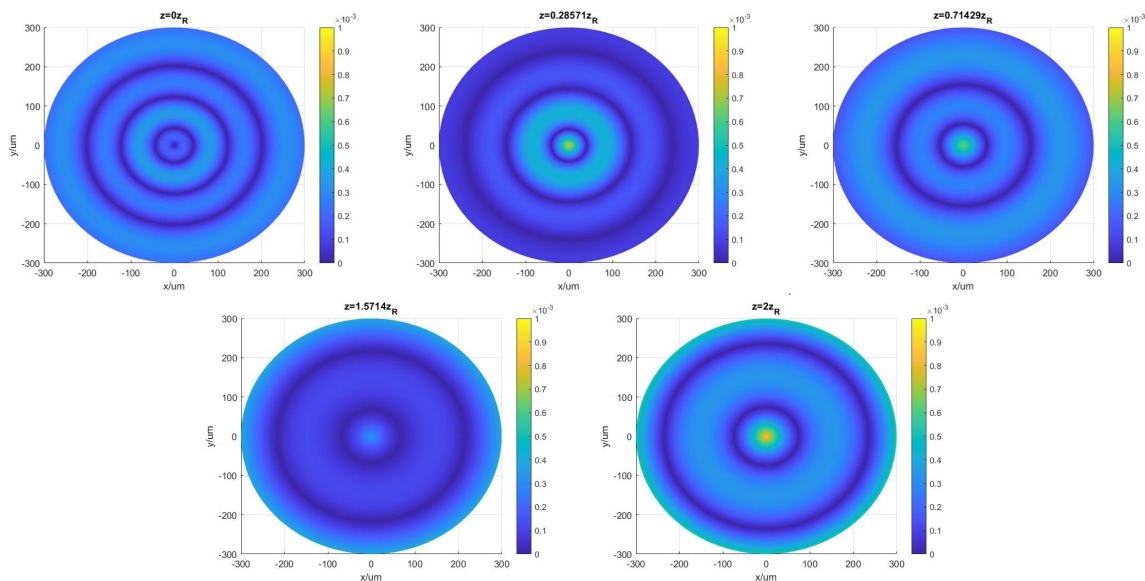


Abbildung 2.9: Absoluter Fehler zwischen Modell (2.27) und  $TEM_{00}$

geringere Anzahl an Strahlen nötig: Bereits  $10^2$  Strahlen liefern passable Ergebnisse,  $10^4$  Strahlen geben die Intensitätsverteilung praktisch fehlerfrei wieder. Bisherige Raytracer benötigen dazu ca.  $10^6$  Strahlen, ein solcher wurde in Kapitel 2.1 beschrieben.

Bei einer vorgegebenen gemessenen Intensitätsverteilung  $I_{mess}$  soll nun der Fehler

$$\begin{aligned}
 e(\boldsymbol{\alpha}, \mathbf{A}) &:= \frac{\|I_{ges}(\boldsymbol{\alpha}, \mathbf{A}, \cdot, \cdot, \cdot) - I_{mess}\|_{l^2(\mathbb{R}^{N \times N_\phi \times N_z})}^2}{\|I_{mess}\|_{l^2(\mathbb{R}^{N \times N_\phi \times N_z})}^2} \\
 &= \frac{\sum_{i,j,k=1}^{N,N_\phi,N_z} |I_{ges}(\boldsymbol{\alpha}, \mathbf{A}, \tilde{x}_i, \tilde{y}_j, \tilde{z}_k) - I_{mess}(\tilde{x}_i, \tilde{y}_j, \tilde{z}_k)|^2}{\sum_{i,j,k=1}^{N,N_\phi,N_z} |I_{mess}(\tilde{x}_i, \tilde{y}_j, \tilde{z}_k)|^2}
 \end{aligned} \tag{2.28}$$

bzw.

$$\begin{aligned}
 e(\boldsymbol{\alpha}, \mathbf{A}) &:= \sum_{k=1}^{N_z} \frac{\|I_{ges}(\boldsymbol{\alpha}, \mathbf{A}, \cdot, \cdot, z_k) - I_{mess}(\cdot, \cdot, z_k)\|_{l^2(\mathbb{R}^{N \times N_\phi})}^2}{\|I_{mess}(\cdot, \cdot, z_k)\|_{l^2(\mathbb{R}^{N \times N_\phi})}^2} \\
 &= \sum_{k=1}^{N_z} \frac{\sum_{i,j=1}^{N,N_\phi} |I_{ges}(\boldsymbol{\alpha}, \mathbf{A}, \tilde{x}_i, \tilde{y}_j, z_k) - I_{mess}(\tilde{x}_i, \tilde{y}_j, z_k)|^2}{\sum_{i,j}^{N,N_\phi} |I_{mess}(\tilde{x}_i, \tilde{y}_j, z_k)|^2}
 \end{aligned} \tag{2.29}$$

durch die Parameter  $(\boldsymbol{\alpha}, \mathbf{A})$  minimiert werden. Dabei sind  $(\tilde{x}_i, \tilde{y}_j, \tilde{z}_k) \in \mathbb{R}^3$  die Punkte im Raum, an denen die Intensität  $I_{mess}$  gemessen wurde. Für gegebenes  $\boldsymbol{\alpha}$  lassen sich die optimalen Amplituden  $\mathbf{A}$  eindeutig durch die Methode der kleinsten Quadrate<sup>7</sup> unter der Nebenbedingung  $\mathbf{A} \geq 0$  berechnen. Somit gilt  $\mathbf{A} = \mathbf{A}(\boldsymbol{\alpha})$  und  $e = e(\boldsymbol{\alpha})$ . Diese Funktion  $e : \mathbb{R}^N \rightarrow \mathbb{R}$  ist stetig und  $[0, 2\pi]^N$  ist kompakt, dementsprechend existiert nach dem Satz von Weierstraß<sup>8</sup> ein globales Minimum von  $e$ . Die Fehlerfunktion ist nichtlinear in  $\boldsymbol{\alpha}$ , dementsprechend ist die Minimierung nichttrivial.

In Abbildung 2.9 wurde  $N_\phi = 10 = N$  gewählt,  $I_{mess} = |E_s|^2$  aus (1.5) mit  $E_0 = 1$  und (2.29) für  $z$ -Werte in  $[-z_R, z_R]$  optimiert. Es ergibt sich damit bereits ein relativ geringer Fehler von  $e = 0,02$ . Für eine größere Anzahl  $N \sim 100$  an Strahlen ergibt sich dementsprechend ein noch kleinerer Fehler. Die in Abbildung 2.9 dargestellten  $z$ -Ebenen entsprechen nicht den in der Optimierung genutzten Ebenen, dementsprechend macht das Modell auch gute Prognosen außerhalb des optimierten Bereichs.

Ein Vorteil dieses Modells ist, dass man die Intensität an jedem Punkt des  $\mathbb{R}^3$  sehr einfach berechnen kann. Die Intensität ist nicht abhängig von einer Diskretisierung und sie muss nicht iterativ berechnet werden.

Außerdem kann man den Auftreffpunkt der Mittelpunkte der Ansatzfunktionen auf der Materialoberfläche durch simple geometrische Überlegungen berechnen. Da jede Basisfunktion eine Ausbreitungsrichtung  $\mathbf{k}_i$  hat, lässt sich der Absorptionswinkel durch  $\cos(\theta) = \frac{n\mathbf{k}_i}{\|\mathbf{n}\|\|\mathbf{k}_i\|}$  berechnen und der Absorptionsgrad entsprechend durch die Fresnelschen Formeln (1.20)-(1.22)

<sup>7</sup>Siehe Anhang A.1.9 auf Seite 116

<sup>8</sup>Siehe Anhang A.1.10 auf Seite 116

ermitteln. Dann wird ein Strahl abgeschattet genau dann, wenn die Gerade, die in  $(x_{ij}, y_{ij}, 0)$  startet und in  $z'$ -Richtung zeigt, auf das Material trifft.

Ein weiterer Vorteil ist die Leistungserhaltung: Da jede Ansatzfunktion leistungserhaltend ist, bleibt automatisch auch die Gesamtleistung während der Propagation erhalten.

### 2.2.3 Modellierung durch einen Blendenstapel

In diesem Abschnitt wird das letzte vereinfachte Modell beschrieben. Aus diesem ist schließlich durch mehrere Modifikationen das finale Modell entstanden, das in Kapitel 3.1 beschrieben wird. Die Idee, die hinter diesem Modell steht, ist, dass der Schnittspalt in verschiedenen  $z$ -Ebenen diskretisiert wird und dort das elektrische Feld mit Blenden interagiert, siehe Abbildung 2.10.

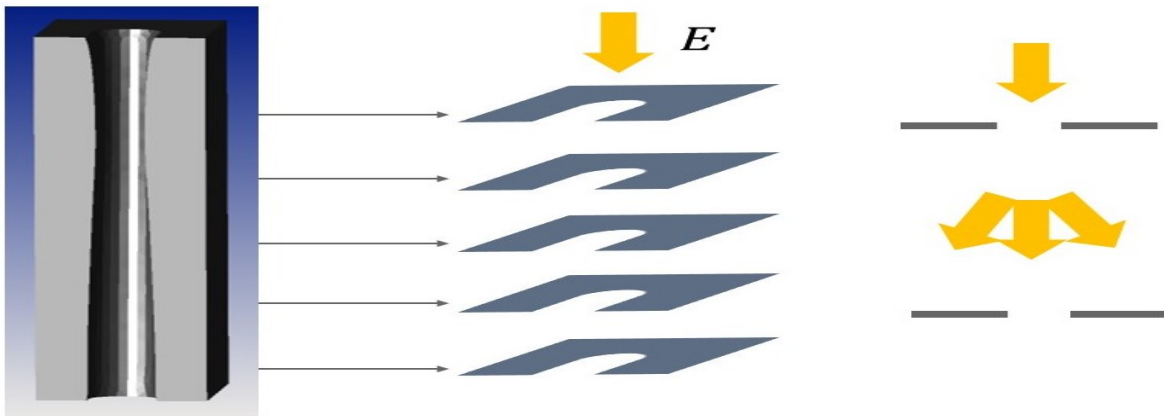


Abbildung 2.10: Schnittspalt (links) wird in verschiedenen  $z$ -Ebenen diskretisiert (mitte). Für diesen Blendenstapel wird das elektrische Feld berechnet (rechts).

Das kann aus der bereits in der Literatur bekannten „beam propagation method“ [VRvdDL81] motiviert werden, die in Abbildung 2.10 skizzierte Idee wurde jedoch unabhängig davon entwickelt. Trotzdem sollen kurz mehrere ähnliche Vorgehensweisen beschrieben werden, die unter dem Namen „beam propagation method“ (BPM) bekannt sind.

#### 2.2.3.1 Beam propagation method

Eine andere Methode, die Gleichung

$$(2.4) \Leftrightarrow -2ik\partial_z \widehat{n} \cdot \widehat{E}_s = -(k_x^2 + k_y^2) \widehat{E}_s \quad (2.30)$$

zu vereinfachen, ist folgende Näherung:

$$\widehat{n \cdot E_s} \approx n \cdot \widehat{E_s} \quad (2.31)$$

Diese Aussage ist für einen konstanten Brechungsindex wahr und für eine Funktion  $n$ , die sich um maximal  $\delta$  ändert ( $\exists n_0 : \|n_0 - n\|_\infty \leq \delta$ ), gilt folgende Abschätzung:

$$\begin{aligned} \left\| \widehat{n \cdot E_s}(\cdot, \cdot, z) - n^2 \widehat{E_s}(\cdot, \cdot, z) \right\|_\infty &= \sup_{x, y \in \mathbb{R}} \frac{1}{2\pi} \left| \int_{\mathbb{R}^2} (n^2(\tilde{x}, \tilde{y}) - n^2(x, y)) E_s(\tilde{x}, \tilde{y}, z) e^{i(k_x \tilde{x} + k_y \tilde{y})} d\tilde{x} d\tilde{y} \right| \\ &\leq \frac{1}{2\pi} \int_{\mathbb{R}^2} \sup_{x, y \in \mathbb{R}} |n^2(\tilde{x}, \tilde{y}) - n^2(x, y)| |E_s(\tilde{x}, \tilde{y}, z)| d\tilde{x} d\tilde{y} \\ &\leq \frac{\sup_{x, y, \tilde{x}, \tilde{y} \in \mathbb{R}} |n^2(\tilde{x}, \tilde{y}) - n^2(x, y)|}{2\pi} \int_{\mathbb{R}^2} |E_s(\tilde{x}, \tilde{y}, z)| d\tilde{x} d\tilde{y} \\ &\leq \delta \frac{2|n_0| + \delta}{2\pi} \|E_s(\cdot, \cdot, z)\|_{L^1(\mathbb{R}^2)} \xrightarrow{\delta \rightarrow 0} 0 \end{aligned}$$

für  $E_s(\cdot, \cdot, z) \in L^1(\mathbb{R}^2)$ . Falls Näherung (2.31) gerechtfertigt ist, gilt

$$E(x, y, z) \approx \frac{1}{2\pi} \int_{\mathbb{R}^2} \widehat{E_0}(k_x, k_y) \exp\left(i\left(k_x x + k_y y + (n(x, y, z)k - \frac{k_x^2 + k_y^2}{2kn(x, y, z)})z\right)\right) dk_x dk_y \quad (2.32)$$

für eine Anfangsbedingung  $E(x, y, 0) = E_0(x, y)$ . Da

$$\left| \exp\left(i\left(k_x x + k_y y + (n(x, y, z)k - \frac{k_x^2 + k_y^2}{2kn(x, y, z)})z\right)\right) \right| \leq |e^{-\Im(n(x, y, z)kz)}| \sim \exp(-10^7 z)$$

im Metall gilt, kann man effektiv davon ausgehen, dass dort das elektrische Feld einfach abgeschnitten wird. In der Luft ergibt sich aus (2.32) wieder Formel (1.4). Effektiv bedeutet Formel (2.32) also

$$E(x, y, z) \approx \frac{t(x, y, z)}{2\pi} \int_{\mathbb{R}^2} \widehat{E_0}(k_x, k_y) \exp\left(i\left(k_x x + k_y y + \left(k - \frac{k_x^2 + k_y^2}{2k}\right)z\right)\right) dk_x dk_y$$

mit

$$t(\mathbf{x}) = \begin{cases} 1, & \mathbf{x} \text{ in Luft} \\ 0, & \text{sonst.} \end{cases} \quad (2.33)$$

Für schwach reflektierende Oberflächen wurde die beam propagation method in [VRvdDL81] beschrieben. Für

$$n^2(\mathbf{x}) = \begin{cases} n_0^2, & \mathbf{x} \in \Omega \\ n_0^2 + \Delta n^2, & \text{sonst} \end{cases}$$

und mit  $\varepsilon$  als Feld aus (1.4) lässt sich das elektrische Feld, das mit dem Material interagiert, näherungsweise berechnen durch

$$E(x, y, \Delta z) \approx \varepsilon(x, y, \Delta z) \exp\left(\frac{ik}{2n_0} \Delta n^2 \Delta z\right)$$

für  $\Delta z$  klein genug. Im Metall klingt  $\left|\exp\left(\frac{ik}{2n_0} \Delta n^2 \Delta z\right)\right|$  exponentiell ab, somit wird auch bei der in [VRvdDL81] beschriebenen BPM das elektrische Feld in jedem Iterationsschritt effektiv mit einer Abschneidefunktion multipliziert. Das kann man geometrisch durch einen Stapel von 2D-Blenden beschreiben, dazu werden im folgenden Abschnitt verschiedene Überlegungen dargelegt.

### 2.2.3.2 Konvergenz des Verfahrens

Diskretisiert man den Spalt in verschiedene  $z$ -Ebenen und nimmt in jeder Ebene eine 2D-Blende an (siehe Abbildung 2.10), kann man die Lösung der Schrödingergleichung (bei gegebenen Anfangsbedingungen) nach (1.4) berechnen. An der Spaltoberfläche wird das elektrische Feld abgeschnitten und dementsprechend nach (2.25) propagiert, bis es auf eine weitere Blende trifft. Dort wird es entsprechend abgeschnitten und danach weiterpropagiert, insbesondere sind damit Beugungseffekte Teil dieses Modells. In Formeln ausgedrückt gilt

$$E_n(x, y) := E(x, y, z_n) = t(x, y, z_n) \mathcal{F}^{-1}[\mathcal{F}[E_{n-1}]e^{ik_z \Delta z}](x, y) \quad (2.34)$$

mit  $k_z = k - \frac{k_x^2 + k_y^2}{2k}$ ,  $\Delta z = z_n - z_{n-1}$  und  $t$  aus (2.33). Damit ist die Intensität an einer Blende die gleiche wie in [VRvdDL81], der Korrekturterm dort ist in unserem Fall numerisch gleich Null im Metall.

Nun wird im Modell die Diskretisierungsdistanz  $\Delta z \rightarrow 0$  genommen, das resultierende Feld ist das Modellfeld. Im Allgemeinen ist es schwierig zu zeigen, dass die Folge  $\{E_n\}_{n \in \mathbb{N}} \subset L^2(\mathbb{R}^2)$  konvergiert. Wir betrachten deshalb für das folgende Lemma eine Transmissionsfunktion  $t$ ,

die

$$t(x, y, z) = t\left(x - \frac{z}{\tan(\theta)}, y, 0\right) \quad (2.35)$$

erfüllt. Das beschreibt eine Geometrie mit Steigungswinkel  $\theta$  wie sie zum Beispiel in Abbildung 1.3 dargestellt ist. Wenn die Blechdicke  $d$  in  $n$  äquidistante Teile  $\Delta z = \frac{d}{n}$  unterteilt wird, nutzen wir

$$\begin{aligned} \Delta z &\xrightarrow{n \rightarrow \infty} 0, \\ z_n &= n \cdot \Delta z = d, \\ \Delta x &:= \frac{\Delta z}{\tan(\theta)} = \frac{d}{n \tan(\theta)} \\ \Rightarrow x_0 &:= n \Delta x = \frac{d}{\tan(\theta)} \\ \Rightarrow E_n(x + \Delta x, y) &= t(x + \Delta x, y, z_n) \mathcal{F}^{-1}[\mathcal{F}[E_{n-1}]e^{ik_z \Delta z}](x + \Delta x, y) \\ &\stackrel{(2.35)}{=} t(x, y, z_n - \tan(\theta) \Delta x) \mathcal{F}^{-1}[\mathcal{F}[E_{n-1}]e^{ik_z \Delta z}](x + \Delta x, y) \\ &= t(x, y, z_{n-1}) \mathcal{F}^{-1}[\mathcal{F}[E_{n-1}]e^{i(k_z \Delta z + k_x \Delta x)}](x, y) \end{aligned}$$

und somit iterativ

$$E_n\left(\cdot + \frac{d}{\tan(\theta)}, \cdot\right) = E_n(\cdot + n \Delta x, \cdot) = (PU_n)^n E_0$$

mit

$$\begin{aligned} (Pf)(x, y) &= t(x, y, 0) \cdot f(x, y), \\ (U_n f)(x, y) &= \mathcal{F}^{-1}\left[\widehat{f}e^{i(k_x \Delta x + k_z \Delta z)}\right](x, y). \end{aligned}$$

Das heißt statt die Abschneidefunktion  $t$  in jedem Schritt nach (2.35) zu verschieben kann äquivalent dazu auch die Funktion  $E_n$  verschoben werden. Wegen  $t(x, y, 0) \cdot E(x, y, 0) = E(x, y, 0)$  und  $P^2 = P$  gilt

$$E_n(x, y) = ((PU_n P)^n E_0)\left(x - \frac{d}{\tan(\theta)}, y\right). \quad (2.36)$$

Dann gilt, dass das Verfahren bei einer Verdopplung der Feinheit konvergiert:

**Lemma 2.2.2.** Für  $t$  mit (2.35) und  $E_0 \in L^2(\mathbb{R}^2)$  gilt

$$\|(PU_n P)^n E_0 - (PU_{2n} P)^{2n} E_0\|_{L^2(\mathbb{R}^2)} \xrightarrow{n \rightarrow \infty} 0 \quad (2.37)$$

*Beweis.* Sei  $A = PU_n P$  und  $B = (PU_{2n} P)^2$  mit  $A, B : L^2(\mathbb{R}^2) \rightarrow L^2(\mathbb{R}^2)$ . Dann gilt  $\|A\| = 1 = \|B\|$  mit der Operatornorm  $\|\cdot\|$  und

$$A^n - B^n = \sum_{i=0}^{n-1} B^{n-i-1} (A - B) A^i \quad (2.38)$$

$$\Rightarrow \|A^n - B^n\| \leq n \|A - B\|. \quad (2.39)$$

Außerdem ist  $P(\mathbb{1} - P) = (\mathbb{1} - P)P = 0$ ,  $U_{2n}^2 = U_n$  und deshalb

$$\begin{aligned} A - B &= PU_n P - PU_{2n} P U_{2n} P \\ &= PU_{2n} \mathbb{1} U_{2n} P - PU_{2n} P U_{2n} P \\ &= PU_{2n} (\mathbb{1} - P) U_{2n} P \\ &= P (U_{2n} - \mathbb{1}) (\mathbb{1} - P) (U_{2n} - \mathbb{1}) P \\ \Rightarrow \|A - B\| &\leq \|U_{2n} - \mathbb{1}\|^2 \end{aligned} \quad (2.40)$$

$$\Rightarrow \|A^n - B^n\| \stackrel{(2.39)}{\leq} (\sqrt{n} \|U_{2n} - \mathbb{1}\|)^2. \quad (2.41)$$

Schließlich gilt

$$\begin{aligned} \lim_{n \rightarrow \infty} \sqrt{n} \|(U_{2n} - \mathbb{1}) E\|_{L^2(\mathbb{R}^2)} &= \lim_{n \rightarrow \infty} \sqrt{n} \left\| \left( \exp \left( i \frac{k_z z_0 + k_x x_0}{2n} \right) - 1 \right) \widehat{E} \right\|_{L^2(\mathbb{R}^2)} \\ &= \left\| \lim_{h \rightarrow 0} \frac{\exp(i(k_z z_0 + k_x x_0)h^2) - 1}{\sqrt{2}h} \widehat{E}_0 \right\|_{L^2(\mathbb{R}^2)} \\ &= \left\| 0 \cdot \widehat{E}_0 \right\|_{L^2(\mathbb{R}^2)} \\ &= 0. \end{aligned}$$

Daraus folgt

$$\begin{aligned} \|(PU_n P)^n E_0 - (PU_{2n} P)^{2n} E_0\|_{L^2(\mathbb{R}^2)} &= \|(A^n - B^n) E_0\|_{L^2(\mathbb{R}^2)} \\ &\leq \|A^n - B^n\| \|E_0\|_{L^2(\mathbb{R}^2)} \\ &\stackrel{(2.41)}{\leq} (\sqrt{n} \|U_{2n} - \mathbb{1}\|)^2 \|E_0\|_{L^2(\mathbb{R}^2)} \\ &\xrightarrow{n \rightarrow \infty} 0 \end{aligned}$$



mit der Definition von  $A, B$  und somit (2.37).  $\square$

Sei  $S := \text{int}(\text{supp}(t(\cdot, \cdot, 0))) \subset \mathbb{R}^2$  und  $\Omega \subset S$  eine offene Menge mit  $\partial S \cap \partial \Omega = \emptyset$ . Sei  $H_2 := \{E \in H^2(\mathbb{R}^2) \mid \text{supp}(E) \subset \Omega\}$ , dann gilt  $PH_2 = H_2$  und folgender Satz:

**Satz 2.2.3.** Für  $t$  mit (2.35) und  $E_0 \in H_2$  gilt

$$\|E_n(x + x_0, y) - t(x, y, 0) \cdot E(x + x_0, y, d)\|_{L^2(\Omega)} \xrightarrow{n \rightarrow \infty} 0 \quad (2.42)$$

für  $E(x, y, z) = \mathcal{F}^{-1} \left[ \widehat{E}_0 e^{ik_z z} \right] (x, y)$  und  $x_0 = \frac{d}{\tan(\theta)}$ .

*Beweis.* Im folgenden Beweis wird  $\|\cdot\| := \|\cdot\|_{L^2(\Omega)}$  abgekürzt. Sei  $\tilde{L} := i \left( k - \frac{\partial_x^2 + \partial_y^2}{2k} \right) z_0 + \partial_x x_0$ , dann gilt  $E(x + x_0, y, z_0) = e^{\tilde{L}} E_0$  und  $E_n(\cdot + x_0, \cdot) \stackrel{(2.36)}{=} (Pe^{\tilde{L}/n} P)^n E_0$ . Außerdem ist

$$\begin{aligned} & \|E_n(x + x_0, y) - t(x, y, 0) \cdot E(x + x_0, y, z_0)\| \\ &= \|(Pe^{\tilde{L}/n} P)^n E_0 - Pe^{\tilde{L}} E_0\| \\ &= \|((Pe^{\tilde{L}/n} P)^n - Pe^{\tilde{L}}) E_0\| \\ &= \|P((Pe^{\tilde{L}/n} P)^n - e^{\tilde{L}}) E_0\| \\ &= \|P((Pe^{\tilde{L}/n} P)^n - (e^{\tilde{L}/n})^n) E_0\| \\ &\leq \|((Pe^{\tilde{L}/n} P)^n - (e^{\tilde{L}/n})^n) E_0\| \\ &= \|((Pe^{\tilde{L}/n})^n - (e^{\tilde{L}/n})^n) E_0\| \\ &= \|(A^n - B^n) E_0\| \end{aligned}$$

mit  $A := Pe^{\tilde{L}/n} : L^2(\Omega) \rightarrow L^2(\Omega)$  und  $B := e^{\tilde{L}/n} : L^2(\Omega) \rightarrow L^2(\Omega)$ . Somit gilt  $\|B\| = 1$  und

$$\begin{aligned} & \|E_n(x + x_0, y) - t(x, y, 0) \cdot E(x + x_0, y, z_0)\| \\ &\stackrel{(2.38)}{\leq} \sum_{i=0}^{n-1} \|(A - B)A^i E_0\| \\ &= \frac{1}{n} \sum_{i=0}^{n-1} n \|(A - B)A^i E_0\|. \end{aligned}$$

Es genügt zu zeigen, dass  $f_i(n) := n \|(A - B)A^i E_0\|_{L^2(\Omega)} \rightarrow 0$  gilt, um  $\frac{1}{n} \sum_{i=0}^{n-1} f_i(n) \rightarrow 0$  zu

folgern. Wegen  $E_0 \in H^2(\Omega) \Rightarrow E_i := A^i E_0 \in H^2(\Omega)$  folgt

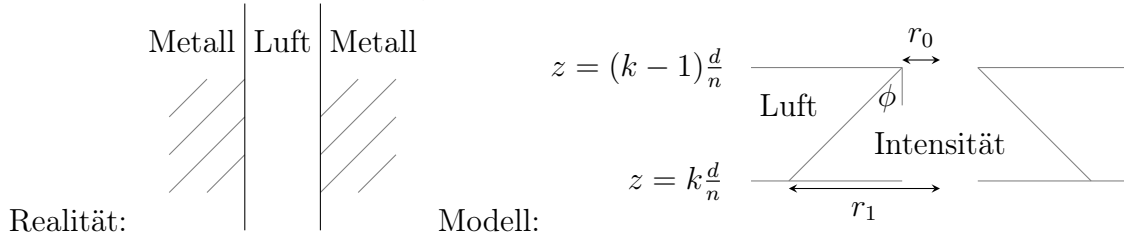
$$\begin{aligned} \lim_{n \rightarrow \infty} n \|(A - B)E_i\| &= \lim_{n \rightarrow \infty} n \|(Pe^{\tilde{L}\frac{1}{n}} - e^{\tilde{L}\frac{1}{n}})E_i\| \\ &= \left\| \lim_{h \rightarrow 0} \frac{(Pe^{\tilde{L}h} - e^{\tilde{L}h})E_i}{h} \right\| \\ &= \left\| \lim_{h \rightarrow 0} (P\tilde{L}e^{\tilde{L}h} - \tilde{L}e^{\tilde{L}h})E_i \right\| \\ &= \|(P\tilde{L} - \tilde{L})E_i\| \end{aligned}$$

mit l'Hospital. In  $\Omega$  gilt  $P\tilde{L} = \tilde{L}$ , folglich gilt  $f_i(n) \rightarrow 0$  und deshalb (2.42).  $\square$

Das bedeutet insbesondere, dass der Blendenstapel gegen die abgeschnittene Freiraumpropagation konvergiert:

$$E_n(x, y) \rightarrow t(x - x_0, y, 0) \cdot E(x, y, d) = t(x, y, d) \cdot E(x, y, d)$$

Beim Blendenstapel macht man jedoch zwischen den Blenden einen Modellfehler: Im Modell ist zwischen den Blenden Luft, in der Realität ist dort teilweise Metall:



Die Intensität, die fälschlicherweise im Metall prognostiziert wird, verschwindet jedoch für  $\Delta z \rightarrow 0 \Leftrightarrow n \rightarrow \infty$ : Für eine rotationsymmetrische Intensität ist der Gesamtfehler über die Blechdicke  $d$  aufintegriert

$$\begin{aligned} \text{error} &= \sum_{k=1}^n \int_{(k-1)\frac{d}{n}}^{k\frac{d}{n}} \int_{r_0}^{r_1} \int_0^{2\pi} I(r, \psi, z) \, d\psi \, dr \, dz \\ &= 2\pi \sum_{k=1}^n \int_{(k-1)\frac{d}{n}}^{k\frac{d}{n}} \int_{r_0}^{r_1} I(r, 0, z) \, r \, dr \, dz \\ &\leq 2\pi \cdot n \cdot \frac{d}{n} \cdot (r_1 - r_0) \cdot C \\ &= 2\pi C d (r_1 - r_0). \end{aligned}$$

Wegen  $r_1 - r_0 = \tan(\phi)\frac{d}{n} \rightarrow 0$  gilt  $\text{error} \rightarrow 0$ . Die Aufweitung der Intensität unter einem

Winkel  $\phi$  lässt sich durch die Kaustikbeschreibung in [YPM06] begründen. Es gilt  $\phi \rightarrow 0$  für  $n \rightarrow \infty$ , also ist  $\tan(\phi)$  insbesondere beschränkt für  $n$  groß genug.

Bei Modell (2.34) sind noch keine Reflexionen vorhanden, diese müssen separat in Kapitel 3 modelliert werden. Außerdem hängt das Feld von den Diskretisierungsschritten  $n$  ab  $\Rightarrow$  Falls  $E_0 \notin H_2$  muss man einen langwierigen Iterationsprozess durchführen, um das Feld im Schlitzspalt zu erhalten.

## 2.2.4 Absorption

Die Modelle in Abschnitt 2.1.1 oder 2.1.2 beruhen bereits auf Strahlenoptik und dementsprechend kann die absorbierte Intensität sehr einfach durch die Fresnelschen Formeln berechnet werden: Man bestimmt den Winkel zwischen Flächennormaler und eintreffendem Strahl und setzt diesen Winkel in  $A_s$  beziehungsweise  $A_p$  ein. Die Modelle in Abschnitt 2.1.3 und 2.1.4 berechnen das elektrische Feld jedoch mit Wellenoptik. Wie man in diesen Fällen das absorbierte Feld berechnen kann, wird im folgenden Abschnitt dargelegt.

### Modellbeschreibung Fresnelabsorption

Die Fresnelschen Formeln sagen aus, dass ein elektrisches Feld, das im Winkel  $\theta = \angle(\mathbf{n}, \mathbf{k})$  auf eine Oberfläche trifft, durch die Formel

$$E_{abs} = a(\theta)E$$

absorbiert wird. Dabei ist

$$\begin{aligned} a_s(\theta) &= \frac{2 \cos \theta}{\cos \theta + n \cos \beta}, \\ a_p(\theta) &= \frac{2 \cos \theta}{n \cos \theta + \cos \beta}, \\ \beta &= \arcsin \left( \frac{\sin(\theta)}{n} \right) \end{aligned}$$

und  $n$  der Brechungsindex im Material. Ein beliebiges elektrisches Feld kann man mithilfe der Fouriertransformation in ebene Wellen zerlegen, die jeweils einen Winkel  $\theta$  mit dem Normalenvektor  $\mathbf{n}$  der Oberfläche einschließen. Dementsprechend gilt

$$\cos(\theta) = \frac{\mathbf{n} \cdot \mathbf{k}}{\|\mathbf{n}\| \|\mathbf{k}\|}$$

mit  $\mathbf{n} = \mathbf{n}(x, y, z)$ . Dementsprechend gilt

$$\begin{aligned}\theta &= \theta(x, y, z, k_x, k_y) \\ &= \arccos \left( \frac{n_1(x, y, z)k_x + n_2(x, y, z)k_y + n_3(x, y, z)k_z(k_x, k_y)}{\sqrt{n_1^2(x, y, z) + n_2^2(x, y, z) + n_3^2(x, y, z)k^2}} \right).\end{aligned}$$

Das absorbierte elektrische Feld kann folglich berechnet werden durch

$$\begin{aligned}E_{abs}(x, y, z) &= \frac{1}{2\pi} \int_{\mathbb{R}^2} a(\theta(x, y, z, k_x, k_y)) \widehat{E}(k_x, k_y, z) e^{i(k_x x + k_y y)} dk_x dk_y, \\ \widehat{E}(k_x, k_y, z) &= \frac{1}{2\pi} \int_{\mathbb{R}^2} E(x, y, z) e^{-i(k_x x + k_y y)} dx dy.\end{aligned}$$

Die zwischen zwei Iterationsschritten auf der Fläche  $A$  absorbierte Leistung ist somit gegeben durch

$$\Delta P = \frac{\varepsilon_0 c}{2} \int_A |E_{abs}(x, y, z)|^2 dA. \quad (2.43)$$

Dieses Modell bietet einen konsistenten Übergang vom Blendenstapel zu Fresnel:

### 2.2.4.1 Übergang zwischen Propagationsmodell und Absorptionsmodell

Das elektrische Feld an festgelegten  $z$ -Ebenen wird mit dem Blendenstapel berechnet. Das Ziel dieses Abschnitts ist es, die Absorption des berechneten Feldes mit Fresnel zu berechnen. Dabei muss getestet werden, ob der Übergang konsistent ist: Wird bei Fresnel und beim Blendenstapel die gleiche Leistung absorbiert?

Die in einer Iteration absorbierte Leistung lässt sich berechnen durch

$$\begin{aligned}\Delta P &= \int_{\Omega_{z_{n-1}}} I(x, y, z_{n-1}) dx dy - \int_{\Omega_{z_n}} I(x, y, z_n) dx dy \\ &= \int_{\Omega_{z_n}^c} I(x, y, z_n) dx dy.\end{aligned} \quad (2.44)$$

Dabei ist  $\Omega_z = \text{supp}(t(\cdot, \cdot, z))$  und  $I$  die Intensität, die aus dem Blendenstapel resultiert.

**Lemma 2.2.4.** Für  $(\Delta P)_1$  aus (2.44) und  $(\Delta P)_2$  aus (2.43) gilt bei einem schwarzen Schnittspalt ( $a = 1 = A$ ) mit Steigungswinkel  $\alpha \leq \frac{\pi}{4}$

$$\frac{(\Delta P)_1}{(\Delta P)_2} \xrightarrow{\Delta z \rightarrow 0} 1 \quad (2.45)$$

und

$$\left| \sum_{z_i} ((\Delta P)_1 - (\Delta P)_2) \right| \xrightarrow{\Delta z \rightarrow 0} 0. \quad (2.46)$$

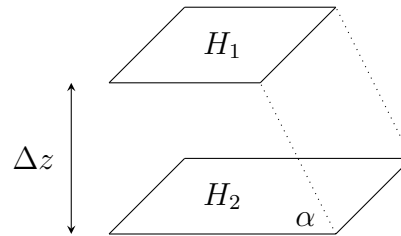
Außerdem muss  $w_0 \ll z_R$ ,  $I(x, y, z_{n-1} + \Delta z) \approx I_0 \frac{w_0^2}{w^2(\Delta z)} \exp\left(-\frac{x^2 + y^2}{w^2(\Delta z)}\right)$ ,  $\tilde{f} \in C^2$  und  $\Delta P \in C^2$  gelten.

*Beweis.* Zuerst zeigen wir (2.45). Lokal lässt sich eine  $C^1$ -Oberfläche durch ihre Tangentialebene approximieren. Seien die beiden Halbebenen  $H_1 := \{(x, y, z_0) \in \mathbb{R}^3 : x \leq -w_0\}$  und  $H_2 := \{(x, y, z_0 + \Delta z) \in \mathbb{R}^3 : x \leq \frac{\Delta z}{\tan(\alpha)} - w_0\}$  gegeben. Sie verlaufen parallel im Abstand  $\Delta z$  voneinander und sind so versetzt, dass ihre Enden im Winkel  $\alpha$  miteinander verbunden werden können. Die schiefe Verbindungsebene lässt sich parametrisieren durch

$$-w_0 \leq x \leq \frac{\Delta z}{\tan(\alpha)} - w_0,$$

$$y \in \mathbb{R},$$

$$z = -\frac{\Delta z}{\cos(\alpha)} - \tan(\alpha)x.$$



Skizze:

Das lässt sich schnell durch die Koordinatentransformation

$$\begin{pmatrix} \tilde{x} \\ \tilde{y} \\ \tilde{z} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \frac{\Delta z}{\tan(\alpha)} - w_0 + \cos(\alpha)x - \sin(\alpha)z \\ y \\ \Delta z + \sin(\alpha)x + \cos(\alpha)z \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \cos(\alpha) & 0 & -\sin(\alpha) \\ 0 & 1 & 0 \\ \sin(\alpha) & 0 & \cos(\alpha) \end{pmatrix} \begin{pmatrix} x \\ y \\ z \end{pmatrix} + \begin{pmatrix} \frac{\Delta z}{\tan(\alpha)} - w_0 \\ 0 \\ \Delta z \end{pmatrix}$$

und  $\tilde{z} = 0$  nachrechnen. Nach Voraussetzung gilt

$$I(x, y, z_{n-1} + \Delta z) \approx I_0 \frac{w_0^2}{w^2(\Delta z)} \exp\left(-\frac{x^2 + y^2}{w^2(\Delta z)}\right) \quad (2.47)$$

$$\begin{aligned} \Rightarrow (\Delta P)_1 &\approx \int_{-\infty}^{\frac{\Delta z}{\tan(\alpha)} - w_0} \int_{-\infty}^{\infty} I(x, y, z_{n-1} + \Delta z) \, dy \, dx - \int_{-\infty}^{-w_0} \int_{-\infty}^{\infty} I(x, y, z_{n-1}) \, dy \, dx \\ &\approx \int_{-\infty}^{\frac{\Delta z}{\tan(\alpha)} - w_0} \int_{-\infty}^{\infty} I_0 \frac{w_0^2}{w^2(\Delta z)} \exp\left(-\frac{x^2 + y^2}{w^2(\Delta z)}\right) \, dy \, dx \\ &\quad - \int_{-\infty}^{-w_0} \int_{-\infty}^{\infty} I_0 \frac{w_0^2}{w_0^2} \exp\left(-\frac{x^2 + y^2}{w_0^2}\right) \, dy \, dx. \end{aligned} \quad (2.48)$$

Sei außerdem

$$\tilde{f}(\Delta z) := \int_{-\infty}^{\frac{\Delta z}{\tan(\alpha)} - w_0} \int_{-\infty}^{\infty} I(x, y, z_{n-1} + \Delta z) \, dy \, dx,$$

dann gilt

$$f(\Delta z) := (\Delta P)_1(\Delta z) = \tilde{f}(\Delta z) - \tilde{f}(0) = \tilde{f}'(0)\Delta z + \mathcal{O}((\Delta z)^2).$$

Daraus folgt

$$\begin{aligned} \tilde{f}'(\Delta z) &= \frac{\pi I_0 w_0^2}{2} \frac{2}{\sqrt{\pi}} \exp\left(-\frac{(w_0 \tan(\alpha) - \Delta z)^2}{w^2(\Delta z) \tan(\alpha)}\right) \left(\frac{1}{w(\Delta z) \tan(\alpha)} + \frac{(w_0 \tan(\alpha) - \Delta z)w'(\Delta z)}{w^2(\Delta z) \tan(\alpha)}\right) \\ \Rightarrow \tilde{f}'(0) &= \sqrt{\pi} I_0 w_0^2 \exp\left(-\frac{w_0^2 \tan(\alpha)}{w_0^2 \tan(\alpha)}\right) \left(\frac{1}{w_0 \tan(\alpha)} + \frac{w_0 \tan(\alpha)w'(0)}{w_0^2 \tan(\alpha)}\right) \\ &= \frac{\sqrt{\pi} I_0 w_0^2}{e} \frac{1}{w_0 \tan(\alpha)} = \frac{\sqrt{\pi} I_0 w_0}{e \tan(\alpha)}. \end{aligned}$$

Somit gilt

$$(\Delta P)_2 = \int_{-w_0}^{\frac{\Delta z}{\tan(\alpha)} - w_0} \int_{-\infty}^{\infty} I\left(x, y, \frac{\Delta z}{\cos(\alpha)} - \tan(\alpha)x\right) dy dx.$$

Außerdem ist  $\tan(\alpha)w_0 \stackrel{\alpha \leq \frac{\pi}{4}}{\leq} w_0 \ll z_R \Rightarrow w(\tan(\alpha)w_0) \approx w_0$  und somit

$$\begin{aligned} g(\Delta z) &:= (\Delta P)_2(\Delta z) = \frac{\Delta z}{\tan(\alpha)} \int_{-\infty}^{\infty} I(-w_0, y, \tan(\alpha)w_0) dy + \mathcal{O}((\Delta z)^2) \\ &\stackrel{(2.47)}{\approx} \frac{\Delta z}{\tan(\alpha)} I_0 \frac{w_0^2 \sqrt{\pi}}{w(\tan(\alpha)w_0)} \exp\left(-\frac{w_0^2}{w^2(\tan(\alpha)w_0)}\right) + \mathcal{O}((\Delta z)^2) \\ &\stackrel{\alpha \leq \pi/4}{\approx} \frac{\Delta z}{\tan(\alpha)} I_0 \frac{w_0^2 \sqrt{\pi}}{w_0} \exp\left(-\frac{w_0^2}{w_0^2}\right) + \mathcal{O}((\Delta z)^2) \\ &= \frac{\Delta z I_0 w_0 \sqrt{\pi}}{\tan(\alpha)e} + \mathcal{O}((\Delta z)^2). \end{aligned}$$

Damit erhält man

$$g(\Delta z) \approx \tilde{f}'(0)\Delta z + \mathcal{O}((\Delta z)^2)$$

und somit

$$\lim_{\Delta z \rightarrow 0} \frac{f(\Delta z)}{g(\Delta z)} = \lim_{\Delta z \rightarrow 0} \frac{\tilde{f}'(0)\Delta z + \mathcal{O}((\Delta z)^2)}{\tilde{f}'(0)\Delta z + \mathcal{O}((\Delta z)^2)} = 1.$$

Das ist äquivalent zu (2.45), aus (2.45) folgern wir nun (2.46). Da  $(\Delta P)_i \xrightarrow{\Delta z \rightarrow 0} 0$  gilt, folgt

mit l'Hospital

$$\lim_{\Delta z \rightarrow 0} \frac{(\Delta P)_1}{(\Delta P)_2} = \lim_{\Delta z \rightarrow 0} \frac{\partial_z (\Delta P)_1}{\partial_z (\Delta P)_2}.$$

Da  $(\Delta P)_i \in C^2$  gilt, folgt

$$\begin{aligned} 1 &\stackrel{(2.45)}{=} \lim_{\Delta z \rightarrow 0} \frac{(\Delta P)_1}{(\Delta P)_2} = \lim_{\Delta z \rightarrow 0} \frac{p_{01} + p_{11}\Delta z + \mathcal{O}((\Delta z)^2)}{p_{02} + p_{12}\Delta z + \mathcal{O}((\Delta z)^2)} \\ &= \lim_{\Delta z \rightarrow 0} \frac{0 + p_{11}\Delta z + \mathcal{O}((\Delta z)^2)}{0 + p_{12}\Delta z + \mathcal{O}((\Delta z)^2)} \\ &= \lim_{\Delta z \rightarrow 0} \frac{\Delta z(p_{11} + \mathcal{O}(\Delta z))}{\Delta z(p_{12} + \mathcal{O}(\Delta z))} \\ &= \frac{p_{11}}{p_{12}}. \end{aligned} \tag{2.49}$$

Dann folgt

$$\begin{aligned} 0 &\leq \left| \sum_{z_i} (\Delta P)_1 - \sum_{z_i} (\Delta P)_2 \right| \\ &= \left| \sum_{i=1}^N (0 + p_{11,z_i}\Delta z + \mathcal{O}((\Delta z)^2)) - \sum_{i=1}^N (0 + p_{12,z_i}\Delta z + \mathcal{O}((\Delta z)^2)) \right| \\ &\stackrel{(2.49)}{=} \sum_{i=1}^N \mathcal{O}((\Delta z)^2) = N\mathcal{O}((\Delta z)^2) \\ &= \frac{d}{\Delta z} \mathcal{O}((\Delta z)^2) = \mathcal{O}(\Delta z) \\ &\xrightarrow{\Delta z \rightarrow 0} 0. \end{aligned}$$

mit  $\Delta z = \frac{d}{N}$ . □

## 2.3 Modellauswahl

Aus den in den letzten Kapiteln vorgestellten Modellen wurde der Blendenstapel als das am meisten erfolgversprechendste ausgewählt. Das hat mehrere Gründe:

- Das sogenannte „Löffelmodell“ hat eine Näherung im Modell, die dazu führt, dass die Leistung bei der Propagation nicht erhalten bleibt. Beim Blendenstapel bleibt die Leistung zwischen den Blenden erhalten, nur die an den Wänden absorbierte Leistung wird in jedem Iterationsschritt abgeschnitten. Da das Löffelmodell aufgrund der Modellan-

nahmen insbesondere für dickere Bleche nur ungenaue Prognosen liefert, wurde dieses Modell wieder verworfen.

- Das Zielscheibenmodell und die Raytracer sind inkohärente Modelle, die Effekte wie Beugung und Interferenz vernachlässigen. Das elektrische Feld beim Blendenstapel berücksichtigt diese Effekte.
- Das Zielscheibenmodell beinhaltet Ansatzfunktionen, die einer gewissen Willkürlichkeit unterzogen sind. Die hier gewählten Ansatzfunktionen beschreiben zwar die Intensität gut, aber da die Parameter nicht direkt gemessen/berechnet werden können, muss eine zeitintensive Optimierung durchgeführt werden, die beim Blendenstapel nicht nötig ist.

Der Blendenstapel näherungsweise die korrekte absorbierte Leistung (wie in Lemma 2.2.4 gezeigt wurde) der ersten Interaktion, jedoch steckt in den Reflexionen noch erheblich Leistung [QMW<sup>+</sup>12]. Deshalb werden in Kapitel 3 noch Reflexionen von den metallischen Wänden hinzugefügt. In Kapitel 3.1 wird außerdem die Simulationszeit stark reduziert, dies wird durch weitere Modellannahmen beziehungsweise Vereinfachungen ermöglicht.



# Reflexionsmodell

Sobald das elektrische Feld, das mit den bisher beschriebenen Methoden propagiert wurde, auf Metall trifft, wird es nach Fresnel teilweise reflektiert. Die Reflexionen werden hierbei jedoch nur für ebene Wellen und auf Strahlenbasis modelliert. Deshalb wird nun das elektrische Feld durch Fouriertransformation in ebene Wellen zu zerlegt:

$$E(\mathbf{x}) = \frac{1}{2\pi} \int_{\mathbb{R}^2} \widehat{E}_0(\mathbf{k}) e^{i\mathbf{k}\mathbf{x}} d^2k$$

Dann wird jede ebene Welle reflektiert, wie es das Reflexionsgesetz<sup>1</sup> beschreibt. Das wiederum bedeutet, dass die ebene Welle, die auf die Ebene  $\mathbf{n}\mathbf{x} = 0$  trifft, nicht mehr in Richtung  $\mathbf{k}$ , sondern in Richtung

$$\mathbf{k}' = R\mathbf{k} \tag{3.1}$$

propagiert mit der Reflexionsmatrix  $R = \mathbb{1} - 2\mathbf{n} \cdot \mathbf{n}^T$ . Fügt man diese Erkenntnis mit der Annahme einer Totalreflexion in das Propagationsintegral ein, folgt daraus für eine ebene Welle

$$E_{\text{ref}}(\mathbf{x}) = E_{\text{frei}}(R \cdot \mathbf{x}).$$

Dieses Resultat lässt sich verallgemeinern auf partielle Reflexion und eine allgemeine Ebenengleichung  $\mathbf{n}\mathbf{x} = d$ :

$$E_{\text{ref}}(\mathbf{x}) = r \cdot E_{\text{frei}}(R \cdot \mathbf{x} + 2d\mathbf{n}). \tag{3.2}$$

mit dem Reflexionsgrad  $r$  aus den Fresnelschen Formeln. Man kann also das reflektierte Feld aus der Freiraumpropagation berechnen.

Den reflektierten Punkt kann man durch die Gerade  $g : \mathbf{y} = \mathbf{x} + s \cdot \mathbf{n}$  berechnen. Dazu wird die Geradengleichung in die Ebenengleichung  $E : \mathbf{n}^T \cdot \mathbf{y} = \mathbf{n}^T \cdot \mathbf{x}_0 =: d$  eingesetzt, um

---

<sup>1</sup>Siehe Anhang A.2.5 auf Seite 123

$s = \mathbf{n}^T \cdot (\mathbf{x}_0 - \mathbf{x})$  beim Schnittpunkt zu erhalten. Damit ist der reflektierte Punkt

$$\begin{aligned}
 \mathbf{x}' &= \mathbf{x} + 2s\mathbf{n} \\
 &= \mathbf{x} + 2(\mathbf{n}^T(\mathbf{x}_0 - \mathbf{x}))\mathbf{n} \\
 &= \mathbf{x} + 2\mathbf{n}(\mathbf{n}^T(\mathbf{x}_0 - \mathbf{x})) \\
 &= \mathbf{x} + 2(\mathbf{n}\mathbf{n}^T)(\mathbf{x}_0 - \mathbf{x}) \\
 &= (\mathbb{1} - 2\mathbf{n}\mathbf{n}^T)\mathbf{x} + 2\mathbf{n}\mathbf{n}^T\mathbf{x}_0 \\
 &= (\mathbb{1} - 2\mathbf{n}\mathbf{n}^T)\mathbf{x} + 2d\mathbf{n}.
 \end{aligned}$$

Den Reflexionsgrad kann man folgendermaßen approximieren:

$$E(\mathbf{x}) = \frac{1}{2\pi} \int_{\mathbb{R}^2} r(\mathbf{k}) \widehat{E}_0(\mathbf{k}) e^{i\mathbf{k}R\mathbf{x}} d^2k \quad (3.3)$$

$$\approx \frac{r(\mathbf{k}_0)}{2\pi} \int_{\mathbb{R}^2} \widehat{E}_0(\mathbf{k}) e^{i\mathbf{k}R\mathbf{x}} d^2k \quad (3.4)$$

$$= r(\mathbf{k}_0) E_f(R\mathbf{x}) \quad (3.5)$$

mit der Freiraumpropagation  $E_f(x, y, z) = \mathcal{F}^{-1} \left[ \widehat{E}_0 e^{ik_z z} \right] (x, y)$  und einer genäherten Ausbreitungsrichtung  $\mathbf{k}_0$  des Strahls. Diese Richtung ist durch den Poynting-Vektor gegeben, der senkrecht auf der Phasenfront steht [Kar04, S. 28]. Daher wurde

$$\mathbf{k}_0 = \nabla \arg(E(\mathbf{x}_0))$$

gewählt mit dem Elementmittelpunkt  $\mathbf{x}_0$  und

$$r(\mathbf{k}) = r(\Theta(\mathbf{k})) = r \left( \arccos \left( \frac{\mathbf{n}\mathbf{k}}{\|\mathbf{k}\|_{\mathbb{R}^3}} \right) \right).$$

Diese Näherung ermöglicht eine starken Reduktion der Simulationsdauer. Dass man eine beliebige  $C^1$ -Oberfläche lokal durch eine Ebene approximieren kann, ist durchaus nicht verwunderlich und bereits in [CK12, S. 64] wurde die Idee genannt, dass man das reflektierte elektrische Feld lokal durch Fouriertransformation und (3.1) approximieren kann.

Zum Beispiel resultiert das Simulationsergebnis in Abbildung 3.1 aus den hier dargelegten Ideen. Dieses Bild entspricht bis auf Näherung (3.5) der analytischen Lösung in [Tie11, S. 47], diese Näherung wird in Kapitel 3.3 überprüft. Somit ist die hier dargestellte Methode eine deutliche Verbesserung der in [Tie11] dargestellten numerischen Methoden, da der Rechenaufwand deutlich geringer ist und das Ergebnis deutlich genauer.

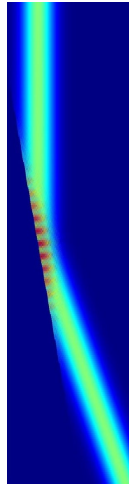


Abbildung 3.1: Reflexion an einer schiefen Ebene

### 3.1 Gesamtmodell

Der Blendenstapel wird nun um die Reflexionen von den Seitenwänden erweitert. Das Feld wird dazu in jeder  $z$ -Ebene zerlegt:

$$E_z = \sum_{i=0}^n E_i = \sum_{i=0}^n E \cdot \chi_{\Omega_i} \quad (3.6)$$

mit der Projektion  $\Omega_i$  des  $i$ -ten Elements der Diskretisierung in die  $xy$ -Ebene und  $\Omega_0 := (\Omega_1 \cup \dots \cup \Omega_n)^c$ . Dabei werden nur die  $n$  Elemente betrachtet, die zwischen  $z$  und  $z + \Delta z$  liegen. In  $\Omega_0$  nutzt man die Freiraumpropagation, in den restlichen Gebieten wird das Feld entsprechend reflektiert. Das propagierte Feld lässt sich somit berechnen durch

$$\begin{aligned} \tilde{E}_l(x, y, z) &= \mathcal{F}^{-1}[\mathcal{F}[E \cdot \chi_{\Omega_l}]e^{ik_z \Delta z}](x, y) \\ E_{z+\Delta z}(x, y) &= \sum_{l=0}^n r_l \tilde{E}_l \left( \tilde{R}_l(x, y, z + \Delta z)^T \right) \cdot t(x, y, z + \Delta z) \end{aligned} \quad (3.7)$$

mit  $r_l := r \left( \arccos \left( \frac{\mathbf{n}_l \mathbf{k}_l}{\|\mathbf{k}_l\|_{\mathbb{R}^3}} \right) \right)$ ,  $\tilde{R}_0 := \mathbb{1}$  und  $\tilde{R}_l \mathbf{x} := (\mathbb{1} - 2\mathbf{n}_l^T \mathbf{n}_l) \mathbf{x} + d_l \mathbf{n}_l$  für  $1 \leq l \leq n$ .

Dieses Modell berücksichtigt alle kohärenten Effekte: Beugung, Interferenz, die Phaseninformation der Reflexionskoeffizienten. . . Der einzige Nachteil, den es mit sich bringt, ist die sehr zeitintensive Simulation.

Um die Simulationszeit zu minimieren, werden nun die Beugungseffekte an den Kanten der

Spiegel vernachlässigt. Nach [PCWL22] sind die Beugungseffekte nur Korrekturterme des Terms führender Ordnung. Außerdem sind in der Realität die Beugungseffekte geringer, da die Oberfläche glatter ( $C^1$ ) ist als die Diskretisierung (im Allgemeinen nur  $C^0$ ). Schlussendlich wurde in Satz 2.42 bewiesen, dass die Beugungseffekte beim Blendenstapel für eine infinitesimale Diskretisierung verschwinden.

Dadurch und durch Näherung 3.5 kann das elektrische Feld nun komplett aus der Freiraumpropagation berechnet werden und die Simulation einer Reflexion dauert genau so lange wie die Berechnung der Freiraumpropagation. Um diesen Vorteil ausnutzen zu können, wird noch eine letzte Modifikation im Algorithmus vorgenommen: Die Reflexion wird an jedem Spiegel separat berechnet und am Schluss werden alle Einzelfelder überlagert. Das ersetzt die Überlagerung aller Felder in Schritt (3.7) und resultiert in dem in Kapitel 3.1.1 beschriebenen Verfahren zur Berechnung des elektrischen Feldes im Schlitzspalt.

### 3.1.1 Algorithmus

Den finalen Algorithmus erhält man, indem die genannten Ideen noch auf ein vektorielles elektrisches Feld angewendet werden. Um die Rechnung zu vereinfachen, wird im folgenden Text  $\mathbf{E} = E \cdot \mathbf{e}_i$  betrachtet mit einem beliebigen Einheitsvektor  $\mathbf{e}_i$  und einem skalaren Feld  $E$ . Außerdem wird die Freiraumpropagation, wie bereits in (3.6) angedeutet wurde, in Einzelteile zerlegt. Seien dazu  $\{(x_i, y_i, z_i) \in \mathbb{R}^3 \mid i = 1, 2, 3\}$  die Eckpunkte eines Dreiecks  $T$  der Triangulierung des Schlitzspalts und sei

$$PT = \{(x, y) \in \mathbb{R}^2 \mid \exists z \in \mathbb{R} \text{ mit } (x, y, z) \in T\}$$

die Projektion dieses Dreiecks in eine  $z$ -Ebene. Dann ist der Streifen  $\{E(x, y, z) \mid (x, y) \in PT\}$  das elektrische Feld, das vom Dreieck  $T$  reflektiert wird. Für diesen Streifen wird das reflektierte Feld über (3.2) berechnet. Eine Skizze dieses Vorgehens ist in Abbildung 3.2 zu sehen. Die Freiraumpropagation (gelb) wird in Streifen zerlegt (rot). Jeder Streifen wird mit geometrischer Optik reflektiert: Trifft er auf einen reflektierendes Oberflächenelement (blau), so wird er reflektiert (grün). Dieser Vorgang lässt sich iterativ wiederholen (lila). Genauer gesagt fängt man hinten am Punkt  $\mathbf{x}_0$  auf der Schlitzspaltoberfläche an und führt dann folgende Schritte aus, um  $N$  Reflexionen zu berechnen:

1. Für jedes Dreieck  $T_{i_N}$  der Triangulation berechne die Reflexion  $\tilde{R}_{i_N} \mathbf{x}_0$  des Punktes  $\mathbf{x}_0$  an dem Dreieck
2. Für jedes Dreieck  $T_{i_{N-1}}$  der Triangulation berechne die Reflexion  $\tilde{R}_{i_{N-1}} \tilde{R}_{i_N} \mathbf{x}_0$  des Punk-

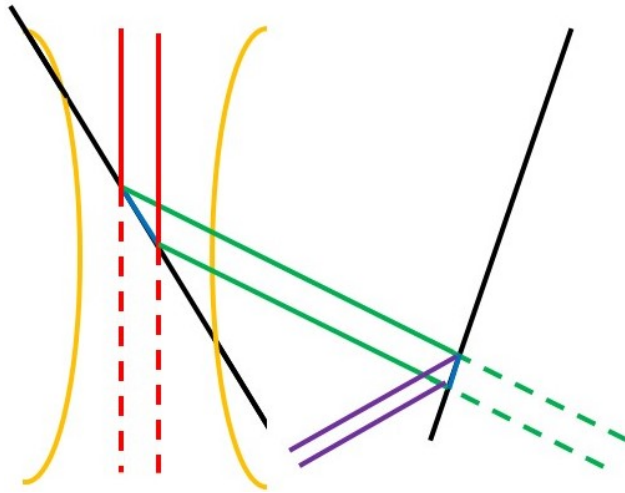


Abbildung 3.2: Schematische Darstellung des Reflexionsmodells

tes  $\tilde{R}_{i_N} \mathbf{x}_0$  an dem Dreieck

3. Schritt 2 wiederholt man so oft, bis man  $N$  Reflexionen  $\tilde{R}_{i_1} \dots \tilde{R}_{i_N} \mathbf{x}_0$  berechnet hat
4. Falls die  $(x, y)$ -Koordinate von  $\mathbf{x}_{end} := \tilde{R}_{i_1} \dots \tilde{R}_{i_N} \mathbf{x}_0$  in  $PT_{i_1}$  liegt, trifft  $E_{frei}(\mathbf{x}_{end})$  nach  $N$  Reflexionen in  $\mathbf{x}_0$  auf
5. Für diese Reflexionen, die nach Raytracinglogik in Punkt  $\mathbf{x}_0$  auftreffen, wird folgende Rechnung durchgeführt:
  - (a) Sei  $\mathbf{k}_{start} = \frac{\nabla arg(E)}{\|\nabla arg(E)\|_{\mathbb{R}^3}}|_{\mathbf{x}_{end}}$  der normierte Poynting-Vektor, dann lässt sich der Poynting-Vektor nach  $n$  Reflexionen durch  $\mathbf{k}_n = R_{i_n} \dots R_{i_1} \mathbf{k}_{start}$  berechnen.
  - (b) Mit  $\theta_n = \angle(\mathbf{k}_n, \mathbf{n}_n)$  kann dann der Absorptions- und Reflexionsgradgrad an dem jeweiligen Oberflächenelement berechnet werden
  - (c) An jedem Dreieck  $T_n$  der Triangulierung wird das einfallende Feld  $\mathbf{E}_{n-1}$  in einen  $s$ -polarisierten Teil  $\mathbf{E}_{s,n-1}$  senkrecht zu  $\mathbf{k}_{n-1}, \mathbf{n}_n$  und einen  $p$ -polarisierten Teil  $\mathbf{E}_{p,n-1}$  senkrecht zu  $\mathbf{E}_{s,n-1}$  zerlegt
  - (d) Iterativ wird das Feld an jedem Spiegel reflektiert durch
$$\mathbf{E}_n(\mathbf{x}) = (\mathbb{1} - 2\mathbf{n}_n^T \mathbf{n}_n) \cdot \left( r_p(\theta_n) \mathbf{E}_{p,n-1}(\tilde{R}_n \mathbf{x}) + r_s(\theta_n) \mathbf{E}_{s,n-1}(\tilde{R}_n \mathbf{x}) \right)$$

Abschließend müssen nur noch alle Reflexionen aufsummiert werden:

- Alle Felder, die direkt in  $\mathbf{x}_0$  auftreffen
- Alle Felder, die nach einer Reflexion in  $\mathbf{x}_0$  auftreffen
- ...

- Alle Felder, die nach  $N$  Reflexionen in  $\mathbf{x}_0$  auftreffen

Das ergibt das Modellfeld an jedem Punkt  $\mathbf{x}_0$ . Insgesamt ergeben sich folgende Eigenschaften des Modells:

- Die wellenoptischen Eigenschaften des elektrischen Feldes wie zum Beispiel die Phase werden berücksichtigt. Insbesondere werden Interferenzeffekte und Phasensprünge durch die komplexen Reflexionskoeffizienten simuliert.
- Das Modell ist exakt, falls keine Hindernisse vorhanden sind (Freiraumpropagation)
- Bei der Interaktion mit dem Werkstück wurden verschiedene Näherungen gemacht, zum Beispiel (3.5), um die Simulationszeit im Vergleich zum Blendenstapel stark zu reduzieren: Die Simulation dauert mit der ersten Reflexion nur noch 30 Minuten
- Offensichtliche Abschattung, Reflexion und Absorption wurde berücksichtigt und unter bestimmten Modellannahmen simuliert

## 3.2 Simulation des Schnittspalts

In diesem Kapitel wird das in Kapitel 3.1 beschriebene Modell auf verschiedene Szenarien angewendet: Zuerst wurde

$$\mathbf{E}_{frei}(x, y, z) = \frac{1}{z - iz_R} \exp\left(-\frac{x^2 + y^2}{z - iz_R}\right) \mathbf{e}_x \quad (3.8)$$

mit  $z_R = \frac{w_0^2 k}{2}$  auf einen Schnittspalt angewendet, der aus Halbkreisen besteht, deren Radii sich linear von  $100 \mu\text{m}$  bei  $z = 0 \text{ mm}$  auf  $50 \mu\text{m}$  bei  $z = 10 \text{ mm}$  verringern (siehe Abbildung 3.3). Auf der Schnittspaltoberfläche bei  $z = 0$  wird am meisten Intensität absorbiert, aber auch das Maximum bei der Strahlposition im Schnittspalt ist zu sehen. Außerdem sind die Interferenzeffekte klar erkennbar, die dadurch zustande kommen, dass alle Reflexionen kohärent überlagert werden. Das verpixelte Muster ist hierbei kein numerischer Fehler, sondern kommt alleine durch die Diskretisierung des Schnittspalts zustande. Man kann diese Interferenzeffekte so fein auflösen ( $\Delta x \sim 1 \mu\text{m}$ ), dass sich ein glattes Muster ergibt. Das ist hier jedoch nicht das Ziel, es sollen eher qualitative Schlussfolgerungen aus dem Absorptionmuster herausgelesen werden. Dann wurde (3.8) mit  $z_R = \frac{w_0^2 k}{2M^2}$  und  $M^2 = 13.7$  auf einen Schnittspalt angewendet, der aus eingefrorenen Schnitten entstand. Das ist in Abbildung 3.4 und 3.5 zu sehen. Die Schneidparameter bei Abbildung 3.4 sind folgende: 10 mm Edelstahl, lineare Polarisation in Schneidrichtung, Fokuslage  $-7 \text{ mm}$ , Gasdruck 6 bar ( $N_2$ , Düse EAU100), Leistung

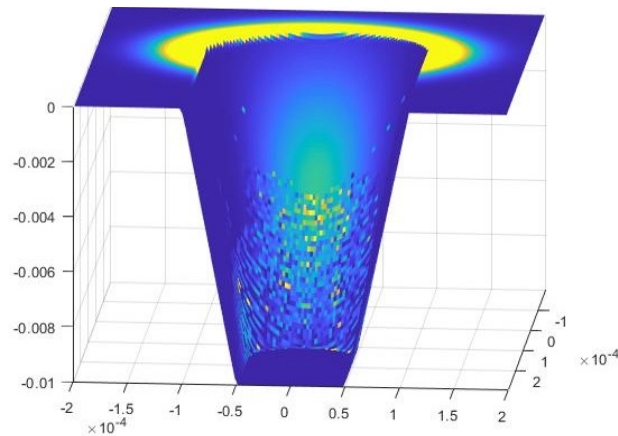


Abbildung 3.3:  $TEM_{00}$ -Mode, die auf einen Schnittspalt gestrahlt wird, der durch das Halbkreismodell entstand

4 kW. Der Vorschub variiert bei L82 bis L89, es wurde  $1, 1.3, 1.5, 1.7, 1.9$  und  $2 \frac{\text{m}}{\text{min}}$  verwendet. Der Nachlauf bei diesen Proben erhöht sich mit steigendem Vorschub: Von  $0,7 \frac{\text{m}}{\text{min}}$  bei L82 zu  $2,1 \frac{\text{m}}{\text{min}}$  bei L89. Da die Strahlposition jeweils in konstantem Abstand vom Halbkreis bei  $z = 0 \text{ mm}$  festgelegt wurde, sieht es so aus, als ob der Strahl die Schneidfront „hochwandert“: Ist das Intensitätsmaximum bei L83 noch ziemlich weit unten bei  $z = -10 \text{ mm}$ , so sieht man ein Maximum bei L88 weiter oben im Schnittspalt (ca.  $z = -2 \text{ mm}$ ). Auch bei diesen Geometrien sind die Interferenzeffekte gut sichtbar, die von den Reflexionen herrühren. Schließlich wurden noch 3 TEM-Moden überlagert: Die  $TEM_{00}, TEM_{20}$  und  $TEM_{02}$ -Moden

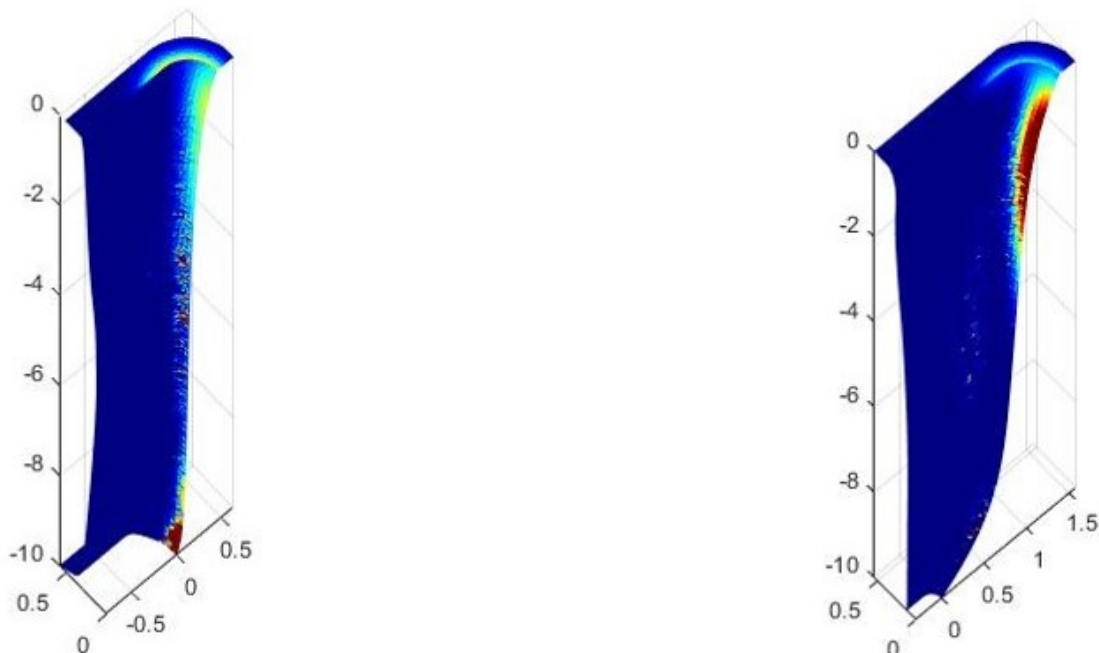


Abbildung 3.4: Probe L82 (links) und Probe L89 (rechts)

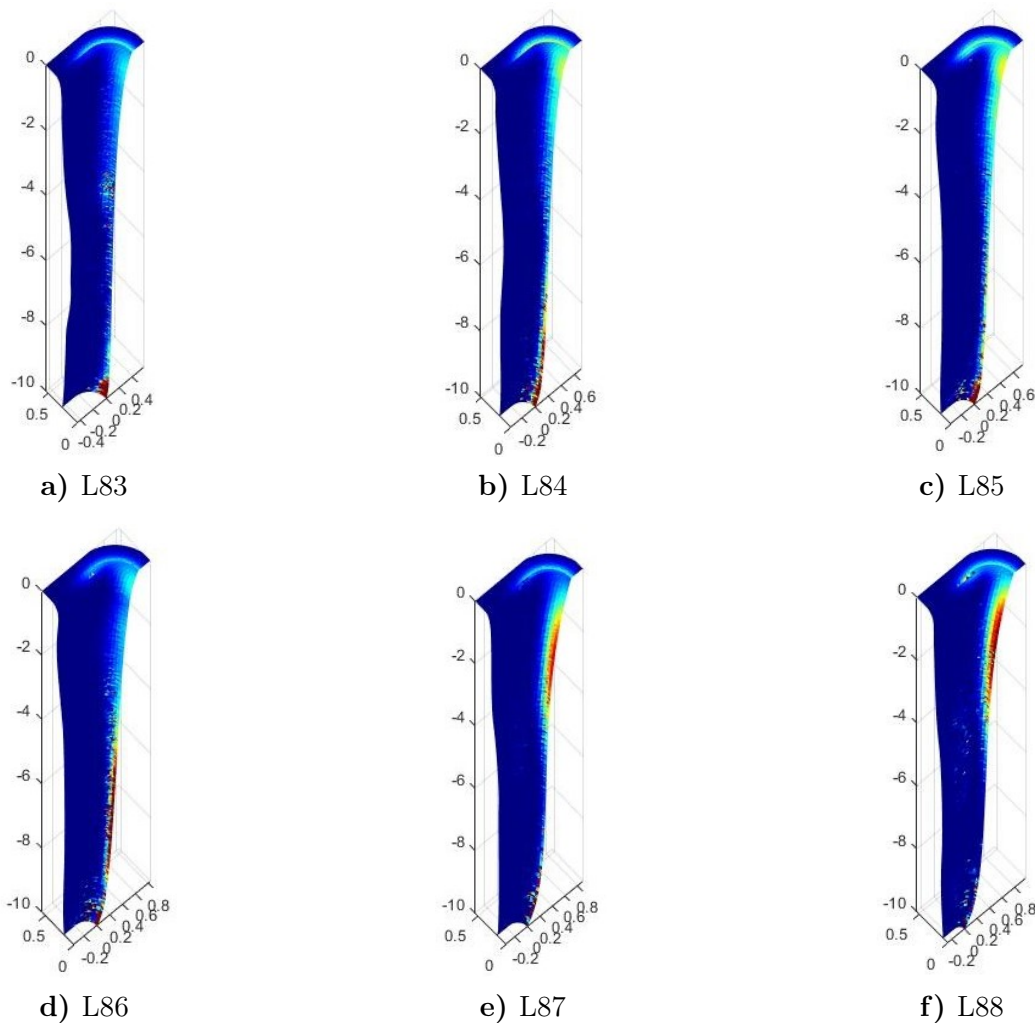


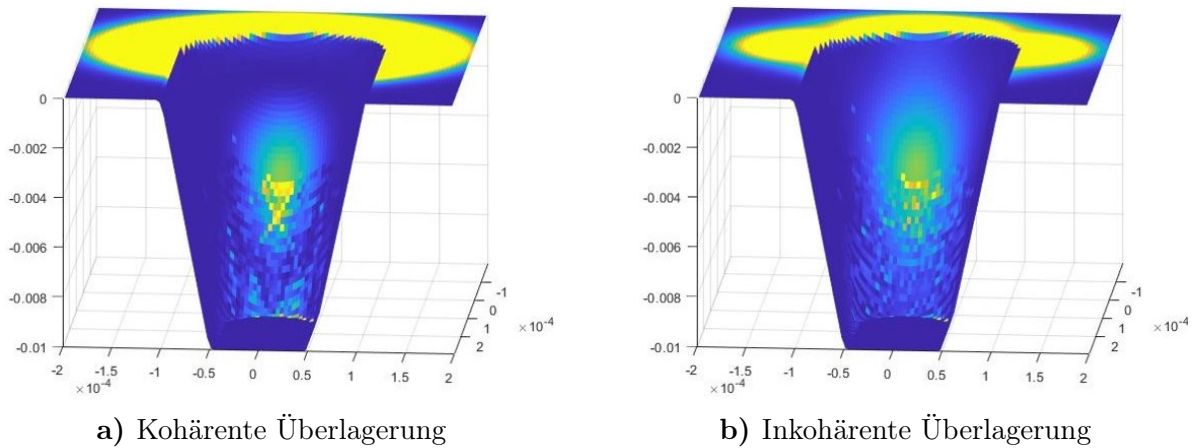
Abbildung 3.5: Schneidproben L83 bis L88

wurden einmal kohärent und einmal inkohärent überlagert, das ist in Abbildung 3.6 zu sehen. Es ergeben sich unterschiedliche Absorptionsmuster: So ist in Abbildung 3.6a eine ringförmige Struktur zu sehen, diese kommt von der ringförmigen Verteilung des elektrischen Feldes an dieser Stelle. Es fällt auch auf, dass die Interferenzeffekte in Abbildung 3.6a und 3.6b stark reduziert sind im Vergleich zu Abbildung 3.3. Dieser Effekt ist durch die statistische Auslöschung der Intensität durch kohärente Überlagerung erklärbar und verstärkt sich noch weiter, wenn man  $N \gg 3$  Moden nutzt (siehe z.B. Abbildung 3.8c).

### 3.3 Modellvalidierung

Im folgenden Abschnitt soll es vor allem darum gehen die Modellannahmen zu überprüfen, die in Kapitel 3.1.1 gemacht wurden: Für welche Anwendungsfälle liefert das Modell besonders



Abbildung 3.6: Überlagerung der Moden  $TEM_{00}$ ,  $TEM_{20}$  und  $TEM_{02}$ 

gute Ergebnisse? Für welche Geometrien sind die Näherungen ungeeignet?

### 3.3.1 Hinreichende Kriterien

Wie bereits erwähnt wurden im finalen wellenoptischen Modell die Beugungseffekte vernachlässigt, die durch die Abschattung im Schlitzspalt entstehen. Deshalb soll in den folgenden Abschnitten auf drei unterschiedliche Weisen überprüft werden, unter welchen hinreichenden Kriterien es eine gute Näherung ist die Beugungseffekte zu vernachlässigen.

#### 3.3.1.1 Steigungswinkel der Geometrie

Für einen schwarzen Schlitzspalt (Absorptionsgrad  $A = 100\%$ ) wird im wellenoptischen Modell die Freiraumpropagation des Feldes im Schlitzspalt absorbiert. Dies kann dazu führen, dass auf der Schlitzspaltoberfläche eine zu hohe Intensität prognostiziert wird. Ein Kriterium zur Überprüfung der Leistungserhaltung lautet

$$\int_{\mathbb{R}^2} I(x, y, z(x, y)) \, dx \, dy = \int_{\mathbb{R}^2} I(x, y, 0) \, dx \, dy \quad (3.9)$$

mit der Metalloberfläche  $z(x, y)$ . Es sei angemerkt, dass hiermit der betragsmäßig kleinste  $z$ -Wert gemeint ist. Bei Überhängen wird also die Intensität nur an der Stelle ausgewertet, an der der Laser zum ersten Mal auftrifft. Dieser Teil ist in Abbildung 3.7 in blau angedeutet und kann durch eine Funktion  $z_1(x, y)$  dargestellt werden. Der rote Teil, auf dem durch Abschattungseffekte kein Laserlicht absorbiert wird, kann durch eine andere Funktion

$z_2(x, y)$  beschrieben werden. Für eine TEM-Mode gilt  $I(x, y, z) = I\left(x \frac{w_0}{w(z)}, y \frac{w_0}{w(z)}\right) \frac{w_0^2}{w^2(z)}$  mit

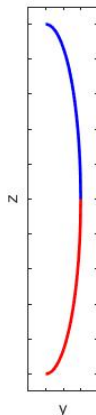


Abbildung 3.7: Ein Überhang muss durch mehrere Funktionen  $z(x, y)$  dargestellt werden.

dem Strahlradius  $w(z) = w_0 \sqrt{1 + \left(\frac{z}{z_R}\right)^2}$  und der Rayleighlänge  $z_R = \frac{w_0^2 k}{2M^2}$ . Setzt man diese Intensitätsverteilung in das eben genannte Kriterium ein, erhält man, dass

$$\tan(\theta) \ll \frac{z_R}{w_0} = \frac{w_0 k}{2M^2} \quad (3.10)$$

ein hinreichendes Kriterium für die Leistungserhaltung ist. Dabei ist  $\theta$  der Winkel zwischen dem Normalenvektor auf der Metalloberfläche und der  $z$ -Achse. Das bedeutet: Wenn man relativ flache Geometrien<sup>2</sup> betrachtet oder wenn der Strahl eine Beugungsmaßzahl  $M^2 \approx 1$  hat, dann ist die Leistungserhaltung erfüllt und die Freiraumpropagation eine gute Näherung der Realität. Wenn man sehr steile Geometrien betrachtet oder einen Strahl mit  $M^2 \gg 1$  betrachtet, ist  $\tan(\theta) \ll \frac{z_R}{w_0}$  zwar nicht erfüllt, aber über die Leistungserhaltung lässt sich keine Aussage machen. In diesen Fällen kann man (3.9) numerisch überprüfen.

Zum Beispiel gilt für einen TEM<sub>00</sub>-Strahl mit  $w_0 = 100 \mu\text{m}$  und  $\lambda = 1 \mu\text{m}$ , dass  $\frac{z_R}{w_0} \approx 305$  ist. Dementsprechend ist für  $\tan(\theta) \ll 305 \Leftrightarrow \theta \leq 89,5^\circ$  die Leistungserhaltung erfüllt und die Näherung gerechtfertigt. Somit kann das Modell auf fast jede Geometrie angewendet werden, falls der Strahl paraxial genug ist (wie zum Beispiel bei TEM<sub>00</sub>). Nimmt man einen gaußförmigen Strahl mit  $M^2 = 10$  und den gerade genannten Parametern, muss bereits  $\theta \leq 72^\circ \dots 88^\circ$  (je nachdem, wie eng man  $\ll$  betrachten möchte) gelten. Zum Beispiel in der numerischen Simulation mit Probe L89 (zu sehen in Abbildung 3.4), die einen durchschnittlichen Steigungswinkel von  $82^\circ$  hat, war die Leistungserhaltung vorhanden. Die Bedingung

<sup>2</sup>Das heißt die Bedingung (3.10) muss global für den kompletten Schnittspalt gelten. Genauer gesagt gilt: Wenn (3.10) bis zu einer bestimmten  $z$ -Ebene erfüllt ist, dass folgt automatisch die Leistungserhaltung im Modell bis zu dieser  $z$ -Ebene.

$\tan(\theta) \ll \frac{z_R}{w_0}$  ist wie gesagt eine hinreichende Bedingung und das Modell ist für einen größeren Bereich anwendbar.

### 3.3.1.2 Krümmung der Geometrie

Eine Geometrie, bei der das Modell auch richtige Prognosen macht, ist eine schiefe Ebene: Bei der Herleitung der Fresnelschen Formeln sieht man, dass sich das Gesamtfeld für eine ebene Welle  $E_{\text{in}}(\mathbf{x}) = e^{ik\mathbf{x}}$  schreiben lässt als  $E_{\text{ges}}(\mathbf{x}) = E_{\text{in}}(\mathbf{x}) + r \cdot E_{\text{in}}(R\mathbf{x})$  mit einer Reflexionsmatrix  $R$ . Da das Feld stetig von der reflektierenden Geometrie abhängt, wird das frei propagierte Feld auch dann korrekt prognostiziert, wenn die Geometrie nur eine geringe Krümmung aufweist und dementsprechend einer schiefen Ebene ähnelt.

Das wurde zum Beispiel in [KS22a] bewiesen: Im Fall einer senkrechten Wand lässt sich das Gesamtfeld schreiben als  $E_{\text{ges}}(\mathbf{x}) = E_{\text{frei}}(\mathbf{x}) + E_{\text{ref}}(\mathbf{x})$ . Selbst mit Beugungseffekten wird hier zur Freiraumpropagation nur ein reflektiertes Feld addiert und die Modellannahmen sind gerechtfertigt. Somit kann man die Modellannahmen analytisch begründen und das Modell mit der exakten Lösung vergleichen, wenn man den Laser auf eine senkrechte Wand strahlt. Mehr Details zu dieser Veröffentlichung sind in Kapitel 4.2 zu finden.

Falls die Geometrie also eine geringe Krümmung aufweist, ist sowohl die Projektion in den Schnittspalt als auch der Streifenansatz gerechtfertigt. Auch die geringe Krümmung ist eine hinreichende Bedingung und das Modell ist auf eine größere Klasse von Geometrien anwendbar. Wenn jedoch die Krümmung der Geometrie klein ist, hat man einen garantierten Erfolg des Modells.

### 3.3.1.3 Anzahl der Moden im Strahl

Ein drittes Kriterium, ob das Vernachlässigen der Beugungseffekte eine gute Näherung ist oder nicht, ist die Anzahl der Moden im Laserstrahl: Führt man eine wellenoptische Simulation mit Beugungseffekten in einem schwarzen Schnittspalt aus, ergibt sich die Abbildung 3.8. Man sieht, dass bei einer einzelnen Mode die Beugungseffekte noch klar herausstechen. Bei einer inkohärenten Überlagerung von 328 Moden hat jede Mode jedoch ein eigenes Beugungsmuster und die Überlagerung führt zu einer Weichzeichnung der Beugungseffekte: Die Intensitätsverteilung in Abbildung 3.8c ist viel glatter und gleichmäßiger, somit ist auch die Projektion in Abbildung 3.8d viel näher an der Realität als die Intensitäten in Abbildung 3.8a und 3.8b.

Insgesamt gilt: Je mehr Moden im Strahl vorhanden sind, desto geringer ist der Einfluss der

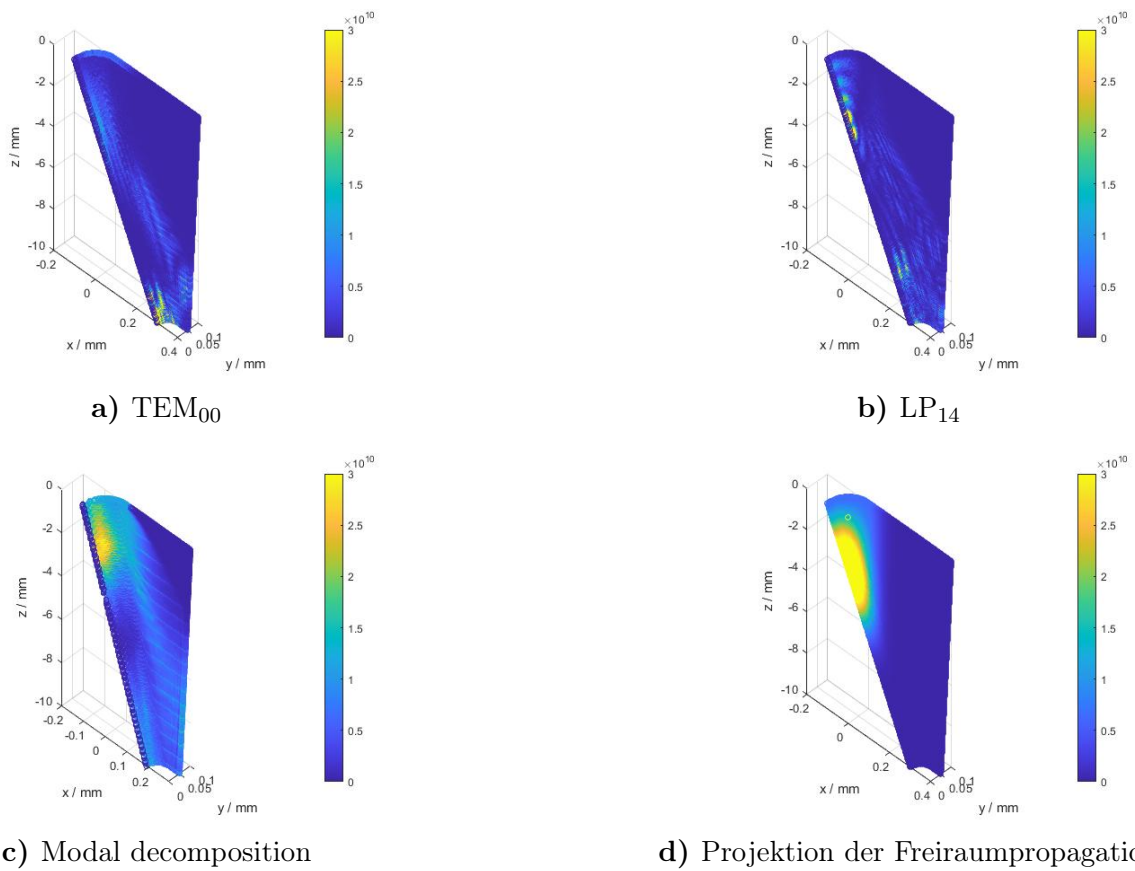


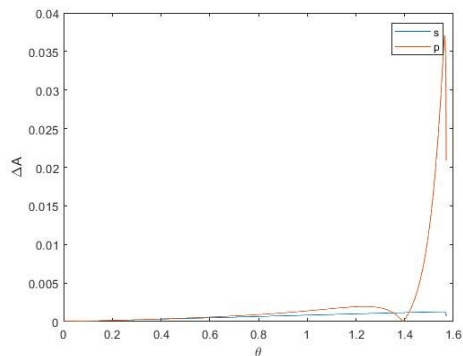
Abbildung 3.8: Wellenoptische Simulation in einem schwarzen Schlitzspalt

kohärenten Effekte in der Simulation. Viele Effekte mitteln (destruktive Interferenz bei kohärenter Überlagerung) bzw. glätten (bei inkohärenter Überlagerung) sich raus und dementsprechend ist die Vernachlässigung der Beugungseffekte in vielen Fällen eine gute Näherung der Realität.

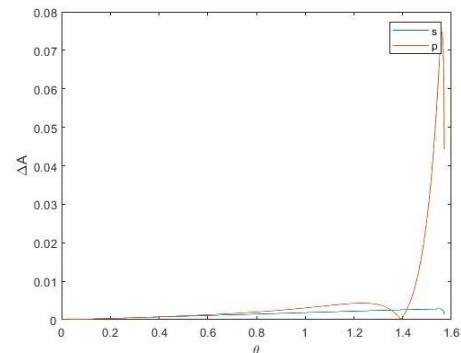
### 3.3.2 Reflexionsgrad

Um den Reflexionsgrad nicht für jede ebene Welle einzeln auszurechnen, wird der Reflexionsgrad durch den Winkel zwischen Normalenvektor der Oberfläche und der  $z$ -Achse (vor der Reflexion) beziehungsweise der neuen Propagationsrichtung (nach der Reflexion) berechnet. Fokussiert man sich auf den Strahl vor der Reflexion, besteht er aus vielen ebenen Wellen, welche jeweils eine eigene Ausbreitungsrichtung haben. Jedoch zeigen alle Ausbreitungsrichtungen  $\mathbf{k}$  näherungsweise in  $z$ -Richtung (paraxiale Näherung). Die Näherung, dass man jeder ebenen Welle den gleichen Absorptions-/Reflexionsgrad zuweist, wird umso besser, je paraxialer ein Strahl ist. Für große Strahlradien  $w_0$ , große Rayleighlängen  $z_R$  und/oder kleine Strahlqualitäten  $M^2$  ist diese Näherung besonders gut.

Die Differenz zwischen Modell und exakter wellenoptischer Rechnung hängt wieder vom Steigungswinkel der Geometrie ab (Abbildung 3.9). Auch hier gilt: Je flacher die Geometrie und je



**a)** TEM<sub>00</sub>-Mode ( $M^2 = 1$ ) mit  $w_0 = 100 \mu\text{m}$



**b)** Gaußförmige Verteilung mit  $w_0 = 100 \mu\text{m}$  und  $M^2 = 10$

Abbildung 3.9: Differenz zwischen exaktem und genähertem Absorptionsgrad für verschiedene Steigungswinkel  $\theta$  und verschiedene Strahlqualitäten  $M^2$

paraxialer der Strahl, desto besser ist die Näherung. Wahrscheinlich ist jedoch selbst die maximale Differenz von weniger als 8% gering genug, um diese Vereinfachung für eine beliebige Geometrie zu rechtfertigen.

### 3.3.2.1 Analytische Rechnung zu Näherung (3.5)

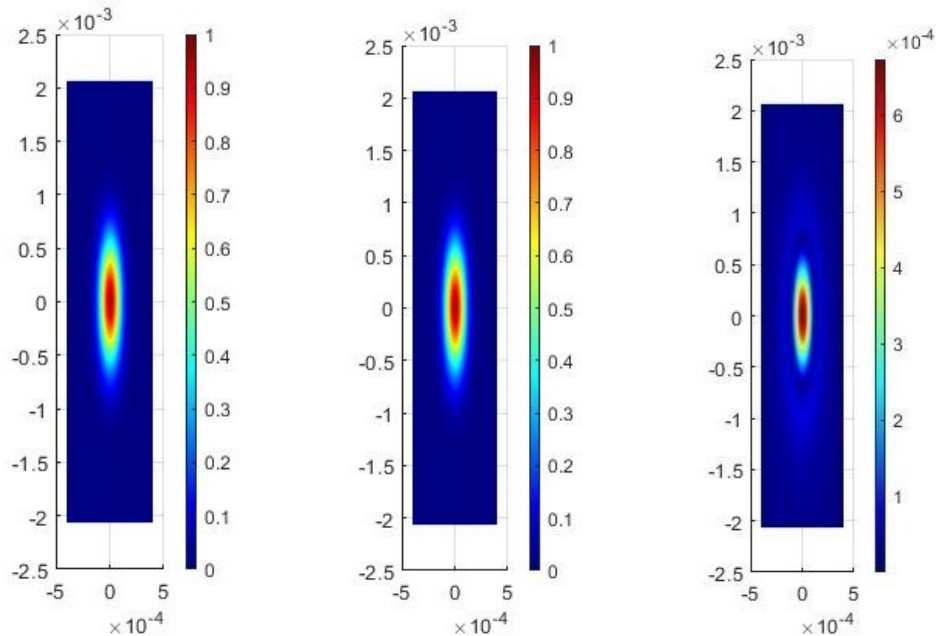


Abbildung 3.10: Links: Exakte Lösung nach (3.3) bei  $\theta = 80^\circ$   
 Mitte: Genäherte Lösung nach (3.5) bei  $\theta = 80^\circ$   
 Rechts: Differenz zwischen (3.3) und (3.5)

Die Differenz zwischen (3.3) und (3.5) ist selbst bei  $p$ -Polarisation gering wie man in Abbildung 3.10 sehen kann. Dabei wurde  $E_0(x, y) = \exp\left(-\frac{x^2+y^2}{w_0^2}\right)$  mit  $w_0 = 100 \mu\text{m}$  verwendet, bei  $s$ -Polarisation gibt es ähnliche Ergebnisse. Der maximale Fehler ist für einen variablen Steigungswinkel in Abbildung 3.11 zu sehen.

Abschließend sei noch einmal erwähnt, dass in Satz 2.2.3 bewiesen wurde, dass der Blendenstapel gegen die abgeschnittene Freiraumpropagation konvergiert. Das heißt, dass man die Beugungseffekte bei der beam propagation method vernachlässigen kann. Dementsprechend ist es ein guter Ansatz beim finalen Modell nur die Freiraumpropagation zu betrachten, was zu einer enormen Beschleunigung der Simulation führt.

Insgesamt kann man sagen, dass das in Kapitel 3.1 gezeigte Modell eine Näherung der vollen wellenoptischen Simulation ist. Es liefert unter folgenden Voraussetzungen besonders gute Ergebnisse: Wenn

- die Geometrie relativ flach ist ( $\theta \lesssim 80^\circ$ ) oder
- die Geometrie besonders wenig Krümmung aufweist oder

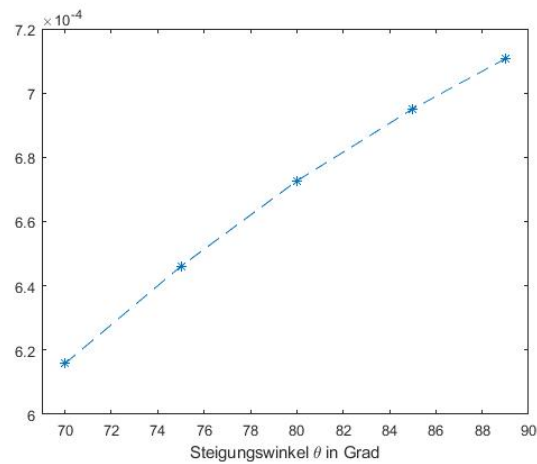


Abbildung 3.11: Maximaler Fehler abhängig vom Steigungswinkel

- der Laserstrahl aus viele inkohärent überlagerten Moden besteht ( $N \gtrsim 10$ ),

dann sind die Näherungen wie in diesem Kapitel gezeigt wurde besonders geeignet und das Modell liefert eine gute Näherung der Realität. Insbesondere liefert das Modell (bis auf eine Näherung im Absorptionsgrad) bei einer schiefen Ebene die exakte Lösung der Helmholtzgleichung.

Im folgenden Kapitel werden drei analytische Resultate dargelegt, mit denen man das Modell in verschiedenen Spezialfällen validieren kann.





# Analytische Resultate

Elektrische Felder der Form

$$E(x, y, z) = a(x, y, z)e^{i\frac{\phi(x, y, z)}{\varepsilon}} \quad (4.1)$$

nennt man Wellenpakete. Sie haben die Eigenschaft, dass die Einhüllende  $a$  relativ langsam variiert im Gegensatz zur schnell oszillierenden Phase  $\frac{\phi(x, y, z)}{\varepsilon}$  mit  $0 < \varepsilon \ll 1$ . Um das zu simulierende Gebiet nicht auf einer Größenordnung von  $\varepsilon$  auflösen zu müssen, leitet man Differentialgleichungen für die Einhüllende  $a$  her und zeigt dann, dass diese Differentialgleichung die Dynamik des Gesamtsystems ausreichend genau beschreibt. Mehrere Beispiele dafür finden sich in diesem Kapitel.

## 4.1 Schrödingerapproximation im Freiraum

Zeitharmonische elektromagnetische Wellen im Vakuum werden wie in Kapitel 1 bereits erklärt durch die Helmholtzgleichung

$$\Delta v + \frac{\omega^2}{c^2}v = 0 \quad (4.2)$$

beschrieben. Für die Propagation solcher Wellen entlang der  $z$ -Achse kann die Schrödingergleichung durch einen Multiskalenansatz hergeleitet werden. Ziel dieses Kapitels ist es, diese formale Approximation zu rechtfertigen, indem Schranken zwischen dieser formalen Approximation und der wahren Lösung des ursprünglichen Systems nachgewiesen werden. Die Herausforderung bei der vorgestellten Gültigkeitsanalyse ist die Tatsache, dass die Helmholtzgleichung als Evolutionsgleichung entlang der  $z$ -Achse schlecht gestellt ist.

Aus diesem schlecht gestellten System kann ein gut gestelltes Anfangswertproblem durch

eine Multiskalenanalyse abgeleitet werden. Im Einzelnen bedeutet das Einfügen des Ansatzes

$$\begin{aligned} v(x, y, z) &\approx \psi_{app}(x, y, z) \\ &= e^{ikz} \psi(X, Y, Z) \\ &= e^{ikz} \sum_{n=0}^N \varepsilon^{2n} \psi_{2n}(X, Y, Z), \end{aligned}$$

mit  $X = \varepsilon x, Y = \varepsilon y, Z = \varepsilon^2 z$ , und  $0 < \varepsilon \ll 1$  ein kleiner Störungsparameter, dass

$$-k^2 \psi + 2i\varepsilon^2 k \partial_Z \psi + \varepsilon^4 \partial_Z^2 \psi = -\frac{\omega^2}{c^2} \psi - \varepsilon^2 \partial_X^2 \psi - \varepsilon^2 \partial_Y^2 \psi$$

gelten muss. Wählt man  $\omega = ck$ , so ergibt sich, dass  $\psi_{2n}$  die Schrödingergleichung

$$-2ik \partial_Z \psi_{2n} = \partial_X^2 \psi_{2n} + \partial_Y^2 \psi_{2n} + \partial_Z^2 \psi_{2n-2} \quad (4.3)$$

mit Inhomogenität  $\partial_Z^2 \psi_{2n-2}$  und  $\psi_{-2} := 0$  erfüllen muss. Die Schrödingergleichung ist im Gegensatz zur Helmholtzgleichung ein wohlgestelltes Anfangswertproblem bezüglich der Evolutionsvariablen  $Z$ .

Dieser formale Ansatz wird in der physikalischen und ingenieurwissenschaftlichen Literatur häufig verwendet, beispielsweise zur Beschreibung der Entwicklung von Lichtstrahlen im Vakuum oder in Medien [Sch10, RWR<sup>+</sup>10], zur Berechnung von Strahlqualitätsfaktoren in Stufenindexfasern [YPM06], oder zur Modellierung von Phänomenen in der Optik mit komplexem Raytracing [HIP15]. Eine Begründung für diese Näherung findet sich in [MS97], jedoch ohne rigorosen Beweis durch analytische Abschätzung des Fehlers. Deshalb wird nun eine obere Schranke für die Norm der Differenz zwischen genäherter und exakter Lösung gezeigt.

Dazu wird genutzt, dass die Fouriertransformation ein Isomorphismus zwischen  $H^s$  und  $L_s^2$  ist, d.h. es gibt  $C_1, C_2 > 0$ , sodass für alle  $u \in H^s$  gilt

$$\|\widehat{u}\|_{L_s^2} \leq C_1 \|u\|_{H^s} \leq C_2 \|\widehat{u}\|_{L_s^2}.$$

Damit kann das folgende Ergebnis bewiesen werden.

**Satz 4.1.1.** *Für  $s \geq 0, s_A := \max(2N + 2, s), s_n := \max(s_A, 4 + 2(N - n))$  und  $Z_0 > 0$  sei  $\psi_{2n} \in C([0, Z_0], H^{s_n})$  eine Lösung der Schrödingergleichung (4.3). Dann gibt es eine Konstante  $C > 0$  und ein  $\varepsilon_0 > 0$ , sodass für alle  $\varepsilon \in (0, \varepsilon_0)$  eine Lösung  $v$  von (4.2) existiert*

mit

$$\sup_{0 \leq z \leq \frac{z_0}{\varepsilon^2}} \left\| v(x, y, z) - e^{ikz} \sum_{n=0}^N \varepsilon^{2n} \psi_{2n}(\varepsilon x, \varepsilon y, \varepsilon^2 z) \right\|_{H^s(dx, dy)} \leq C \varepsilon^{2N+1}.$$

Insbesondere ergibt sich aus dem Sobolevschen Einbettungssatz

$$\sup_{0 \leq z \leq \frac{z_0}{\varepsilon^2}} \sup_{x, y \in \mathbb{R}^2} \left| v(x, y, z) - e^{ikz} \sum_{n=0}^N \varepsilon^{2n} \psi_{2n}(\varepsilon x, \varepsilon y, \varepsilon^2 z) \right| \leq C \varepsilon^{2N+1}$$

für  $s > 1$ .

*Beweis.* Da (4.2) ein schlecht gestelltes Anfangswertproblem ist, nutzen wir eine Abschneidefunktion im Fourierraum, um den schlecht gestellten Teil zu entfernen. Genauer gesagt definieren wir eine Projektion  $P_{hyp}$  auf den hyperbolischen Teil von (4.2) durch

$$P_{hyp}u = \mathcal{F}^{-1} \chi \mathcal{F}u \tag{4.4}$$

wobei

$$\chi(k_x, k_y) = \begin{cases} 1, & \text{für } k_x^2 + k_y^2 \leq \frac{k^2}{2}, \\ 0, & \text{sonst.} \end{cases} \tag{4.5}$$

Um die Differenz zwischen den Lösungen  $v$  von (4.2) und der Schrödingerapproximation  $\psi_{app}$  abzuschätzen, wird mit dem hyperbolischen Teil  $P_{hyp}\psi_{app}$  der Schrödingerapproximation gearbeitet. Dann verwenden wir die Dreiecksungleichung zur Abschätzung:

$$\|v - \psi_{app}\|_{H^s} \leq \|v - P_{hyp}\psi_{app}\|_{H^s} + \|P_{hyp}\psi_{app} - \psi_{app}\|_{H^s}.$$

Die beiden Terme auf der rechten Seite werden in den folgenden beiden Unterabschnitten abgeschätzt.

### Abschätzung des wohlgestellten Teils

Wir betrachten (4.2) mit Anfangsbedingungen  $P_{hyp}\psi_{app}|_{z=0}$  und  $\partial_z P_{hyp}\psi_{app}|_{z=0}$ . Da (4.2) ein lineares System ist, bleibt der Fouriersupport der Lösung  $v$  erhalten. Die Differenz  $R = v - P_{hyp}\psi_{app}$  erfüllt dann

$$\partial_z^2 R = -\partial_x^2 R - \partial_y^2 R - k^2 R - \varepsilon^{4+2N} P_{hyp} \partial_z^2 A \psi_{2N} \tag{4.6}$$

mit Anfangsbedingungen  $R|_{z=0} = 0, \partial_z R|_{z=0} = 0$  und  $A\Psi(x, y, z) := \Psi(\varepsilon x, \varepsilon y, \varepsilon^2 z)$ . Die Inhomogenität kann durch die rechte Seite der Schrödingergleichung ausgedrückt werden:

$$\partial_z^2 A\psi_{2N} = \partial_z \left( \frac{(\partial_x^2 + \partial_y^2)A\psi_{2N} + \partial_z^2 A\psi_{2N-2}}{-2ik} \right) = \frac{(\partial_x^2 + \partial_y^2) \frac{(\partial_x^2 + \partial_y^2)A\psi_{2N} + \partial_z^2 A\psi_{2N-2}}{-2ik} + \partial_z^3 A\psi_{2N-2}}{-2ik}. \quad (4.7)$$

Für  $\psi_{2n} \in C([0, Z_0], H^{s_n})$  gilt also

$$\begin{aligned} \|P_{hyp}\partial_z^2 A\psi_{2N}\|_{L^2} &\leq C_1 \sum_{n=0}^N \|A\psi_{2n}\|_{H^{s_n}} \\ &= C_1 \varepsilon^{-1} \sum_{n=0}^N \|\psi_{2n}\|_{H^{s_n}} \\ &\leq C_1 \varepsilon^{-1} \sum_{n=0}^N \|\psi_{2n}\|_{C([0, Z_0], H^{s_n})} \\ &=: C_2 \varepsilon^{-1} \end{aligned}$$

für alle  $z \geq 0$  durch iteratives Anwenden von (4.7). Da für Funktionen mit kompaktem Fouriersupport jede  $H^s$ -Norm durch die  $L^2$ -Norm abgeschätzt werden kann, gilt insbesondere

$$\|u\|_{H^s} = \|\chi \widehat{u}\|_{L^2_s} = \|\chi \widehat{u} \rho^s\|_{L^2} \leq \|\chi \rho^s\|_{L^\infty} \|\widehat{u}\|_{L^2} = C_s \|u\|_{L^2} \quad (4.8)$$

für  $C_s := \|\chi \rho^s\|_{L^\infty} = \rho^s(k^2/2) < \infty$  und  $u \in H^s$  mit  $u = P_{hyp}u$ . Daher folgt

$$\|P_{hyp}\partial_z^2 \psi_{2N}\|_{H^s}^2 \leq C_s^2 \|\partial_z^2 \psi_{2N}\|_{L^2}^2 \leq C_s^2 C_2^2 \varepsilon^{-2}. \quad (4.9)$$

Im Fourierraum ist (4.6) gegeben durch

$$\partial_z^2 \widehat{R} = -\widehat{\omega}^2 \widehat{R} - \varepsilon^{4+2N} \chi \partial_z^2 B \widehat{\psi_{2N}}, \quad (4.10)$$

mit  $\widehat{\omega}^2(k_x, k_y) = k^2 - k_x^2 - k_y^2$  und  $B\Psi(x, y, z) = \psi\left(\frac{x}{\varepsilon}, \frac{y}{\varepsilon}, \varepsilon^2 z\right)$ . Multiplizieren von (4.10) mit  $\overline{\partial_z \widehat{R}}$  und Integrieren über  $k_x$  und  $k_y$  ergibt

$$\begin{aligned} \partial_z \int_{\mathbb{R}^2} \left| \partial_z \widehat{R} \right|^2 + \left| \widehat{\omega} \widehat{R} \right|^2 dk_x dk_y &\leq 2 \left| \operatorname{Re} \int_{\mathbb{R}^2} \partial_z \widehat{R}^* (\varepsilon^{4+2N} \chi \partial_z^2 B \widehat{\psi_{2N}}) dk_x dk_y \right| \\ &\leq \varepsilon^2 \int_{\mathbb{R}^2} \left| \partial_z \widehat{R} \right|^2 dk_x dk_y + \varepsilon^{6+4N} \int_{\mathbb{R}^2} \left| \chi \partial_z^2 B \widehat{\psi_{2N}} \right|^2 dk_x dk_y. \end{aligned}$$

Für  $E = \int_{\mathbb{R}^2} \left| \partial_z \widehat{R} \right|^2 + \left| \widehat{\omega} \widehat{R} \right|^2 dk_x dk_y$  ergibt sich also

$$\partial_z E \stackrel{(4.9)}{\leq} \varepsilon^2 E + \varepsilon^{4+4N} C_3.$$

Aus Gronwalls Ungleichung folgt dann

$$E(z) \leq \int_0^z e^{\varepsilon^2(z-s)} \varepsilon^{4+4N} C_3 ds \leq C_5 \varepsilon^{2+4N}$$

für  $z \in [0, \min(\frac{1}{\varepsilon^4}, \frac{Z_0}{\varepsilon^2})] = [0, \frac{Z_0}{\varepsilon^2}]$  und  $\varepsilon > 0$  klein genug. Da nach Definition  $\widehat{\omega} \chi$  von Null wegbeschränkt ist, ist  $E(z)^{1/2}$  eine obere Grenze für die  $L^2$ -Norm von  $\widehat{R}$  und mit dem Satz von Plancherel eine obere Schranke für die  $L^2$ -Norm von  $R$ , genauer gesagt

$$\|R\|_{L^2} = \|\widehat{R}\|_{L^2} \leq C_6 \|\widehat{\omega} \widehat{R}\|_{L^2} \leq C_6 E(z)^{1/2}.$$

Da  $R$  einen kompakten Träger im Fourierraum hat, impliziert nach (4.8) die  $L^2$ -Abschätzung eine  $H^s$ -Abschätzung für  $R$  für jedes  $s \geq 0$ :

$$\|R\|_{H^s} \leq C_7 \varepsilon^{1+2N} \quad (4.11)$$

### Abschätzung des schlecht gestellten Teils

Zur Abschätzung des Terms  $\|P_{hyp} \psi_{app} - \psi_{app}\|_{H^s}$  verwenden wir, dass

$$\widehat{\psi}_{app}(k_x, k_y, z) = \varepsilon^{-2} e^{ikz} \sum_{n=0}^N \varepsilon^{2n} \widehat{\psi}_{2n} \left( \frac{k_x}{\varepsilon}, \frac{k_y}{\varepsilon}, \varepsilon^2 z \right)$$

stark um den Wellenvektor  $(k_x, k_y) = (0, 0)$  konzentriert ist. Wir schätzen

$$\begin{aligned} & \|P_{hyp} \psi_{app} - \psi_{app}\|_{H^s(dx, dy)} \\ & \leq C_8 \left\| \widehat{P_{hyp} \psi_{app}} - \widehat{\psi_{app}} \right\|_{L_s^2(dk_x, dk_y)} \stackrel{(4.4)}{=} C_8 \left\| (1 - \chi) \widehat{\psi_{app}} \right\|_{L_s^2(dk_x, dk_y)} \\ & \leq C_8 \sup_{\mathbf{k} \in \mathbb{R}^2} \left| (1 - \chi(\mathbf{k})) \frac{\rho(\mathbf{k})^s}{\rho\left(\frac{\mathbf{k}}{\varepsilon}\right)^{s_A}} \right| \left\| \varepsilon^{-2} \sum_{n=0}^N \varepsilon^{2n} \widehat{\psi}_{2n} \left( \frac{k_x}{\varepsilon}, \frac{k_y}{\varepsilon}, \varepsilon^2 z \right) \rho\left(\frac{\mathbf{k}}{\varepsilon}\right)^{s_A} \right\|_{L^2(dk_x, dk_y)} \\ & \leq C_8 \varepsilon^{s_A-1} \sum_{n=0}^N \varepsilon^{2n} \left\| \widehat{\psi}_{2n}(K_x, K_y, Z) \right\|_{L_{s_A}^2(dk_x, dk_y)} \\ & \leq C_9 \varepsilon^{s_A-1} \|\psi_0(X, Y, Z)\|_{H^{s_A}(dx, dy)} \end{aligned} \quad (4.12)$$

für  $\varepsilon \in (0, \varepsilon_0)$  ab. Hierbei ist  $K_x = \frac{k_x}{\varepsilon}, K_y = \frac{k_y}{\varepsilon}$  und der Verlust von  $\varepsilon^{-1}$  kommt von den Skalierungseigenschaften der  $L^2$ -Norm und der Fouriertransformation.

### Zusammenfassung

Die Kombination von (4.11) und (4.12) ergibt

$$\begin{aligned} \|v - \psi_{app}\|_{H^s} &\leq \|v - P_{hyp}\psi_{app}\|_{H^s} + \|P_{hyp}\psi_{app} - \psi_{app}\|_{H^s} \\ &\leq C_7\varepsilon^{1+2N} + C_9\varepsilon^{s_A-1}\|\psi_0\|_{C([0, Z_0], H^{s_A})} \\ &\leq C_{10}\varepsilon^{2N+1} \end{aligned}$$

für  $z \in [0, \frac{Z_0}{\varepsilon}]$ ,  $\varepsilon > 0$  klein genug und  $s_A \geq 2N + 2$ . □

**Bemerkung 4.1.2.** *Der Fall  $N = 0$  wurde veröffentlicht [KS22a].*

**Bemerkung 4.1.3.** *Man kann alternativ mit der Wellengleichung  $\partial_t^2 u = \Delta u$  statt der Helmholtzgleichung starten und den Ansatz*

$$u(x, y, z, t) = v(x, y, z)e^{i\frac{\omega t}{\varepsilon}}$$

einsetzen. Dann löst  $v$  die Helmholtzgleichung, es gilt

$$v(x, y, z) \approx w(x, y, \varepsilon z)e^{i\frac{kz}{\varepsilon}}$$

und  $w$  löst die Schrödingergleichung. In dieser Skalierung sieht man das Wellenpaket (4.1) deutlich und Satz 4.1.1 kann auch mit dieser Skalierung formuliert werden.

## 4.2 Schrödingerapproximation bei senkrechter Wand

Das folgende Kapitel wurde unter [KS22b] veröffentlicht. In diesem Kapitel sind wir interessiert an einer senkrechten Wand mit Brechungsindex

$$n = n(x) = \begin{cases} 1, & \text{for } x > 0, \\ n_0, & \text{for } x \leq 0, \end{cases} \quad (4.13)$$

$n_0 \in \mathbb{C}$  und  $\Im(n_0) > 0, \Re(n_0) \geq 1$ . Die resultierende Helmholtzgleichung

$$\partial_z^2 v = -k^2 n v - \partial_x^2 v - \partial_y^2 v \quad (4.14)$$

wird durch Wellen

$$v(x, y, z) = e^{\lambda z} e^{ik_y y} W(k_x, x),$$

gelöst, wobei  $W(k_x, x)$  die folgende Form hat:

$$W(k_x, x) = \begin{cases} e^{ik_x x} + b_{k_x} e^{-ik_x x}, & \text{for } x > 0, \\ c_{k_x} e^{k_- x}, & \text{for } x < 0, \end{cases} \quad (4.15)$$

mit Exponent  $k_- = k_-(k_x)$ , der  $\Re(k_-(k_x)) > 0$  erfüllt, Reflexionskoeffizient  $b_{k_x}$  und Absorptionskoeffizient  $c_{k_x}$  (siehe Abschnitt 4.2.1). Die Eigenfunktionen  $W(k_x, x)$  sind parametrisiert mit  $k_x \in \mathbb{R}$  und die Eigenwerte  $\lambda$  sind gegeben durch

$$\lambda^2 = k_x^2 + k_y^2 - k^2, \quad (4.16)$$

mit  $k_x, k_y \in \mathbb{R}$ . Dementsprechend haben wir die spektrale Repräsentation

$$v(x, y, z) = \int_{\mathbb{R}} \int_{\mathbb{R}} \widehat{v}(k_x, k_y, z) e^{ik_y y} W(k_x, x) dk_x dk_y, \quad (4.17)$$

wobei  $\widehat{v}(k_x, k_y, z)$

$$\partial_z^2 \widehat{v}(k_x, k_y, z) = \lambda^2 \widehat{v}(k_x, k_y, z) = (k_x^2 + k_y^2 - k^2) \widehat{v}(k_x, k_y, z) \quad (4.18)$$

erfüllt. Sei  $V := \mathcal{F}^{-1}[v]$ , dann erfüllt  $V$

$$\partial_z^2 V = -k^2 V - \partial_x^2 V - \partial_y^2 V. \quad (4.19)$$

Diese spektrale Darstellung ermöglicht es daher, das  $x$ -abhängige Problem (4.14) in ein räumlich homogenes Problem (4.19) zu überführen.

Für  $k_x^2 + k_y^2 - k^2 \leq 0$  bleiben die Lösungen gleichförmig begrenzt, für  $k_x^2 + k_y^2 - k^2 > 0$  wächst die Lösung jedoch exponentiell an und damit ist System (4.18) für allgemeine Anfangsbedingungen  $\widehat{v}(\cdot, \cdot, 0), \partial_z \widehat{v}(\cdot, \cdot, 0) \in L^2(\mathbb{R}^2)$  ein schlecht gestelltes Anfangswertproblem.

Falls der Brechungsindex die Form (4.13) hat, kann diese Darstellung verwendet werden, um die sogenannte Schrödingerapproximation zur Beschreibung der Entwicklung von Wellen, die sich entlang der  $z$ -Richtung bewegen, abzuleiten und Fehlerabschätzungen für diese formale Näherung zu beweisen. Die Schrödingerapproximation ergibt sich durch Einsetzen

des Ansatzes

$$\widehat{v}(k_x, k_y, z) \approx \widehat{\psi}_{app}(k_x, k_y, z) = \varepsilon^{-2} \widehat{A}(K_x, K_y, Z) e^{ikz},$$

in (4.18) mit

$$K_x = \frac{k_x}{\varepsilon}, \quad K_y = \frac{k_y}{\varepsilon}, \quad Z = \varepsilon^2 z, \quad (4.20)$$

und  $0 < \varepsilon \ll 1$  ein kleiner Störungsparameter. Daraus ergibt sich

$$-k^2 \widehat{A} + 2i\varepsilon^2 k \partial_Z \widehat{A} + \varepsilon^4 \partial_Z^2 \widehat{A} = -k^2 \widehat{A} + \varepsilon^2 K_X^2 \widehat{A} + \varepsilon^2 K_Y^2 \widehat{A}.$$

Ignoriert man die Terme der Ordnung  $\mathcal{O}(\varepsilon^4)$ , so ergibt sich, dass  $\widehat{A}$  in niedrigster Ordnung die Schrödingergleichung

$$2ik \partial_Z \widehat{A} = K_X^2 \widehat{A} + K_Y^2 \widehat{A} \quad (4.21)$$

erfüllen muss, das heißt im Ortsraum

$$-2ik \partial_Z A = \partial_X^2 A + \partial_Y^2 A. \quad (4.22)$$

Die Gleichung (4.22) ist im Gegensatz zu (4.18) ein wohlgestelltes Anfangswertproblem im Bezug auf die Evolutionsvariable  $z$ . Eine mathematische Rechtfertigung dieser Schrödinger-Approximation durch Fehlerabschätzungen abhängig von  $\varepsilon > 0$  wurde in [KS22a] für den Fall  $n = n(x) = 1$  gegeben. Dort wurde das folgende Approximationsresultat bewiesen:

**Satz 4.2.1.** *Sei  $s \geq 0$ ,  $s_A \geq \max(4, s)$  und  $Z_0 > 0$ . Sei  $A \in C([0, Z_0], H^{s_A})$  eine Lösung der Schrödingergleichung (4.22). Dann gibt es eine Konstante  $C > 0$  und ein  $\varepsilon_0 > 0$ , sodass für alle  $\varepsilon \in (0, \varepsilon_0)$  Lösungen  $V$  von (4.19) existieren mit*

$$\sup_{0 \leq z \leq \frac{Z_0}{\varepsilon^2}} \|V(x, y, z) - e^{ikz} A(\varepsilon x, \varepsilon y, \varepsilon^2 z)\|_{H^s(dx, dy)} \leq C\varepsilon.$$

und

$$\text{supp}(\widehat{V}) \subset \{(k_x, k_y) : k_x^2 + k_y^2 \leq k^2\}.$$

Um ein ähnliches Approximationsresultat für die senkrechte Wand zu erhalten, wird im folgenden Abschnitt die Funktion  $W(k_x, x)$  genauer untersucht.



### 4.2.1 Das Eigenwertproblem

In diesem Abschnitt sind die wichtigsten Eigenschaften der Funktion  $W(k_x, \cdot)$  beschrieben. Die Gleichung (4.14) wird durch Wellen der Form

$$v(x, y, z) = e^{\lambda z} e^{ik_y y} W(k_x, x),$$

gelöst. Hierbei erfüllt  $W(k_x, x)$

$$\partial_x^2 W(k_x, x) = -(\lambda^2 + \omega^2 n_0 - k_y^2) W(k_x, x) =: k_-^2 W(k_x, x)$$

für  $x \leq 0$  und

$$\partial_x^2 W(k_x, x) = -(\lambda^2 + k^2 - k_y^2) W(k_x, x) =: -k_x^2 W(k_x, x)$$

für  $x > 0$ . Daraus folgt

$$W(k_x, x) = c_1 e^{ik_x x} + c_2 e^{-ik_x x}$$

für  $x > 0$  und

$$W(k_x, x) = c_3 e^{k_- x} + c_4 e^{-k_- x}$$

für  $x < 0$ . Da die Bedingung für  $x > 0$  unabhängig von  $x$  ist, ergibt sich für die Eigenwerte  $\lambda$ , dass

$$\lambda^2 = k_x^2 + k_y^2 - k^2.$$

Wir nehmen also den Parameter  $k_x \in \mathbb{R}$ , um die Funktion  $W(k_x, \cdot)$  zu parametrisieren. Es folgt

$$k_-^2 = k_y^2 - \omega^2 n_0^2 - (k_x^2 + k_y^2 - \omega^2) = (1 - n_0^2) \omega^2 - k_x^2.$$

Dies und die Annahme, dass  $\Re(n_0) \geq 1$  und  $\Im(n_0) > 0$  für den Brechungsindex  $n_0$  gilt, implizieren

$$\Re(k_-^2) < 0 \quad \text{und} \quad \Im(k_-^2) \geq 0.$$

Wir wählen  $k_- = k_-(k_x)$  als den Zweig der komplexen Wurzel von  $(1 - n_0^2)k^2 - k_x^2$  mit  $\Re(k_-(k_x)) > 0$ . Gesucht sind Lösungen  $W(k_x, \cdot)$ , die begrenzt sind und für die  $W(k_x, \cdot)$  und  $\partial_2 W(k_x, \cdot)$  bei  $x = 0$  stetig sind. Damit folgt, dass  $c_4 = 0$  gilt, da sonst  $W(k_x, x)$  für  $x \rightarrow -\infty$  unbeschränkt ist. Die Stetigkeit von  $W(k_x, x)$  und  $\partial_2 W(k_x, x)$  bei  $x = 0$  führt zu den Bedingungen

$$c_1 + c_2 = c_3 + c_4 \quad \text{und} \quad ik_x(c_1 - c_2) = k_-(c_3 - c_4).$$

Mit  $c_4 = 0$  ist dieses Gleichungssystem äquivalent zu

$$c_2 = \frac{ik_x - k_-}{ik_x + k_-} c_1, \quad c_3 = \frac{2ik_x}{ik_x + k_-} c_1.$$

Die Wahl von  $c_1 = 1$  normalisiert die Funktion  $W(k_x, \cdot)$ . Damit ergibt sich

$$b_{k_x} = \frac{ik_x - k_-}{ik_x + k_-} \quad \text{und} \quad c_{k_x} = \frac{2ik_x}{ik_x + k_-}$$

für die Koeffizienten in (4.15). Da  $n_0^2 \neq 1$  ist, gilt  $(1 - n_0^2)\omega^2 \neq 0$  und somit  $ik_x + k_- \neq 0$  für die Nenner.

**Lemma 4.2.2.** *Es gibt eine Konstante  $C_W$ , sodass*

$$\sup_{k_x \in \mathbb{R}} \sup_{x \in \mathbb{R}} |W(k_x, x)| = C_W < \infty.$$

*Beweis.* Da  $k_- = k_-(k_x)$  und der Nenner  $ik_x + k_-(k_x) \neq 0$  stetige Funktionen bezüglich  $k_x$  sind, gilt dies auch für  $b_{k_x}$  und  $c_{k_x}$ . Daher ist die Funktion  $k_x \mapsto \sup_{x \in \mathbb{R}} |W(k_x, x)|$  ebenfalls eine stetige Funktion in  $k_x$ . Daher besitzt diese stetige Funktion ein Maximum auf jedem kompakten Intervall  $\{k_x \in \mathbb{R} : |k_x| \leq \omega\}$ . Für  $\{k_x \in \mathbb{R} : |k_x| > \omega\}$  nutzen wir, dass  $\frac{k_-(k_x)}{ik_x} \rightarrow 1$  für  $|k_x| \rightarrow \infty$  gilt. Deshalb ist  $W$  global beschränkt.  $\square$

Mit diesem Lemma kann der nachstehende Satz bewiesen werden:

**Satz 4.2.3.** *Sei  $s_A \geq 4$  und  $Z_0 > 0$ . Sei  $A \in C([0, Z_0], H^{s_A})$  eine Lösung der Schrödinger-Gleichung (4.22). Dann gibt es ein  $C > 0$  und ein  $\varepsilon_0 > 0$  so, dass für alle  $\varepsilon \in (0, \varepsilon_0)$  Lösungen  $v$  von (4.14) existieren mit*

$$\sup_{z \in [0, Z_0/\varepsilon^2]} \sup_{x, y \in \mathbb{R}} |v(x, y, z) - \Psi_{app}(x, y, z)| \leq C\varepsilon.$$

*Dabei ist*

$$\Psi_{app}(x, y, z) = \int_{\mathbb{R}} \int_{\mathbb{R}} \varepsilon^{-2} \widehat{A} \left( \frac{k_x}{\varepsilon}, \frac{k_y}{\varepsilon}, \varepsilon^2 z \right) e^{ikz} e^{iky} W(k_x, x) \chi(k_x, k_y) dk_y dk_x$$

*und  $\chi$  aus (4.5).*

*Beweis.* Sei  $v$  wie in (4.17) und  $\widehat{v}$  die Lösung von (4.18) mit den Anfangsbedingungen

$$\widehat{v}(k_x, k_y, 0) = \frac{\chi(k_x, k_y)}{\varepsilon^2} \widehat{A} \left( \frac{k_x}{\varepsilon}, \frac{k_y}{\varepsilon}, 0 \right)$$

und

$$\partial_z \widehat{v}(k_x, k_y, 0) = \frac{\chi(k_x, k_y)}{\varepsilon^2} \partial_z \widehat{A} \left( \frac{k_x}{\varepsilon}, \frac{k_y}{\varepsilon}, 0 \right).$$

Außerdem nutzen wir

$$\sup_{x \in \mathbb{R}} \sup_{k_x \in \mathbb{R}} |W(k_x, x)| =: C_W < \infty$$

von Lemma 4.2.2, damit ergibt sich

$$\begin{aligned} & \sup_{x, y \in \mathbb{R}} |v(x, y, z) - \Psi_{app}(x, y, z)| \\ & \leq \sup_{x, y \in \mathbb{R}} \left| \int_{\mathbb{R}} \int_{\mathbb{R}} \left( \widehat{v}(k_x, k_y, z) - \varepsilon^{-2} \widehat{A} \left( \frac{k_x}{\varepsilon}, \frac{k_y}{\varepsilon}, \varepsilon^2 z \right) e^{ikz} \right) \right. \\ & \quad \left. \times e^{ik_y y} W(k_x, x) \chi(k_x, k_y) dk_x dk_y \right| \\ & \leq \left\| \widehat{v}(k_x, k_y, z) - \varepsilon^{-2} \widehat{A} \left( \frac{k_x}{\varepsilon}, \frac{k_y}{\varepsilon}, \varepsilon^2 z \right) e^{ikz} \right\|_{L^1(B_r(0,0))} \sup_{k_x, k_y \in \mathbb{R}} \sup_{x, y \in \mathbb{R}} |e^{ik_y y} W(k_x, x)| \\ & \leq C_W \left\| \widehat{v}(k_x, k_y, z) - \varepsilon^{-2} \widehat{A} \left( \frac{k_x}{\varepsilon}, \frac{k_y}{\varepsilon}, \varepsilon^2 z \right) e^{ikz} \right\|_{L^1(B_r(0,0))} \end{aligned}$$

mit  $r = k/\sqrt{2}$ . Weil

$$\|f\|_{L^1(\Omega)} \leq \|1\|_{L^2(\Omega)} \|f\|_{L^2(\Omega)} \quad (4.23)$$

für alle  $\Omega \subset \mathbb{R}^2$  mit  $|\Omega| < \infty$  gilt, folgt

$$\begin{aligned} \sup_{x, y \in \mathbb{R}} |v(x, y, z) - \Psi_{app}(x, y, z)| & \leq C_W \left\| \widehat{v}(k_x, k_y, z) - \varepsilon^{-2} \widehat{A} \left( \frac{k_x}{\varepsilon}, \frac{k_y}{\varepsilon}, \varepsilon^2 z \right) e^{ikz} \right\|_{L^1(B_r(0,0))} \\ & \stackrel{(4.23)}{\leq} C_1 \left\| \widehat{v}(k_x, k_y, z) - \widehat{A} \left( \frac{k_x}{\varepsilon}, \frac{k_y}{\varepsilon}, \varepsilon^2 z \right) \frac{e^{ikz}}{\varepsilon^2} \right\|_{L^2(B_r(0,0))} \\ & \leq C_1 \left\| V(x, y, z) - A(\varepsilon x, \varepsilon y, \varepsilon^2 z) e^{ikz} \right\|_{L^2(\mathbb{R}^2)}. \end{aligned}$$

Satz 4.2.1 ermöglicht dann die Abschätzung

$$\sup_{z \in [0, Z_0/\varepsilon^2]} \sup_{x, y \in \mathbb{R}} |v(x, y, z) - \Psi_{app}(x, y, z)| \leq C\varepsilon.$$

□

**Bemerkung 4.2.4.** Analog zu Satz 4.1.1 kann in Satz 4.2.3 die Norm durch  $\varepsilon^{2N+1}$  abgeschätzt werden. Dazu werden Terme höherer Ordnung in  $\Psi_{app}$  benötigt.

### 4.2.2 Numerik

Die obigen Ideen werden nun mit numerischen Experimenten illustriert. Wir beschränken uns auf den zweidimensionalen Fall, d.h. auf  $y$ -unabhängige Lösungen. Dazu wird numerisch das Integral

$$\Psi_{app}(x, z) = \int_{\mathbb{R}} \varepsilon^{-1} \widehat{A}\left(\frac{k_x}{\varepsilon}, \varepsilon^2 z\right) e^{ikz} W(k_x, x) \chi_{\{k_x^2 \leq \omega^2\}} dk_x$$

berechnet mit der expliziten Lösung

$$\widehat{A}(K_X, Z) = e^{\frac{K_X^2}{2ik} Z} \widehat{A}(K_X, 0)$$

für eine gaußförmige Anfangsbedingung  $\widehat{A}(\cdot, 0)$  und verschiedene Werte von  $0 < \varepsilon \ll 1$ . Eine explizite Formel für  $W(k_x, x)$  kann in Abschnitt 4.2.1 gefunden werden. In Abbildung 4.1 ist

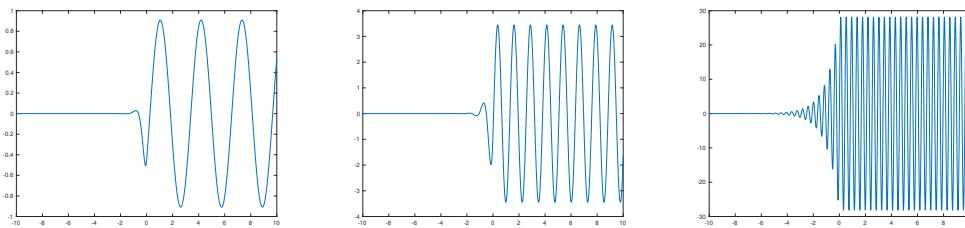


Abbildung 4.1: Der Realteil von  $W(2, \cdot)$ ,  $W(5, \cdot)$ , and  $W(25, \cdot)$  im Fall  $n_0 = 4 + 4i$  und  $k = 1$ .

die Funktion  $W$  für verschiedene Werte von  $k_x$  dargestellt. In dem in Abbildung 4.2 dargestellten numerischen Experiment wurden die Funktionen  $v$  und  $\Psi_{app}$  für die Anfangsbedingung  $A(x, 0) = \exp\left(-\frac{(x-x_0)^2}{w_0^2}\right)$  mit den Parametern  $w_0 = 10^{-5}$ ,  $k = 2 \cdot 10^5$  und Propagationsdistanz  $Z_0 = 10^{-5}$  berechnet. Die sich ergebenden Lösungen für  $\varepsilon = 2^{-7} \approx 8 \cdot 10^{-3}$  sind in

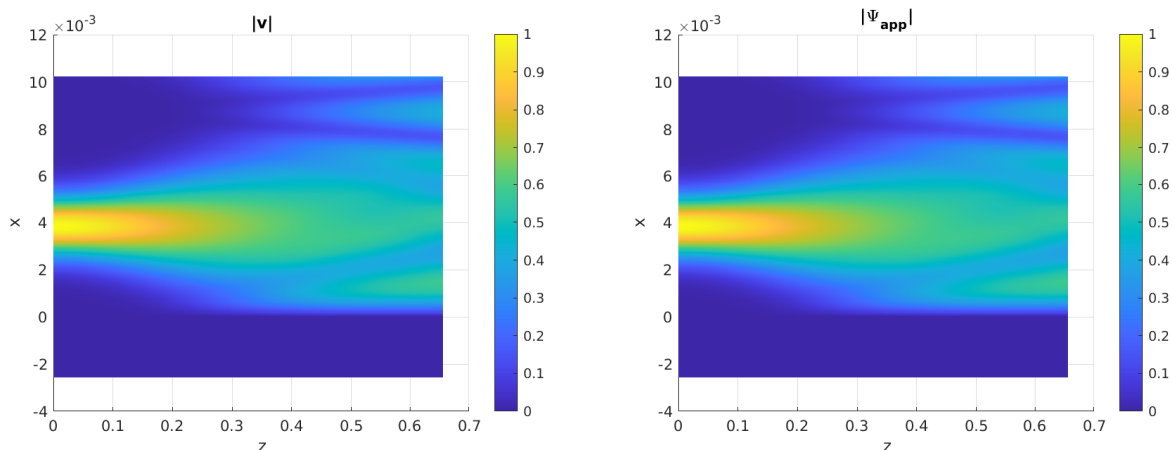


Abbildung 4.2: Absolutbetrag von  $v$  und  $\Psi_{app}$ .

Abbildung 4.2 zu sehen. Wie in Satz 4.2.3 bewiesen wurde, konvergiert der Fehler  $\|v - \Psi_{app}\|_\infty$

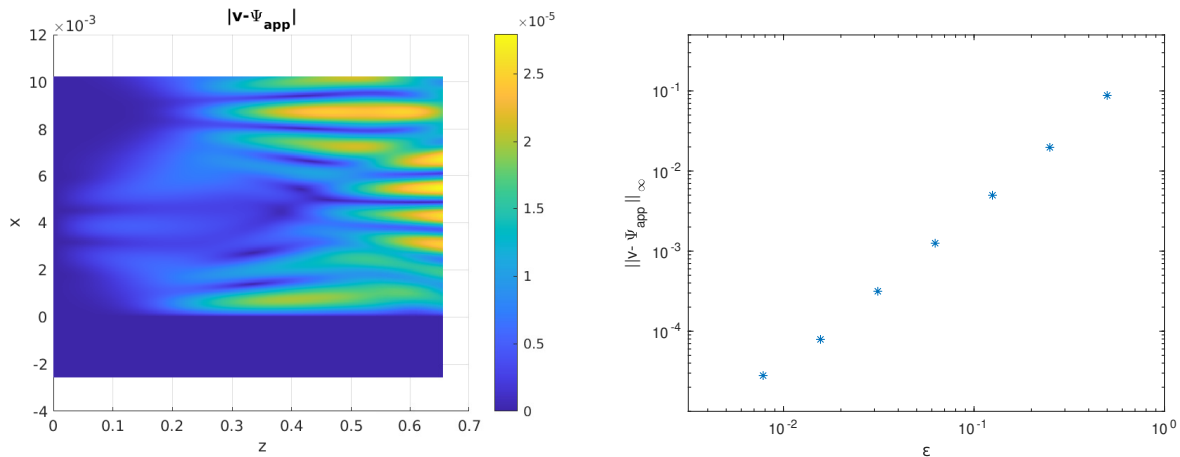


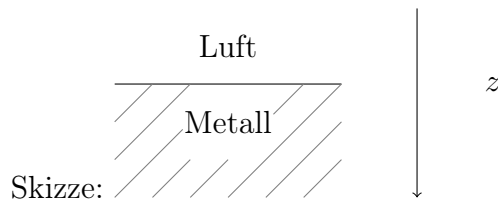
Abbildung 4.3: Fehler zwischen der exakten Lösung  $v$  und der Näherungslösung  $\Psi_{app}$ .

gegen Null, dies ist rechts in Abbildung 4.3 dargestellt. Man sieht die Konvergenzordnung  $\varepsilon^2$ , die aufgrund der reduzierten Dimensionalität zustande kommt. Der Fehler, der Abbildung 4.2 entspricht, ist links in Abbildung 4.3 zu sehen.

### 4.3 Schrödingerapproximation bei waagrechter Wand

Im folgenden Text geht es um ein elektrisches Feld, das auf eine waagrechte Wand bei  $z = 0$  trifft. Es gilt dementsprechend

$$n(x, y, z) = \begin{cases} 1, & z < 0 \\ n_0, & z > 0. \end{cases}$$



Dabei ist  $\Re(n_0) \geq 1, \Im(n_0) > 0$ , das heißt das Feld wird im Metall gedämpft. Die Helmholtzgleichung

$$\Delta v + n^2 k^2 v = 0 \tag{4.24}$$

lässt sich mit der Fouriertransformation  $\widehat{v}(k_x, k_y, z) = \mathcal{F}[v(x, y, z)](k_x, k_y)$  äquivalent durch die gewöhnliche Differentialgleichung

$$(\partial_z^2 + n^2 k^2 - k_x^2 - k_y^2)\widehat{v}(k_x, k_y, z) = 0 \quad (4.25)$$

ausdrücken. Die allgemeine Lösung dieser Gleichung lautet

$$\widehat{v}(k_x, k_y, z) = \begin{cases} \widehat{v}_{+<}(k_x, k_y)e^{i\widehat{\omega}(k_x, k_y)z} + \widehat{v}_{-<}(k_x, k_y)e^{-i\widehat{\omega}(k_x, k_y)z}, & z < 0 \\ \widehat{v}_{+>}(k_x, k_y)e^{i\widehat{\kappa}(k_x, k_y)z} + \widehat{v}_{->}(k_x, k_y)e^{-i\widehat{\kappa}(k_x, k_y)z}, & z > 0 \end{cases}$$

mit  $\widehat{\omega}(k_x, k_y) = \sqrt{k^2 - k_x^2 - k_y^2}$  und  $\widehat{\kappa}(k_x, k_y) = \sqrt{k^2 n_0^2 - k_x^2 - k_y^2}$ . Dabei beschreibt  $\widehat{v}_{+<}$  das einfallende Feld und  $\widehat{v}_{+>}$  das reflektierte Feld. Es gilt  $\widehat{v}(k_x, k_y, \cdot) \in C^1(\mathbb{R})$  und deshalb

$$\begin{aligned} \widehat{v}_{+>}(k_x, k_y) &= \frac{1}{2} \left( \widehat{v}_0(k_x, k_y) + \frac{\widehat{v}_1(k_x, k_y)}{i\widehat{\kappa}(k_x, k_y)} \right), \\ \widehat{v}_{->}(k_x, k_y) &= \frac{1}{2} \left( \widehat{v}_0(k_x, k_y) - \frac{\widehat{v}_1(k_x, k_y)}{i\widehat{\kappa}(k_x, k_y)} \right), \\ \widehat{v}_{+<}(k_x, k_y) &= \frac{1}{2} \left( \widehat{v}_0(k_x, k_y) + \frac{\widehat{v}_1(k_x, k_y)}{i\widehat{\omega}(k_x, k_y)} \right), \\ \widehat{v}_{-<}(k_x, k_y) &= \frac{1}{2} \left( \widehat{v}_0(k_x, k_y) - \frac{\widehat{v}_1(k_x, k_y)}{i\widehat{\omega}(k_x, k_y)} \right) \end{aligned}$$

für gegebene Anfangsbedingungen  $\widehat{v}_0(k_x, k_y) = \widehat{v}(k_x, k_y, 0)$  und  $\widehat{v}_1(k_x, k_y) = \partial_z \widehat{v}(k_x, k_y, 0)$ . Da  $\Re(-i\widehat{\kappa}) > 0$  gilt, muss für eine global beschränkte Lösung

$$\widehat{v}_{->} = 0 \Leftrightarrow \widehat{v}_1(k_x, k_y) = i\widehat{\kappa}(k_x, k_y)\widehat{v}_0(k_x, k_y) \quad (4.26)$$

gelten, damit ist  $\widehat{v}_{+>} = \widehat{v}_0$ . Insgesamt lässt sich die Lösung der Helmholtzgleichung also folgendermaßen beschreiben: Für eine Anfangsbedingung  $\widehat{v}_0$  bei  $z = 0$  gibt es im Metall eine exponentiell abfallende Lösung und in der Luft einen einfallenden und einen reflektierten Teil.

Diese Lösung lässt sich im Metall durch die Gleichung

$$-2in_0 k \partial_z w = (\partial_x^2 + \partial_y^2)w \quad (4.27)$$

approximieren: Sei  $\Psi_{app}(x, y, z) = e^{in_0 k z} w(\varepsilon x, \varepsilon y, \varepsilon^2 z)$ , dann gilt

**Satz 4.3.1.** *Sei  $w \in C([0, z_0], L^2(\mathbb{R}^2))$  eine Lösung der Gleichung (4.27). Dann existieren  $C > 0$  und  $\varepsilon_0 > 0$ , sodass für alle  $\varepsilon \in (0, \varepsilon_0)$  gilt: Es gibt eine exponentiell abfallende Lösung*

von (4.24) im Metall mit

$$\sup_{0 \leq z \leq \frac{z_0}{\varepsilon^2}} \|(v(x, y, z) - \Psi_{app}(x, y, z))e^{\lambda z}\|_{L^2(\mathbb{R}^2)} \leq C\varepsilon$$

für alle  $\lambda \leq \Im(n_0)k$ .

*Beweis.* Sei  $\widehat{v}_0 = \mathcal{F}[\Psi_{app}(\cdot, \cdot, 0)]$  und  $v(x, y, z) = \mathcal{F}^{-1}[\widehat{v}_0 e^{i\widehat{\kappa}z}](x, y)$  eine Lösung von (4.24). Dann gilt

$$\begin{aligned} \|(v(x, y, z) - \Psi_{app}(x, y, z))e^{\lambda z}\|_{L^2(\mathbb{R}^2)} &= \left\| \left( \widehat{v} - \widehat{\Psi}_{app} \right) e^{\lambda z} \right\|_{L^2(\mathbb{R}^2)} \\ &= \|\widehat{v}_0(e^{i\widehat{\kappa}z} - e^{i\widehat{\alpha}z})e^{\lambda z}\|_{L^2(\mathbb{R}^2)} \\ &= \|\widehat{v}_0 e^{(\lambda+i\widehat{\alpha})z} (e^{i(\widehat{\kappa}-\widehat{\alpha})z} - 1)\|_{L^2(\mathbb{R}^2)} \end{aligned}$$

mit  $\widehat{\alpha}(k_x, k_y) = kn_0 - \frac{k_x^2 + k_y^2}{2kn_0}$ . Wegen

$$\begin{aligned} \Re(\lambda + i\widehat{\alpha}) &= \lambda - \Im(\widehat{\alpha}) \\ &= \lambda - \Im\left(kn_0 - \frac{k_x^2 + k_y^2}{2kn_0}\right) \\ &= \lambda - \Im\left(kn_0 - \frac{k_x^2 + k_y^2}{2k|n_0|^2}n_0^*\right) \\ &= \lambda - \Im(n_0)\left(k + \frac{k_x^2 + k_y^2}{2k|n_0|^2}\right) \\ &\leq \lambda - \Im(n_0)k \\ &\leq 0 \end{aligned}$$

folgt  $\|(v(x, y, z) - \Psi_{app}(x, y, z))e^{\lambda z}\| \leq \|\widehat{v}_0(e^{i(\widehat{\kappa}-\widehat{\alpha})z} - 1)\|$ . Diesen Term kann man mit

$$\begin{aligned} \widehat{\kappa} - \widehat{\alpha} &= \sqrt{k^2 n_0^2 - k_x^2 - k_y^2} - \left(kn_0 - \frac{k_x^2 + k_y^2}{2kn_0}\right) \\ &= kn_0 \sqrt{1 - \frac{k_x^2 + k_y^2}{(kn_0)^2}} - \left(kn_0 - \frac{k_x^2 + k_y^2}{2kn_0}\right) \\ &= \sum_{l=2}^{\infty} a_l (k_x^2 + k_y^2)^l \end{aligned}$$

abschätzen:

$$\begin{aligned}
& \| (v(x, y, z) - \Psi_{app}(x, y, z)) e^{\lambda z} \|_{L^2(dx, dy)} \\
& \leq \left\| \widehat{v}_0 \left( \sum_{m=0}^{\infty} \frac{(i(\widehat{\kappa} - \widehat{\alpha})z)^m}{m!} - 1 \right) \right\|_{L^2(dx, dy)} \\
& = \left\| \widehat{v}_0 \sum_{m=1}^{\infty} \frac{(i(\widehat{\kappa} - \widehat{\alpha})z)^m}{m!} \right\|_{L^2(dx, dy)} \\
& = \left\| \widehat{v}_0 \sum_{m=1}^{\infty} \frac{i^m}{m!} \left( \sum_{l=2}^{\infty} a_l (k_x^2 + k_y^2)^l \right)^m z^m \right\|_{L^2(\mathbb{R}^2)} \\
& = \sqrt{\int_{\mathbb{R}^2} \left| \varepsilon^{-2} \widehat{w} \left( \frac{k_x}{\varepsilon}, \frac{k_y}{\varepsilon}, 0 \right) \sum_{m=1}^{\infty} \frac{i^m}{m!} \left( \sum_{l=2}^{\infty} a_l (k_x^2 + k_y^2)^l \right)^m z^m \right|^2 dk_x dk_y} \\
& = \sqrt{\int_{\mathbb{R}^2} \left| \varepsilon^{-2} \widehat{w} (K_x, K_y, 0) \sum_{m=1}^{\infty} \frac{i^m}{m!} \left( \sum_{l=2}^{\infty} a_l \varepsilon^{2l} (K_x^2 + K_y^2)^l \right)^m z^m \right|^2 \varepsilon^2 dk_x dk_y} \\
& = \sqrt{\int_{\mathbb{R}^2} \left| \varepsilon^{-2} \widehat{w} (K_x, K_y, 0) \sum_{m=1}^{\infty} \frac{i^m}{m!} \left( \sum_{l=2}^{\infty} a_l \varepsilon^{2l-4} (K_x^2 + K_y^2)^l \right)^m (\varepsilon^4 z)^m \right|^2 \varepsilon^2 dk_x dk_y} \\
& = \sqrt{\int_{\mathbb{R}^2} \left| \varepsilon^2 z \widehat{w} (K_x, K_y, 0) \sum_{m=1}^{\infty} \frac{i^m}{m!} \left( \sum_{l=2}^{\infty} a_l \varepsilon^{2l-4} (K_x^2 + K_y^2)^l \right)^m (\varepsilon^4 z)^{m-1} \right|^2 \varepsilon^2 dk_x dk_y} \\
& \leq Z_0 \varepsilon \sqrt{\int_{\mathbb{R}^2} \left| \widehat{w} (K_x, K_y, 0) \sum_{m=1}^{\infty} \frac{i^m}{m!} \left( \sum_{l=2}^{\infty} a_l \varepsilon^{2l-4} (K_x^2 + K_y^2)^l \right)^m (\varepsilon^4 z)^{m-1} \right|^2 dk_x dk_y} \\
& \leq Z_0 \varepsilon \sqrt{\int_{\mathbb{R}^2} \left| \widehat{w} (K_x, K_y, 0) \sum_{m=1}^{\infty} \frac{i^m}{m!} \left( \sum_{l=2}^{\infty} a_l (K_x^2 + K_y^2)^l \right)^m Z_0^{m-1} \right|^2 dk_x dk_y} \\
& = Z_0 \varepsilon \sqrt{\int_{\mathbb{R}^2} \left| \frac{\widehat{w} (K_x, K_y, 0)}{Z_0} \left( \exp \left( i \sum_{l=2}^{\infty} a_l (K_x^2 + K_y^2)^l Z_0 \right) - 1 \right) \right|^2 dk_x dk_y} \\
& = \varepsilon \sqrt{\int_{\mathbb{R}^2} |\widehat{w} (K_x, K_y, 0) \cdot 2|^2 dk_x dk_y} \\
& \leq \varepsilon 2 \|w\|_{L^2(dx, dy)} \\
& \leq C \varepsilon
\end{aligned}$$

für  $\varepsilon \leq 1$ . Somit ist  $\|(v(x, y, z) - \Psi_{app}(x, y, z)) e^{\lambda z}\|_{L^2} \leq C \varepsilon$  für alle  $0 \leq z \leq \frac{Z_0}{\varepsilon^2}$ .  $\square$

Die Frage ist nun, wie man die Lösung in der Luft durch zwei Schrödingergleichungen (in



unterschiedliche Richtungen) approximieren kann. Sei dazu  $w_1$  eine Lösung der Schrödingergleichung

$$-2ik\partial_z w_1 = (\partial_x^2 + \partial_y^2)w_1, \quad (4.28)$$

die in die positive  $z$ -Richtung propagiert. Dann kann man eine Lösung  $w_2$  der Schrödingergleichung

$$2ik\partial_z w_2 = (\partial_x^2 + \partial_y^2)w_2 \quad (4.29)$$

finden, die in die negative  $z$ -Richtung propagiert und zusammen mit  $w_1$  die Helmholtzgleichung approximiert. Genauer gesagt gilt  $v \approx \Psi_{app}$  für

$$\Psi_{app}(x, y, z) = e^{ikz}w_1(\varepsilon x, \varepsilon y, \varepsilon^2 z) + e^{-ikz}w_2(\varepsilon x, \varepsilon y, \varepsilon^2 z). \quad (4.30)$$

Diese Approximationseigenschaft wird im folgenden Satz genauer erläutert und bewiesen:

**Satz 4.3.2.** *Sei  $s \geq 0$ ,  $s_A \geq \max(4, s + 2)$  und  $w_1 \in C([0, z_0], H^{s_A})$  eine Lösung der Schrödingergleichung (4.28). Dann gibt es  $C > 0$  und  $\varepsilon_0 > 0$ , sodass für alle  $\varepsilon \in (0, \varepsilon_0)$  gilt: Es gibt eine Lösung  $w_2 \in C([0, Z_0], H^{s_A})$  von (4.29) und eine Lösung  $v$  von (4.24) mit*

$$\sup_{z \in [-\frac{Z_0}{\varepsilon^2}, 0]} \|v(x, y, z) - \Psi_{app}(x, y, z)\|_{H^s(\mathbb{R}^2)} \leq C\varepsilon$$

*Beweis.* Wir nutzen  $\|v - \Psi_{app}\| \leq \|v - P_{hyp}\Psi_{app}\| + \|P_{hyp}\Psi_{app} - \Psi_{app}\|$  mit  $P_{hyp}f = \mathcal{F}^{-1}[\chi\hat{f}]$  und

$$\chi(k_x, k_y) = \begin{cases} 1, & k_x^2 + k_y^2 < \frac{k^2}{2}, \\ 0, & \text{sonst.} \end{cases} \quad (4.31)$$

Sei  $\hat{\beta}(k_x, k_y) = k - \frac{k_x^2 + k_y^2}{2k}$  und  $\hat{\gamma}(k_x, k_y) = \left(1 + \frac{\hat{\kappa}}{\beta}\right)^{-1}$ . Wähle  $v$  als Lösung der Helmholtzgleichung (4.25) zu den Anfangsbedingungen

$$\begin{aligned} \hat{v}_0(k_x, k_y) &= 2\varepsilon^{-2}\hat{w}_1\left(\frac{k_x}{\varepsilon}, \frac{k_y}{\varepsilon}\right)\varepsilon^{-2}\chi(k_x, k_y)\hat{\gamma}(k_x, k_y) \\ \hat{v}_1(k_x, k_y) &= i\tilde{\kappa}\hat{v}_0(k_x, k_y) \end{aligned}$$

und  $w_2$  als Lösung von (4.29) zur Anfangsbedingung

$$\widehat{w}_2 \left( \frac{k_x}{\varepsilon}, \frac{k_y}{\varepsilon}, 0 \right) = \widehat{w}_1 \left( \frac{k_x}{\varepsilon}, \frac{k_y}{\varepsilon} \right) (2\widehat{\gamma}(k_x, k_y) - 1) \chi(k_x, k_y).$$

Dann gilt  $P_{hyp}\Psi_{app}(x, y, 0) = v(x, y, 0)$  und  $\partial_z P_{hyp}\Psi_{app}(x, y, 0) = \partial_z v(x, y, 0)$  nach Konstruktion<sup>1</sup> von  $v(\cdot, \cdot, 0), \partial_z v(\cdot, \cdot, 0), w_2(\cdot, \cdot, 0)$ . Außerdem gilt

$$\begin{aligned} 2\widehat{\gamma} - 1 &= 2 \left( \frac{\widehat{\beta} + \widehat{\kappa}}{\widehat{\beta}} \right)^{-1} - 1 \\ &= \frac{2\widehat{\beta}}{\widehat{\beta} + \widehat{\kappa}} - 1 \\ &= \frac{\widehat{\beta} - \widehat{\kappa}}{\widehat{\beta} + \widehat{\kappa}} \end{aligned}$$

und

$$\begin{aligned} \widehat{\beta}(k_x, k_y) &> 0 \\ \widehat{\beta}(k_x, k_y) + \widehat{\kappa}(k_x, k_y) &\neq 0 \\ \widehat{w}(k_x, k_y) &> 0 \end{aligned}$$

für alle  $(k_x, k_y) \in \mathbb{R}^2$  nach Definition<sup>2</sup> von  $\chi$  und wegen  $\Im(n_0) > 0$ . Somit sind die genannten Funktionen wohldefiniert. Für den Fehler  $R := v - P_{hyp}\Psi_{app}$  gilt

$$\Delta R + k^2 R = -\varepsilon^4 P_{hyp} (e^{ikz} \partial_z^2 w_1 + e^{-ikz} \partial_z^2 w_2)$$

mit den skalierten Variablen  $X = \varepsilon x, Y = \varepsilon y, Z = \varepsilon^2 z$ . Da  $w_1 \in C([0, z_0], H^{s_A}) \Rightarrow w_2 \in C([0, z_0], H^{s_A})$  gilt, folgt für  $S := -P_{hyp} (e^{ikz} \partial_z^2 w_1 + e^{-ikz} \partial_z^2 w_2)$

$$\begin{aligned} \|S\|_{L^2(dx, dy)} &\leq C_1 (\|w_1\|_{H^4(dx, dy)} + \|w_2\|_{H^4(dx, dy)}) \\ &= C_1 \varepsilon^{-1} (\|w_1\|_{H^4(dx, dy)} + \|w_2\|_{H^4(dx, dy)}) \\ &\leq C_2 \varepsilon^{-1}. \end{aligned}$$

<sup>1</sup>Beweis siehe Anhang A.2.8 auf Seite 128

<sup>2</sup>siehe Anhang A.2.8 auf Seite 128

Für die Energie  $E := \int_{\mathbb{R}^2} |\widehat{R}|^2 + |\widehat{\omega} \widehat{R}|^2 dk_x dk_y$  mit  $\widehat{\omega}^2 = k^2 - k_x^2 - k_y^2$  folgt damit

$$\begin{aligned} \partial_z E &\leq 2 \left| \Re \left( \int_{\mathbb{R}^2} \varepsilon \partial_z \widehat{R}^* \cdot \varepsilon^3 \widehat{S} dk_x dk_y \right) \right| \\ &\leq \varepsilon^2 \left\| \partial_z \widehat{R} \right\|_{L^2(dx, dy)}^2 + \varepsilon^6 \|S\|_{L^2(dx, dy)}^2 \\ &\leq \varepsilon^2 E + C_2 \varepsilon^4 \end{aligned}$$

und somit

$$E(z) \leq C_3 \varepsilon^2 \Rightarrow \|R\|_{L^2} \leq C_4 \varepsilon$$

für  $0 \leq |z| \leq \frac{z_0}{\varepsilon^2}$ . Da  $\text{supp}(\widehat{R}) \subset \text{supp}(\chi)$  kompakt ist, folgt die entsprechende Abschätzung in  $H^s(\mathbb{R}^2)$ .

Noch zu zeigen:  $\|P_{hyp} \Psi_{app} - \Psi_{app}\|_{H^s(\mathbb{R}^2)} \leq C\varepsilon$ . Da  $P_{hyp} w_2(\varepsilon x, \varepsilon y, \varepsilon^2 z) = w_2(\varepsilon x, \varepsilon y, \varepsilon^2 z)$  nach Definition von  $w_2$  gilt, folgt

$$\begin{aligned} \|P_{hyp} \Psi_{app} - \Psi_{app}\|_{H^s(\mathbb{R}^2)} &= \|P_{hyp} w_1(\varepsilon x, \varepsilon y, \varepsilon^2 z) - w_1(\varepsilon x, \varepsilon y, \varepsilon^2 z)\|_{H^s(\mathbb{R}^2)} \\ &\leq C_5 \varepsilon \end{aligned}$$

nach Beweis von Satz 4.2.3. Insgesamt ergibt sich

$$\sup_{0 \leq z \leq \frac{z_0}{\varepsilon^2}} \|v - \Psi_{app}\|_{H^s(\mathbb{R}^2)} \leq (C_4 + C_5) \varepsilon.$$

□

**Bemerkung 4.3.3.** *Im Metall wird das elektrische Feld exponentiell gedämpft und die Helmholtzgleichung ist mit (4.26) ein wohldefiniertes Anfangswertproblem, deshalb ist vor allem die Approximation in der Luft (Satz 4.3.2) relevant.*



# Ergebnisse

In diesem Kapitel wird zusammengefasst, was in dieser Dissertation erarbeitet wurde. Insbesondere werden die verschiedenen Kapitel in einen Kontext gesetzt, der es ermöglicht schnell einen Überblick zu erhalten.

## 5.1 Zusammenfassung

In dieser Dissertation wurde die Modellierung und Simulation des elektrischen Feldes beim Laserschneiden untersucht. In Kapitel 1.1 wurde untersucht, welche Effekte der Maxwellgleichungen relevant und welche vernachlässigbar für das vorliegende Problem sind. Daraus wurde die Helmholtzgleichung hergeleitet. Aus dieser wurde über die paraxiale Näherung die Schrödingergleichung motiviert, in Kapitel 4 wurde diese Approximationseigenschaft bewiesen (sowohl im Freiraum ohne Reflexionen als auch mit Reflexionen an einer senkrechten beziehungsweise waagrechten Wand).

Da die vorliegende Differentialgleichung mit entsprechenden Randbedingungen ausgestattet werden muss, wurde in Kapitel 1.2 der Übergang zwischen Luft und Metall (der Rand des Simulationsgebietes) untersucht. Es stellte sich heraus, dass man das elektrische Feld dort durch die Fresnelschen Formeln (Strahlenoptik) oder durch die Leontovitch-Randbedingungen (Wellenoptik) beschreiben kann.

Das resultierende Anfangswertproblem (2.5) ist zwar mathematisch wohlgestellt, jedoch numerisch sehr zeitaufwändig zu lösen, da das elektrische Feld schnell oszilliert. Dementsprechend wurden geeignete Vereinfachungen gesucht, die eine schnelle Simulation ermöglichen.

In Kapitel 2.1-3.1 wurden verschiedene Modelle dargelegt, die die in Kapitel 1 beschriebenen Effekte wiedergeben. Das Gesamtmodell, das in Kapitel 3.1 dargelegt wurde, ist eine Kombination der Schrödingerapproximation mit den Fresnelschen Formeln. Dabei wurden Beugungseffekte vernachlässigt und die paraxiale Näherung verwendet, um die Simulation zu beschleunigen. Die entsprechenden Anwendungen auf den Schlitzspalt sind in Kapitel 3.2

zu finden. Es ist eine genauere und allgemeinere Beschreibung der absorbierten Intensität im Vergleich zu bisherigen Modellen, zum Beispiel werden in [AAK<sup>+</sup>17] nur gaußförmige Intensitäten betrachtet oder in [Tie11] beträgt die Simulationszeit mehrere Tage.

Das resultierende Modell wurde in Kapitel 3.3 ausführlich validiert. Es stellt sich heraus, dass das Modell besonders genaue Aussagen trifft, wenn der Steigungswinkel der Geometrie relativ klein ist. Jedoch macht das Modell auch bei steilen Geometrien korrekte Aussagen, das genaue Anwendungsgebiet ist ebenfalls in Kapitel 3.3 beschrieben.

Somit kann man nun die absorbierte Leistung beim Laserschneiden besser simulieren und dadurch gezieltere Prozessoptimierungen durchführen. Außerdem kann nun die Schrödingergleichung der Helmholtzgleichung besser verstanden werden und der Weg wurde geebnet für weitere Approximationsresultate.

## 5.2 Ausblick

Diese Arbeit stellt eine Verbesserung des bisherigen Wissensstands dar: Sowohl bei der Modellierung des Laserschneidens als auch bei der Approximation der Helmholtzgleichung durch die Schrödingergleichung wurden Fortschritte erzielt. Weiter kann in den nächsten Schritten untersucht werden, wie man die Approximationsresultate in Kapitel 3.3 auf nichtlineare Probleme übertragen kann. Es wäre außerdem interessant zu sehen wie weitere Approximationsresultate für kompliziertere Geometrien aussehen.

Die Modellierung aus Kapitel 3.1 kann bisher schon auf eine große Klasse von Geometrien angewendet werden. Weitere offene Fragen sind zum Beispiel: Wie kann man die genutzten Näherungen weglassen ohne den Rechenaufwand merklich zu steigern? So bräuchte es neue Ansätze oder bessere numerische Methoden, um möglichst exakt und schnell zu rechnen. Es kann statt dem in Kapitel 3.1 dargestellten Modell eine numerische Methode genutzt werden, um die Helmholtzgleichung zu lösen. Dazu müsste man jedoch viel Zeit und verschiedene Ideen (Parallelisierung, Gebietszerlegung, adaptive Gitter, iterative Verfahren. . .) nutzen, um die Rechenzeit auf ein ähnliches Minimum ( $< 1$  Tag) zu minimieren. Man könnte auch das wellenoptische Modell länger simulieren beziehungsweise auf einem schnellen Simulationsrechner laufen lassen, um detailliertere Ergebnisse zu erhalten. Unabhängig von der Lösungsmethode wäre es interessant weitere wellenoptische Simulationen eines Multimodes zu betrachten. Zum Beispiel könnte die modal decomposition [PHB<sup>+</sup>20] genutzt werden, um die Anfangsbedingung für die wellenoptische Simulation zu erhalten. Hierbei kann auch die

Idee aus Kapitel 1.1.3.3 für die Simulation partieller Kohärenz genutzt werden. In vielen Fällen empfiehlt es sich die in Kapitel 2.1 neu gewonnenen Raytracingmodelle zu verwenden.

Unabhängig von der Wahl des Modells (wellenoptisches Modell, Raytracing, ...) ist es sehr interessant und für die Optimierung des Schneidprozesses von hoher Relevanz das Absorptionsmodell mit anderen Modellen zu kombinieren und somit eine Gesamtsimulation des Prozesses zu erhalten. Hierbei spielen sowohl die Wärmeleitung, als auch die Schmelze, sowie der Gasdruck und viele andere Einflüsse eine Rolle. Kombiniert man all diese Aspekte in einer Gesamtsimulation, können eventuell Qualitätsmerkmale wie Kantenrauheit oder Gratbildung auf bestimmte Schneidparameter zurückgeführt und somit der Schneidprozess gezielt optimiert werden. Das wäre eine weitere Verbesserung der bisherigen Arbeiten [VSN10, VS12] und müsste in enger Abstimmung mit der praktischen Schneiddurchführung geschehen.





# Anhang

Die folgenden Sätze und Definitionen werden im Text verwendet.

## A.1 Verwendete Sätze und Notationen

### A.1.1 Satz von Schwarz

Sei  $U \subseteq \mathbb{R}^n$  eine offene Menge sowie  $f : U \rightarrow \mathbb{R}$  mindestens  $k$ -mal partiell differenzierbar. Sind alle  $k$ -ten partiellen Ableitungen in  $U$  stetig, so ist  $f$   $k$ -mal total differenzierbar und insbesondere ist die Reihenfolge der Differentiationen in allen  $l$ -ten partiellen Ableitungen unerheblich für  $l \leq k$ . Wird ab Seite 14 verwendet.

### A.1.2 Divergenz und Rotation

Für ein Vektorfeld  $\mathbf{E} \in C^2(\mathbb{R}^3, \mathbb{R}^3)$  gilt  $\operatorname{div}(\operatorname{rot}(\mathbf{E})) = \nabla \cdot (\nabla \times \mathbf{E}) = 0$ . Wird ab Seite 14 verwendet.

### A.1.3 Definition Fouriertransformation

Die Fouriertransformation im Raum einer Funktion  $u$  zu den Variablen  $x$  und  $y$  wird mit  $\hat{u}$  bezeichnet und ist gegeben durch

$$\hat{u}(k_x, k_y) = \frac{1}{2\pi} \int_{\mathbb{R}^2} u(x, y) e^{-(ik_x x + ik_y y)} dx dy.$$

Für die Fouriertransformation in der Zeit wird folgende Notation verwendet:

$$\check{f}(\omega) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \int_{\mathbb{R}^2} f(t) e^{i\omega t} dt.$$

Allgemein gilt dementsprechend

$$\begin{aligned}\widehat{f}(\mathbf{k}) &= \mathcal{F}[f](\mathbf{k}) = \frac{1}{(2\pi)^{n/2}} \int_{\mathbb{R}^n} f(\mathbf{x}) e^{-i\mathbf{k}\mathbf{x}} \, d^n x \\ \check{f}(\mathbf{x}) &= \mathcal{F}^{-1}[f](\mathbf{x}).\end{aligned}$$

Wird ab Seite 14 verwendet.

### A.1.4 Sobolevraum

Der Sobolev-Raum

$$H^s(\mathbb{R}^2) = \{u \in L^2(\mathbb{R}^2) \mid \text{Die schwachen Ableitungen } D^\alpha u \in L^2(\mathbb{R}^2) \text{ existieren } \forall_{|\alpha| \leq s}\}$$

ist mit der Norm

$$\|u\|_{H^s(\mathbb{R}^2)} = \sum_{\substack{m_1+m_2 \leq s, \\ m_1, m_2 \in \mathbb{N}_0}} \left( \int_{\mathbb{R}^2} |\partial_x^{m_1} \partial_y^{m_2} u|^2 \, dx \, dy \right)^{1/2}$$

ausgestattet. Wir führen den gewichteten Lebesgue-Raum  $L_s^2(\mathbb{R}^2)$  mit der Norm

$$\|\widehat{u}\|_{L_s^2(\mathbb{R}^2)} = \left( \int_{\mathbb{R}^2} |\widehat{u}(k_x, k_y)|^2 \rho(\mathbf{k})^{2s} \, dk_x \, dk_y \right)^{1/2},$$

mit  $\rho(\mathbf{k}) = (1 + \mathbf{k}^2)^{1/2}$  und  $\mathbf{k}^2 = k_x^2 + k_y^2$  ein. Wird ab Seite 17 verwendet.

### A.1.5 Satz von Plancherel

Die Fouriertransformation  $\mathcal{F} : L^2(\mathbb{R}^n) \rightarrow L^2(\mathbb{R}^n)$  ist eine Isometrie, das heißt für alle  $f \in L^2(\mathbb{R}^n)$  gilt  $\mathcal{F}[f] \in L^2(\mathbb{R}^n)$  und  $\|\mathcal{F}[f]\|_{L^2(\mathbb{R}^n)} = \|f\|_{L^2(\mathbb{R}^n)}$ . Wird ab Seite 17 verwendet.

### A.1.6 Gaußscher Integralsatz

Es sei  $V \subseteq \mathbb{R}^n$  eine kompakte Menge mit abschnittsweise glattem Rand  $S = \partial V$ , der Rand sei orientiert durch einen äußeren Normaleneinheitsvektor  $\mathbf{n}$ . Ferner sei  $\mathbf{F} : \mathbb{R}^n \rightarrow \mathbb{R}^n$  stetig differenzierbar auf einer offenen Menge  $U$  mit  $V \subseteq U$ . Dann gilt

$$\int_V \operatorname{div}(\mathbf{F}) \, dV = \oint_S \mathbf{F} \cdot \mathbf{n} \, dA.$$

Wird ab Seite 25 verwendet.

### A.1.7 Satz von Fubini-Tonelli

Seien  $(\Omega_1, \mathcal{A}_1, \mu_1)$  und  $(\Omega_2, \mathcal{A}_2, \mu_2)$  zwei  $\sigma$ -endliche Maßräume und  $f : \Omega_1 \times \Omega_2 \rightarrow \mathbb{R}$  eine messbare Funktion. Falls eines der beiden Integrale

$$\int_{\Omega_2} \int_{\Omega_1} |f(x, y)| d\mu_1(x) d\mu_2(y) \quad \int_{\Omega_1} \int_{\Omega_2} |f(x, y)| d\mu_2(y) d\mu_1(x)$$

existiert, dann existiert auch das andere. Außerdem ist  $f$  bezüglich des Produktmaßes integrierbar und es gilt

$$\int_{\Omega_1 \times \Omega_2} f d(\mu_1 \otimes \mu_2) = \int_{\Omega_2} \int_{\Omega_1} f(x, y) d\mu_1(x) d\mu_2(y) = \int_{\Omega_1} \int_{\Omega_2} f(x, y) d\mu_2(y) d\mu_1(x)$$

Wird ab Seite 25 verwendet.

### A.1.8 Eigenschaften der Fouriertransformation

a)  $f(x)$  gerade und reellwertig  $\Leftrightarrow \hat{f}(k_x)$  gerade und reellwertig

*Beweis.* „ $\Rightarrow$ “

$$\begin{aligned} f(x) = f(-x) &\Rightarrow \hat{f}(-k_x) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \int_{\mathbb{R}} f(x) e^{ikx} dx = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \int_{\mathbb{R}} f(-u) e^{-iku} du \\ &= \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \int_{\mathbb{R}} f(u) e^{-iku} du = \hat{f}(k). \quad \checkmark \\ \hat{f}(k_x) &= \frac{1}{2} (\mathcal{F}[f(x)] + \mathcal{F}[f(-x)]) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \int_{\mathbb{R}} f(x) \cos(\cdot x) dx \in \mathbb{R}. \quad \checkmark \end{aligned}$$

„ $\Leftarrow$ “ Analog mit  $\mathcal{F}^{-1}$  statt  $\mathcal{F}$ . □

b)  $\mathcal{F}[f(x - x_0)](k_x) = \mathcal{F}[f(x)](k_x) e^{-ik_x x_0}$

*Beweis.*

$$\begin{aligned} \mathcal{F}[f(x - x_0)](k_x) &= \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \int_{\mathbb{R}} f(x - x_0) e^{-ikx} dx = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \int_{\mathbb{R}} f(u) e^{-ik(u+x_0)} du \\ &= \mathcal{F}[f(x)](k_x) e^{-ik_x x_0}. \end{aligned}$$

□

Wird ab Seite 45 verwendet

### A.1.9 Methode der kleinsten Quadrate

Seien  $m, n \in \mathbb{N}$  mit  $m \geq n$ . Falls  $A \in \mathbb{R}^{m \times n}$  vollen Spaltenrang besitzt, hat das Minimierungsproblem unter Nebenbedingungen

$$\min_{\mathbf{x} \geq 0} \|\mathbf{A}\mathbf{x} - \mathbf{b}\|_{\mathbb{R}^m}^2$$

genau eine Lösung. Wird ab Seite 59 verwendet.

### A.1.10 Satz von Weierstraß

Es sei  $(M, d)$  ein metrischer Raum und  $X$  sei eine kompakte Teilmenge von  $M$ . Die Funktion  $f : X \rightarrow \mathbb{R}$  sei stetig in  $X$ . Dann ist das Bild  $f(X)$  beschränkt und es existieren Elemente  $x_{\pm} \in X$ , sodass

$$f(x_-) = \min_{x \in X} f(x), f(x_+) = \max_{x \in X} f(x).$$

Wird ab Seite 59 verwendet.

### A.1.11 Integralsatz von Stokes

Sei  $\mathbf{f}$  ein stetig differenzierbares Vektorfeld. Dann gilt

$$\int_S \text{rot}(\mathbf{f}) \cdot \mathbf{dA} = \int_{\partial S} \mathbf{f} \cdot \mathbf{ds}.$$

Wird auf Seite 123 verwendet

## A.2 Nebenrechnungen

Hier finden sich Rechnungen, die im bisherigen Text ausgelassen wurden.

### A.2.1 Untere Schranke für die Strahlqualität

Für ein allgemeines Feld  $E(\cdot, \cdot, z) \in H^{1,2}(\mathbb{R}^2)$  mit  $\widehat{E}(\cdot, \cdot, z) \in H^{1,2}(\mathbb{R}^2)$  gilt

$$\frac{\lambda}{\pi} \leq w_0 \cdot \phi = w(0) \cdot \lim_{z \rightarrow \infty} \arctan \left( \frac{w(z)}{z} \right), \quad (\text{A.1})$$

Das heißt  $M^2 := w_0 \cdot \phi \cdot \frac{\pi}{\lambda} \geq 1$ . Diese Aussage ist in (1.8) auf Seite 17 zu finden und wird nun bewiesen.

*Beweis.* Sei dazu  $H$  ein Hilbertraum und seien  $T : D(T) \subset H \rightarrow H$ ,  $S : D(S) \subset H \rightarrow H$  Operatoren auf diesem Hilbertraum. Wir definieren

$$\begin{aligned} D &:= D(T) \cap D(T^2) \cap D(S) \cap D(S^2), \\ \langle T \rangle_\psi &:= \langle \psi, T\psi \rangle_H \\ \text{var}_\psi(T) &:= \langle (T - \langle T \rangle_\psi \mathbb{1}_H)^2 \rangle_\psi = \langle T^2 \rangle_\psi - \langle T \rangle_\psi^2 \\ (\Delta T)_\psi &:= \sqrt{\text{var}_\psi(T)} \end{aligned}$$

für<sup>1</sup>  $\psi \in D$ . Sei  $T = T^*$ ,  $S = S^*$  und  $C := -i(ST - TS)$ , dann gilt

$$(\Delta S)_\psi (\Delta T)_\psi \geq \frac{|\langle C \rangle_\psi|}{2}. \quad (\text{A.2})$$

für alle  $\psi \in D$ . Diese Aussage ist für beliebige  $T = T^*$ ,  $S = S^*$ ,  $\psi \in D$  gültig. Insbesondere gilt sie für fixe  $T, S$  und beliebige  $\psi \in D$ .

*Beweis.* Sei  $a := \langle S \rangle_\psi$ ,  $b := \langle T \rangle_\psi$ ,  $S_0 := S - a$  und  $T_0 := T - b$ , dann gilt

$$S_0 T_0 - T_0 S_0 = ST - TS = iC, \quad (\text{A.3})$$

$$\|S_0 \psi\|_H = \sqrt{\langle S_0 \psi, S_0 \psi \rangle_H} \stackrel{S^*=S}{=} \sqrt{\langle \psi, S_0^2 \psi \rangle_H} = (\Delta S)_\psi, \quad (\text{A.4})$$

$$\|T_0 \psi\|_H = \dots (\text{analog}) \dots = (\Delta T)_\psi. \quad (\text{A.5})$$

Außerdem gilt

$$\begin{aligned} 2i\Im \langle S_0 \psi, T_0 \psi \rangle_H &= \langle S_0 \psi, T_0 \psi \rangle_H - \langle T_0 \psi, S_0 \psi \rangle_H \\ &= \langle \psi, (S_0 T_0 - T_0 S_0) \psi \rangle_H \\ &\stackrel{(\text{A.3})}{=} -i \langle \psi, C \psi \rangle_H \\ \Rightarrow \Im \langle S_0 \psi, T_0 \psi \rangle_H &= -\frac{1}{2} \langle \psi, C \psi \rangle_H. \end{aligned} \quad (\text{A.6})$$

<sup>1</sup>Alle Größen sind von  $\psi$  abhängig. Das ist im Moment eine beliebige Funktion, später wird  $\psi = E$  eine sinnvolle Wahl sein.

Daraus folgt

$$\begin{aligned}
(\Delta S)_\psi (\Delta T)_\psi &\stackrel{(A.4)}{=} \|S_0\psi\|_H \|T_0\psi\|_H \\
&\stackrel{(A.5)}{\geq} |\langle S_0\psi, T_0\psi \rangle_H| \\
&\geq |\Im \langle S_0\psi, T_0\psi \rangle_H| \\
&\stackrel{(A.6)}{=} \frac{1}{2} |\langle \psi, C\psi \rangle_H| \\
&= \frac{|\langle C \rangle_\psi|}{2}.
\end{aligned}$$

Ende des Beweises von (A.2) □

Wir betrachten den normierten Impulsoperator  $T = i\partial_x$  und den Ortsoperator  $S = x$ . Daraus folgt

$$\begin{aligned}
C &= -i(ST - TS) = -i(x\partial_x - \partial_x x) = -i(x\partial_x - 1 - x\partial_x) = i \\
&\Rightarrow |\langle C \rangle_\Psi| = 1
\end{aligned} \tag{A.7}$$

Um die weitere Rechnungen zu vereinfachen, betrachten wir ohne Beschränkung der Allgemeinheit symmetrische Funktionen  $\psi$ , die auf  $\|\Psi\|_{L^2(\mathbb{R}^2)} = 1$  normiert wurden. Für diese gilt  $\langle T \rangle_\psi = 0 = \langle S \rangle_\psi$  und somit gilt

$$\begin{aligned}
\Delta x &:= (\Delta S)_\psi = \sqrt{\langle S^2 \rangle_\psi - \langle S \rangle_\psi^2} = \sqrt{\langle S^2 \rangle_\psi} \\
&= \sqrt{\int_{\mathbb{R}} x^2 |\psi(x)|^2 dx} = \|x\psi\|_{L^2(\mathbb{R})} = \frac{w_0}{2}, \\
\Delta p &:= (\Delta T)_\psi = \sqrt{\langle T^2 \rangle_\psi - \langle T \rangle_\psi^2} = \sqrt{\langle T^2 \rangle_\psi} = \sqrt{-\int_{\mathbb{R}} \psi^*(x) \psi''(x) dx} \\
&\stackrel{\substack{\text{part. Int.} \\ \psi \in H^1(\mathbb{R})}}{=} \sqrt{\int_{\mathbb{R}} |\psi'(x)|^2 dx} = \|\psi'\|_{L^2(\mathbb{R})} = \|k_x \widehat{\psi}\|_{L^2(\mathbb{R})}
\end{aligned}$$

Daraus folgt

$$\Delta x \Delta p = \frac{w_0}{2} \|k_x \widehat{\psi}\|_{L^2(\mathbb{R})}. \tag{A.8}$$

Dabei entspricht  $k_0 := 2 \|k_x \widehat{\psi}\|_{L^2(\mathbb{R})}$  an, dem doppelten Erwartungswert von  $k_x$ . Diesem  $k_0$

kann man durch einfache geometrische Überlegungen einen Winkel  $\phi$  zuweisen:

$$\Rightarrow \sin(\phi) = \frac{k_0}{k}$$

Es folgt

$$\begin{aligned} \sin(\phi) &= \frac{2 \left\| k_x \widehat{\psi} \right\|_{L^2(\mathbb{R})}}{k} \Leftrightarrow \left\| k_x \widehat{\psi} \right\|_{L^2(\mathbb{R})} = \frac{\sin(\phi)k}{2} \\ \stackrel{(A.8)}{\Rightarrow} \Delta x \Delta p &= \frac{w_0 \sin(\phi)k}{2} \stackrel{(A.2)}{\geq} \frac{1}{2} \stackrel{(A.7)}{\Leftrightarrow} w_0 \sin(\phi) \geq \frac{2}{k} = \frac{\lambda}{\pi} \\ \Rightarrow w_0 \phi &\geq w_0 \sin(\phi) \geq \frac{\lambda}{\pi} \end{aligned}$$

für jede Funktion  $\psi \in H^2(\mathbb{R})$ . Insbesondere gilt: Der Durchmesser  $w_0$  des elektrischen Feldes  $E$  und der Divergenzwinkel  $\phi$  erfüllen  $w_0 \phi \geq \lambda/\pi$ .  $\square$

## A.2.2 Polarisation

Im folgenden Text soll eine möglichst allgemeine Materialgleichung untersucht werden, die  $\mathbf{E}$  und  $\mathbf{B}$  miteinander verbindet. Daraus wird der Spezialfall (1.9) auf Seite 21 hergeleitet. Es gilt [FLS07, S. 644]: „ $D = \varepsilon E, B = \mu H$  ist nur näherungsweise für einige Materialien richtig [...]; für beliebige Zeitabhängigkeit der Felder ist das nicht möglich.“ Die Annahme  $\mathbf{D} = \varepsilon_0 \varepsilon_r \mathbf{E}, \mathbf{B} = \mu_0 \mu_r \mathbf{H}$  gilt zum Beispiel für ebenen Wellen in linearen isotropen Medien. Im Allgemeinen gilt

$$\mathbf{D} = \varepsilon_0 \mathbf{E} + \mathbf{P}$$

mit der (elektrischen) Polarisation  $\mathbf{P}$ . Diese entspricht einer Ladungsverschiebung innerhalb der Atome/Moleküle. Den stärksten Einfluss auf die Polarisation haben Dipolmomente [Jac07, S. 255]: Das elektrische Feld  $\mathbf{E}$  erzeugt mikroskopische Dipolmomente im Material, die wiederum ein elektrisches Feld erzeugen, das mit dem eintreffenden elektrischen Feld interagiert. Analoges gilt für die magnetischen Felder,  $\mathbf{B}$  und  $\mathbf{H}$  sind durch die Hystereseurve verknüpft und es gilt  $\mathbf{B} = \mu_0 \mathbf{H} + \mathbf{M}$ .

Im Folgenden Abschnitt soll der allgemeine Zusammenhang zwischen elektrischen Feld und

Polarisation diskutiert werden. Das allgemeinste Modell, das  $\mathbf{P} \leftrightarrow \mathbf{E}$  verbindet, ist

$$P_j(\mathbf{x}, t) = \varepsilon_0 \left( \sum_{k=1}^3 \int_{\mathbb{R}^4} \chi_{jk}^{(1)}(\mathbf{x} - \mathbf{y}_1, t - \tau_1) E_k(\mathbf{y}_1, \tau_1) d\tau_1 d^3 y_1 \right. \\ \left. + \sum_{k,l=1}^3 \int_{\mathbb{R}^8} \chi_{jk}^{(2)}(\mathbf{x} - \mathbf{y}_1, \mathbf{x} - \mathbf{y}_2, t - \tau_1, t - \tau_2) \times \right. \\ \left. E_k(\mathbf{y}_1, \tau_1) E_l(\mathbf{y}_2, \tau_2) d\tau_1 d^3 y_1 d\tau_2 d^3 y_2 + \dots \right).$$

Dabei ist  $\chi^{(n)}$  ein Tensor  $(n+1)$ -ter Stufe. Räumliche Dispersionseffekte sind jedoch meistens sehr schwach und schwierig zu modellieren [Nov13, S. 34]. Demensprechend kann man getrost nur zeitliche Dispersion betrachten:

$$P_j(\mathbf{x}, t) = \varepsilon_0 \left( \sum_{k=1}^3 \int_{\mathbb{R}} \chi_{jk}^{(1)}(t - \tau_1) E_k(\mathbf{x}, \tau_1) d\tau_1 \right. \\ \left. + \sum_{k,l=1}^3 \int_{\mathbb{R}^2} \chi_{jk}^{(2)}(t - \tau_1, t - \tau_2) E_k(\mathbf{x}, \tau_1) E_l(\mathbf{x}, \tau_2) d\tau_1 d\tau_2 + \dots \right).$$

Diese Darstellung ist zum Beispiel in [NM92, S. 31] zu finden. Ist das Material isotrop oder richtet man die Koordinatenachsen entlang bestimmter Symmetrieachsen (zum Beispiel in einem Kristall) aus, folgt

$$P_j(\mathbf{x}, t) = \varepsilon_0 \left( \int_{\mathbb{R}} \chi^{(1)}(t - \tau_1) E_j(\mathbf{x}, \tau_1) d\tau_1 + \int_{\mathbb{R}^2} \chi^{(2)}(t - \tau_1, t - \tau_2) E_j^2(\mathbf{x}, \tau_1) d\tau_1 d\tau_2 + \dots \right) \\ = \varepsilon_0 (\chi^{(1)} * \mathbf{E} + \chi^{(2)} * \mathbf{E}\mathbf{E} + \dots).$$

mit dem zeitlichen Faltungsoperator  $*$ . Meistens gilt  $\chi^{(2)} = 0$  [NM92, S. 32f], zum Beispiel in zentrosymmetrischen (insbesondere in isotropen) Materialien [Rei16, S. 352]. Vernachlässigt man die nichtlinearen Effekte, die hauptsächlich bei hohen Laserleistungen (z.B. bei Ultrakurzpulslasern) relevant sind, ergibt sich

$$P_j(\mathbf{x}, t) = \varepsilon_0 \int_{\mathbb{R}} \chi^{(1)}(t - \tau_1) E_j(\mathbf{x}, \tau_1) d\tau_1 \\ \Leftrightarrow \mathbf{P}(\mathbf{x}, \cdot) = \varepsilon_0 \chi^{(1)} * \mathbf{E}(\mathbf{x}, \cdot) \quad (\text{A.9})$$



Gesucht ist nun nur noch  $\chi^{(1)}(\omega)$ . Das Lorentz-Modell besagt

$$\check{\mathbf{P}} = \frac{e^2}{m} \frac{1}{\omega_0^2 + i\gamma\omega - \omega^2} \check{\mathbf{E}} \quad (\text{A.10})$$

für ein Elektron mit Ladung  $e$ , Masse  $m$  und Eigenfrequenz  $\omega_0$ . Der Parameter  $\gamma$  stellt die Dämpfungsrate der Schwingung dar und  $\check{\mathbf{P}}, \check{\mathbf{E}}$  die Fouriertransformation in der Zeit  $t \leftrightarrow \omega$ , wie sie im Anhang A.1.3 definiert wurde. Der Spezialfall  $\mathbf{D}(\mathbf{x}, t) = \varepsilon_0 \varepsilon_r \mathbf{E}(\mathbf{x}, t)$  mit einem  $\varepsilon_r \in \mathbb{C}$  folgt zum Beispiel für ein monochromatisches Feld  $\mathbf{E}$  mit Frequenz  $\omega_L$ :

$$(A.9) \Rightarrow \mathbf{P}(\mathbf{x}, t) = \varepsilon_0 \check{\chi}^{(1)}(\omega_L) \mathbf{E}(\mathbf{x}, t) \Rightarrow \mathbf{D}(\mathbf{x}, t) = \varepsilon_0 (1 + \check{\chi}^{(1)}(\omega_L)) \mathbf{E}(\mathbf{x}, t) =: \varepsilon_0 \varepsilon_r \mathbf{E}(\mathbf{x}, t).$$

Somit ist (1.9) ein Spezialfall der hier dargelegten allgemeinen Beschreibung.

### A.2.3 Intensität einer ebenen Welle

Wie in Kapitel 1.1.3 bereits beschrieben wurde, gilt  $\langle \check{\mathbf{S}} \rangle_t = \frac{\Re(i\mathbf{E} \times (\nabla \times \mathbf{E}))}{2\omega\mu}$  mit dem reellen Poyntingvektor  $\check{\mathbf{S}}$  und dem komplexen Feld  $\mathbf{E}$ . Aus den Maxwellgleichungen folgt  $i\omega\mu_0 \mathbf{H} = \nabla \times \mathbf{E}$ , für eine ebene Welle  $\mathbf{E} = \mathbf{E}_0 e^{-i\mathbf{k}\mathbf{x}}$  bedeutet das  $i\omega\mu_0 \mu_r \mathbf{H} = i\mathbf{k} \times \mathbf{E}$ , daraus folgt

$$\langle \mathbf{S} \rangle = \frac{1}{2\omega\mu_0\mu_r} \Re(\mathbf{E} \times (\mathbf{k} \times \mathbf{e}^*)).$$

Außerdem folgt für eine ebene Welle

$$\begin{aligned} \mathbf{k}\mathbf{E} = 0 &\Rightarrow \mathbf{E} \times (\mathbf{k} \times \mathbf{e}^*) = (\mathbf{E}\mathbf{e}^*)\mathbf{k} - (\mathbf{E}\mathbf{k})\mathbf{e}^* = |\mathbf{E}|^2 \mathbf{k} - 0 \\ &\Rightarrow \langle \mathbf{S} \rangle = \frac{1}{2\omega\mu_0\mu_r} \Re(|\mathbf{E}|^2 \mathbf{k}) = \frac{1}{2\omega\mu_0\mu_r} |\mathbf{E}|^2 \mathbf{k}. \end{aligned}$$

Mit  $\omega = c|\mathbf{k}|$  und  $\varepsilon_0\mu_0 c^2 = 1$  folgt

$$\begin{aligned} I = \langle \mathbf{S} \rangle \cdot \mathbf{n} &= \frac{\|\mathbf{k}\|}{2\omega\mu_0\mu_r} \|\mathbf{E}\|^2 \\ &= \frac{\varepsilon_0 c}{2\mu_r} \|\mathbf{E}\|^2, \end{aligned} \quad (\text{A.11})$$

für  $\mathbf{n} = \frac{\mathbf{k}}{\|\mathbf{k}\|_{\mathbb{R}^3}}$ . Das wird in (1.14) auf Seite 25 und Gleichung (1.19) auf Seite 27 verwendet. Außerdem möchte ich hier den Pointingvektor einer Überlagerung von zwei ebenen Wellen

betrachten: Für  $\mathbf{E} = \mathbf{E}_0(\cos(\mathbf{k}_1\mathbf{x} - \omega t) + \cos(\mathbf{k}_2\mathbf{x} - \omega t))$  gilt

$$\langle \mathbf{E} \times \mathbf{H} \rangle = \frac{\|\mathbf{E}_0\|^2}{2\omega\mu} (1 + \cos((\mathbf{k}_1 - \mathbf{k}_2)\mathbf{x}))(\mathbf{k}_1 + \mathbf{k}_1).$$

Der Poyntingvektor fluktuiert also nicht nur in der Zeit, sondern auch (langsamer) im Ort. Eine räumliche Mittelung ergibt

$$\langle \mathbf{E} \times \mathbf{H} \rangle \approx \frac{\|\mathbf{E}_0\|^2}{2\omega\mu} (\mathbf{k}_1 + \mathbf{k}_1)$$

und somit

$$\mathbf{S}_{E_1+E_2} \approx \mathbf{S}_{E_1} + \mathbf{S}_{E_2}.$$

#### A.2.4 Verhalten der Felder an Grenzflächen

Wir untersuchen nun, wie sich die Felder am Übergang zwischen zwei Materialien verhalten. Die Grenzfläche zwischen den zwei Materialien soll lokal durch eine Ebene approximiert werden können (da ist z.B. für einen  $C^1$ -Rand möglich). Sei  $F$  ein Rechteck, dessen zwei Seiten parallel zur Grenzfläche sind. Nach dem Induktionsgesetz der Maxwellgleichungen (1.1) und dem Satz von Stokes gilt  $\oint_{\partial F} \mathbf{E} \cdot d\mathbf{s} = - \int_F \dot{\mathbf{B}} \cdot d\mathbf{F}$ . Es gilt  $\partial F = \gamma_1 \cup \gamma_2 \cup \gamma_3 \cup \gamma_4$  mit  $|\gamma_1| = |\gamma_3| =: \delta L$  und  $|\gamma_2| = |\gamma_4| =: \delta h$ . Es gilt

$$\begin{aligned} \mathbf{E} \text{ beschränkt} &\Rightarrow \int_{\gamma_2 \cup \gamma_4} \mathbf{E} \cdot d\mathbf{s} \xrightarrow{\delta h \rightarrow 0} 0, \\ \dot{\mathbf{B}} \text{ beschränkt} &\Rightarrow \int_F \dot{\mathbf{B}} \cdot d\mathbf{F} \xrightarrow{\delta h \rightarrow 0} 0 \\ &\Rightarrow \lim_{\delta h \rightarrow 0} \int_{\gamma_1 \cup \gamma_3} \mathbf{E} \cdot d\mathbf{s} = 0 \Leftrightarrow \int_{\gamma} (\mathbf{E}_2 - \mathbf{E}_1) \cdot d\mathbf{s} = 0. \end{aligned}$$

Da der Schnitt  $\gamma$  des Rechtecks  $F$  mit der Grenzfläche beliebig sein kann, gilt  $\mathbf{E}_2 = \mathbf{E}_1$ , das heißt

$$\text{die Tangentialkomponente } \mathbf{n} \times \mathbf{E} \text{ von } \mathbf{E} \text{ ist stetig} \tag{A.12}$$

auf der Grenzfläche. Um zu zeigen, dass die Normalkomponente von  $B$  stetig ist, betrachtet man einen Würfel auf der Grenzfläche. Man lässt die Höhe gegen Null gehen, sodass die beiden Würfelseiten an der Grenzfläche aufeinander treffen. Mit  $\nabla \cdot \mathbf{B} = 0$  aus den Maxwell-

gleichungen (1.1) und dem Satz von Stokes<sup>2</sup> folgt, dass  $\mathbf{n} \cdot \mathbf{B}$  stetig ist:

$$0 = \int_V \nabla \cdot \mathbf{B} \, dV = \oint_{\partial V} \mathbf{B} \cdot d\mathbf{F} \xrightarrow{\delta h \rightarrow 0} \int_A (\mathbf{B}_2 - \mathbf{B}_1) \cdot \mathbf{n} \, dA$$

Analog kann man Stetigkeitsbedingungen für  $\mathbf{D}$  und  $\mathbf{H}$  herleiten. Sei  $\mathbf{n}$  wieder der Normalenvektor an der Grenzfläche, dann gilt insgesamt [Jac07, S.18]

$$\begin{aligned} \mathbf{n} \times (\mathbf{E}_2 - \mathbf{E}_1) &= 0 \\ \mathbf{n} \cdot (\mathbf{D}_2 - \mathbf{D}_1) &= \tilde{\rho} \\ \mathbf{n} \cdot (\mathbf{B}_2 - \mathbf{B}_1) &= 0 \\ \mathbf{n} \times (\mathbf{H}_2 - \mathbf{H}_1) &= \tilde{\mathbf{j}}. \end{aligned}$$

Dabei ist  $\tilde{\rho}$  die Ladungsdichte auf der Oberfläche und  $\tilde{\mathbf{j}}$  die Stromdichte auf der Oberfläche.

### A.2.5 Herleitung der Fresnelschen Formeln

Gleichungen (1.20) und (1.21) von Seite 28 kann man mit einer linearen Dispersionsrelation wie in Gleichung (A.9) direkt aus den Maxwellgleichungen herleiten: Wegen  $\mathbf{f}(x, t) = \frac{1}{(2\pi)^2} \int_{\mathbb{R}^4} \hat{\mathbf{f}}(\mathbf{k}, \omega) e^{i(\mathbf{k}\mathbf{x} - \omega t)} d^3k d\omega$  für jede fouriertransformierbare Funktion  $\mathbf{f}$  reicht es nur eine Fouriermode  $\mathbf{E}(x, t) = \mathbf{E}_0 e^{i(\mathbf{k}\mathbf{x} - \omega t)}$ ,  $\mathbf{B}(x, t) = \mathbf{B}_0 e^{i(\mathbf{k}\mathbf{x} - \omega t)}$  zu betrachten. Es gilt also  $\mathbf{D} = \varepsilon \mathbf{E}$ ,  $\mathbf{B} = \mu \mathbf{H}$  nach (A.9). Die Mode  $\mathbf{E}$  wird am Übergang zum zweiten Material reflektiert und absorbiert. Es bilden sich dementsprechend 3 Wellen:

$$\begin{aligned} \mathbf{E}_0 &= \mathbf{E}_{0,0} e^{i(\mathbf{k}_0 \mathbf{x} - \omega_1 t + \delta_1)} \text{ einfallende Welle,} \\ \mathbf{E}_1 &= \mathbf{E}_{0,1} e^{i(\mathbf{k}_1 \mathbf{x} - \omega_2 t + \delta_2)} \text{ reflektierte Welle,} \\ \mathbf{E}_2 &= \mathbf{E}_{0,2} e^{i(\mathbf{k}_2 \mathbf{x} - \omega_3 t + \delta_3)} \text{ absorbierte Welle.} \end{aligned}$$

Die Tangentialkomponente des elektrischen Feldes muss am Grenzübergang stetig sein, das entspricht (A.12) und folgt direkt aus (1.1). Daraus folgt  $\omega_0 = \omega_1 = \omega_2 =: \omega$  (Gegenannahme führt auf  $z_1 \mathbf{E}_0(t=0) + z_2 \mathbf{E}_1(t=0) = z_3 \mathbf{E}_2(t=0)$  für alle  $|z_1| = |z_2| = |z_3| = 1$ , das heißt  $\mathbf{E}_0 = \mathbf{E}_1 = \mathbf{E}_2 = 0$ ). Eine analoge Argumentation liefert, dass die Exponenten der drei Wellen in der Grenzschicht (Ohne Beschränkung der Allgemeinheit  $z=0$ ) gleich sein müssen. Daraus folgt

$$(k_{2,x} - k_{0,x})x + (k_{2,y} - k_{0,y})y + (k_{2,z} - k_{0,z})0 + \delta_2 - \delta_0 \stackrel{!}{=} 0.$$

<sup>2</sup>Siehe Anhang A.1.11 auf Seite 116

Da diese Gleichung unabhängig von der Wahl des Koordinatensystems (genauer gesagt des Ursprungs) gelten muss, folgt  $k_{2,x} = k_{0,x}$  und  $k_{2,y} = k_{0,y}$ . Analog folgt  $k_{1,x} = k_{0,x}$  und  $k_{1,y} = k_{0,y}$ , das heißt alle drei  $k$ -Vektoren liegen auf einer Geraden und somit insbesondere in einer Ebene. Außerdem gilt mit (A.9)  $\mathbf{k}_0^2 = \omega^2 n_1^2 / c^2 = \mathbf{k}_1^2$ , das heißt  $k_{1,z} = -k_{0,z}$  (Einfallswinkel gleich Ausfallswinkel, das wird unter anderem in (3.1) auf Seite 73 genutzt). Aus den Maxwellgleichungen (1.1) und Gleichung folgt

$$\omega \mathbf{B} = \mathbf{k} \times \mathbf{E} \quad (\text{A.13})$$

und

$$\mathbf{k} \cdot \mathbf{E} \stackrel{(\text{A.9})}{=} 0. \quad (\text{A.14})$$

Sei  $\mathbf{k} = (k_x, 0, k_z)$ , dann folgt  $\mathbf{E} = (E_x, E_y, -E_x k_x / k_z)$  aus (A.14). Mit (A.13) folgt daraus  $B_x = -\frac{k_z}{\omega} E_y$ . Die Normalkomponente  $B_x$  von  $\mathbf{B}$  ist stetig an der Grenzfläche, d.h.  $B_{1,x} + B_{2,x} = B_{3,x}$ . Mit  $k_{1,z} = -k_{0,z}$  folgt  $k_{2,z} E_{2,y} = k_{0,z} (E_{0,y} - E_{1,y})$ . Aus der Stetigkeit von  $E_y$  folgt

$$E_{1,y} = \frac{\frac{k_{0,z}}{k_{2,z}} - 1}{\frac{k_{0,z}}{k_{2,z}} + 1} E_{0,y} = \frac{k_{0,z} - k_{2,z}}{k_{0,z} + k_{2,z}} E_{0,y}$$

Aus

$$\mathbf{k} = (k_x, 0, k_z) = \frac{\omega n}{c} (\sin(\theta), 0, \cos(\theta))$$

folgt dementsprechend

$$r_s := \frac{E_{1,y}}{E_{0,y}} = \frac{n_1 \cos(\theta_0) - n_2 \cos(\theta_2)}{n_1 \cos(\theta_0) + n_2 \cos(\theta_2)}. \quad (\text{A.15})$$

Gleichung (A.15) kann man mit dem Snelliusschen Brechungsgesetz  $n_1 \sin(\theta_0) = n_2 \sin(\theta_2)$  und  $\sin^2(\theta_0) + \cos^2(\theta_0) = 1$  umschreiben<sup>3</sup> zu

$$r_s = \frac{n_1 \cos(\theta_0) - \sqrt{n_2^2 - n_1^2 \sin^2(\theta_0)}}{n_1 \cos(\theta_0) + \sqrt{n_2^2 - n_1^2 \sin^2(\theta_0)}}$$

Analog kann man  $r_p$  herleiten: Damit  $\mathbf{E}$  parallel zur Einfallsebene  $y = 0$  ist, muss

---

<sup>3</sup>es gilt  $0 < \cos(\theta_0) = \sqrt{1 - \sin^2(\theta_0)}$ , weil  $|\theta_0| < \frac{\pi}{2}$  gilt

$\mathbf{B} = (0, B_y, 0)$  sein. Es folgt

$$r_p := \frac{B_{1,y}}{B_{0,y}} = \frac{n_2^2 \cos(\theta_0) - n_1 \sqrt{n_2^2 - n_1^2 \sin^2(\theta_0)}}{n_2^2 \cos(\theta_0) + n_1 \sqrt{n_2^2 - n_1^2 \sin^2(\theta_0)}}$$

Die entsprechenden Transmissionskoeffizienten lassen sich folgendermaßen berechnen [Rei16, S. 48]:

$$t_s = \frac{2n_1 n_2 \cos(\theta_0)}{n_1 n_2 \cos(\theta_0) + n_2 \sqrt{n_2^2 - n_1^2 \sin^2(\theta_0)}},$$

$$t_p = \frac{2n_1 n_2 \cos(\theta_0)}{n_2^2 \cos(\theta_0) + n_1 \sqrt{n_2^2 - n_1^2 \sin^2(\theta_0)}}.$$

Der Reflexions- bzw. Absorptionsgrad ist

$$R := \frac{I_1}{I_0} = |r|^2 \quad T := \frac{I_2}{I_0} = \left| \Re \left( \frac{\sqrt{n_2^2 - n_1^2 \sin^2(\theta_0)}}{n_1 \cos(\theta_0)} \right) \right| |t|^2,$$

somit gilt  $R + T = 1$ . Diese Formeln gelten auch für komplexe Brechungsindizes  $N_1 = n_1 + i\kappa_1$  und  $N_2 = n_2 + i\kappa_2$ .

## A.2.6 Vereinfachte Bedingung für das Winkelspektrum

Nun wollen wir beweisen, dass auf Seite 45 die allgemeine Bedingung (2.12) und die vereinfachte Bedingung (2.14) äquivalent sind. Aufgrund der Skalierungseigenschaften der Fouriertransformation ist (2.12) äquivalent zu

$$\frac{d}{dz} \frac{\mathcal{F}[I_z] \left( \frac{k}{z} u, \frac{k}{z} v \right)}{\mathcal{F}[I_0] \left( \frac{k}{z} u, \frac{k}{z} v \right)} = 0 \tag{A.16}$$

für alle  $(u, v, z) \in \mathbb{R}^2 \times \mathbb{R}^+$ . Gleichungen (2.13) impliziert

$$I(x, y, z) = I_0 \left( \frac{w_0}{w(z)} x, \frac{w_0}{w(z)} y \right) \frac{w_0^2}{w^2(z)}$$

$$\Leftrightarrow \mathcal{F}[I_z](k_x, k_y) = \mathcal{F}[I_0] \left( \frac{w(z)}{w_0} k_x, \frac{w(z)}{w_0} k_y \right). \tag{A.17}$$

Als Nächstes beweisen wir, dass (A.16) äquivalent ist zu

$$\partial_j f \left( \frac{w(z)}{w_0} k_x, \frac{w(z)}{w_0} k_y \right) \frac{w_0}{w(z)} f(k_x, k_y) = \partial_j f(k_x, k_y) f \left( \frac{w(z)}{w_0} k_x, \frac{w(z)}{w_0} k_y \right) \tag{A.18}$$

mit  $f(k_x, k_y) := \mathcal{F}[I_0](k_x, k_y)$  und  $j \in \{1, 2\}$ . Verwenden Sie dazu die Quotientenregel auf (A.16):

$$\begin{aligned} \frac{d}{dz} \frac{f\left(\frac{w(z)}{w_0} \frac{k}{z} u, \frac{w(z)}{w_0} \frac{k}{z} v\right)}{f\left(\frac{k}{z} u, \frac{k}{z} v\right)} &= 0 \\ \Leftrightarrow \left( \frac{d}{dz} f\left(\frac{w(z)}{w_0} \frac{k}{z} u, \frac{w(z)}{w_0} \frac{k}{z} v\right) \right) f\left(\frac{k}{z} u, \frac{k}{z} v\right) &= \left( \frac{d}{dz} f\left(\frac{k}{z} u, \frac{k}{z} v\right) \right) f\left(\frac{w(z)}{w_0} \frac{k}{z} u, \frac{w(z)}{w_0} \frac{k}{z} v\right). \end{aligned} \quad (\text{A.19})$$

Wir verwenden die Abkürzungen  $l_1 = \frac{uk}{z}, l_2 = \frac{vk}{z}$ , die zweidimensionale Kettenregel  $\frac{d}{dz} f(x, y) = \partial_1 f(x, y) \partial_z x + \partial_2 f(x, y) \partial_z y$  und  $\frac{uk}{w_0} \partial_z \frac{w(z)}{z} = -\frac{ukw_0}{w(z)z^2} = \frac{w_0}{w(z)} \partial_z l_1$  zum Schluss auf die Äquivalenz

$$\begin{aligned} \frac{d}{dz} \frac{f\left(\frac{w(z)}{w_0} \frac{k}{z} u, \frac{w(z)}{w_0} \frac{k}{z} v\right)}{f\left(\frac{k}{z} u, \frac{k}{z} v\right)} &= 0 \\ \Leftrightarrow f(l_1, l_2) \left( (\partial_1 f) \left( \frac{w(z)}{w_0} l_1, \frac{w(z)}{w_0} l_2 \right) \frac{w_0}{w(z)} \partial_z l_1 + (\partial_2 f) \left( \frac{w(z)}{w_0} l_1, \frac{w(z)}{w_0} l_2 \right) \frac{w_0}{w(z)} \partial_z l_2 \right) \\ &= f\left(\frac{w(z)}{w_0} l_1, \frac{w(z)}{w_0} l_2\right) \left( (\partial_1 f)(l_1, l_2) \partial_z l_1 + (\partial_2 f)(l_1, l_2) \partial_z l_2 \right). \end{aligned} \quad (\text{A.20})$$

Multipliziert man dies mit  $-\frac{z^2}{k}$  unter Verwendung von  $\partial_z l_1 = -\frac{uk}{z^2}, \partial_z l_2 = -\frac{vk}{z^2}$ , so ergibt sich

$$\begin{aligned} \frac{d}{dz} \frac{f\left(\frac{w(z)}{w_0} \frac{k}{z} u, \frac{w(z)}{w_0} \frac{k}{z} v\right)}{f\left(\frac{k}{z} u, \frac{k}{z} v\right)} &= 0 \\ \Leftrightarrow u \left( f\left(\frac{uk}{z}, \frac{vk}{z}\right) (\partial_1 f) \left( \frac{w(z)}{w_0} \frac{uk}{z}, \frac{w(z)}{w_0} \frac{vk}{z} \right) \frac{w_0}{w(z)} - \right. \\ & \quad \left. (\partial_1 f) \left( \frac{uk}{z}, \frac{vk}{z} \right) f\left(\frac{w(z)}{w_0} \frac{uk}{z}, \frac{w(z)}{w_0} \frac{vk}{z}\right) \right) = \\ v \left( f\left(\frac{uk}{z}, \frac{vk}{z}\right) (\partial_2 f) \left( \frac{w(z)}{w_0} \frac{uk}{z}, \frac{w(z)}{w_0} \frac{vk}{z} \right) \frac{w_0}{w(z)} - \right. \\ & \quad \left. (\partial_2 f) \left( \frac{uk}{z}, \frac{vk}{z} \right) f\left(\frac{w(z)}{w_0} \frac{uk}{z}, \frac{w(z)}{w_0} \frac{vk}{z}\right) \right). \end{aligned} \quad (\text{A.21})$$

Angenommen  $f$  ist analytisch, dann sind auch  $\partial_1 f, \partial_2 f$  analytisch. Dann kann diese Gleichung abgekürzt werden als

$$u \cdot g_1(u, v) = v \cdot g_2(u, v) \quad (\text{A.22})$$

mit  $g_1, g_2$  analytisch. Die Funktionen  $g_1, g_2$  haben einen nicht-verschwindenden konstanten Term in ihrer jeweiligen Reihenentwicklung, daher muss  $g_1(u, v) = 0$  und  $g_2(u, v) = 0$  gelten

(sonst hat  $g_1 = \frac{v}{u}g_2$  eine Singularität in  $u = 0$  oder  $g_2 = \frac{u}{v}g_1$  hat eine Singularität in  $v = 0$ ) für jedes  $(u, v)$ . Daher

$$\begin{aligned} \frac{d}{dz} \frac{f\left(\frac{w(z)}{w_0} \frac{k}{z} u, \frac{w(z)}{w_0} \frac{k}{z} v\right)}{f\left(\frac{k}{z} u, \frac{k}{z} v\right)} &= 0 \\ \Leftrightarrow g_1(u, v) = 0 = g_2(u, v) & \quad (\text{A.23}) \\ \Leftrightarrow (\text{A.18}) & \end{aligned}$$

durch Wahl von  $(u, v) = \frac{z}{k}(k_x, k_y)$ .

Deshalb verwenden wir von nun an (A.18) anstelle von (A.16). Wegen (2.13) kann auch (A.18) in  $k_x$ - und  $k_y$ -Richtung getrennt werden. Ohne Verlust der Allgemeinheit betrachten wir nur die  $k_x$ -Richtung:

$$f'_x \left( \frac{w(z)}{w_0} k_x \right) \frac{w_0}{w(z)} f_x(k_x) = f'_x(k_x) f_x \left( \frac{w(z)}{w_0} k_x \right). \quad (\text{A.24})$$

Dies entspricht genau (2.14) und damit das, was wir zeigen wollten.

## A.2.7 Herleitung des approximierten Beugungsintegrals

Im Folgenden wird (2.26) auf Seite 53 hergeleitet. Mit Gleichung (2.25) gilt

$$\begin{aligned} (2\pi)^2 E(\mathbf{x}, z) &= (2\pi)^2 \mathcal{F}^{-1}[e^{ik_z z} \mathcal{F}[E_0 \cdot t_R]](\mathbf{x}) \\ &= 2\pi \mathcal{F}^{-1}[e^{ik_z z} \mathcal{F}[E_0] * \mathcal{F}[t_R]](\mathbf{x}) \\ &= \int_{\mathbb{R}^2} e^{ik_z(\mathbf{k})z} (\mathcal{F}[E_0] * \mathcal{F}[t_R])(\mathbf{k}) e^{i\mathbf{k}\mathbf{x}} dk_x dk_y \\ &= \int_{\mathbb{R}^2} e^{ik_z(\mathbf{k})z} \int_{\mathbb{R}^2} \mathcal{F}[E_0](\boldsymbol{\xi}) \cdot \mathcal{F}[t_R](\mathbf{k} - \boldsymbol{\xi}) d\xi_x d\xi_y e^{i\mathbf{k}\mathbf{x}} dk_x dk_y \\ &\stackrel{\text{A.1.7}}{=} \int_{\mathbb{R}^2} \mathcal{F}[E_0](\boldsymbol{\xi}) \int_{\mathbb{R}^2} \mathcal{F}[t_R](\mathbf{k} - \boldsymbol{\xi}) e^{i\sqrt{k^2 - \mathbf{k}^2}z} e^{i\mathbf{k}\mathbf{x}} dk_x dk_y d\xi_x d\xi_y \\ &= \int_{\mathbb{R}^2} \mathcal{F}[E_0](\boldsymbol{\xi}) \int_{\mathbb{R}^2} \mathcal{F}[t_R](\mathbf{u}) e^{i\sqrt{k^2 - (\mathbf{u} + \boldsymbol{\xi})^2}z} e^{i(\mathbf{u} + \boldsymbol{\xi})\mathbf{x}} du_x du_y d\xi_x d\xi_y \\ &= \int_{\mathbb{R}^2} \mathcal{F}[E_0](\boldsymbol{\xi}) e^{i\boldsymbol{\xi}\mathbf{x}} e^{i\sqrt{k^2 - \boldsymbol{\xi}^2}z} \int_{\mathbb{R}^2} \mathcal{F}[t_R](\mathbf{u}) e^{i\sqrt{k^2 - (\mathbf{u} + \boldsymbol{\xi})^2}z} \\ &\quad e^{-i\sqrt{k^2 - \boldsymbol{\xi}^2}z} e^{i\mathbf{u}\mathbf{x}} du_x du_y d\xi_x d\xi_y. \end{aligned}$$

Sei  $g(\mathbf{u}) := \sqrt{k^2 - (\mathbf{u} + \boldsymbol{\xi})^2} - \sqrt{k^2 - \boldsymbol{\xi}^2}$ . Da  $\mathcal{F}[t_R](\mathbf{u})$  um  $\mathbf{u} = (0, 0)$  zentriert ist und im Unendlichen abfällt<sup>4</sup>, taylorern wir  $g$  um  $\mathbf{u} = (0, 0)$ :

$$g(\mathbf{u}) \approx -\frac{\mathbf{u}\boldsymbol{\xi}}{\sqrt{k^2 - \boldsymbol{\xi}^2}}$$

$$\begin{aligned} \Rightarrow \int_{\mathbb{R}^2} \mathcal{F}[t_R](\mathbf{u}) e^{i(\sqrt{k^2 - (\mathbf{u} + \boldsymbol{\xi})^2} - \sqrt{k^2 - \boldsymbol{\xi}^2})z} e^{i\mathbf{u}\mathbf{x}} d^2u &\approx \int_{\mathbb{R}^2} \mathcal{F}[t_R](\mathbf{u}) e^{i\mathbf{u}\left(\mathbf{x} - \boldsymbol{\xi} \frac{z}{k_z(\boldsymbol{\xi})}\right)} du_x du_y \\ &= 2\pi t_R \left( \mathbf{x} - \boldsymbol{\xi} \frac{z}{k_z(\boldsymbol{\xi})} \right) \end{aligned}$$

$$\begin{aligned} \Rightarrow (2\pi)^2 E(\mathbf{x}, z) &\approx 2\pi \int_{\mathbb{R}^2} \mathcal{F}[E_0](\boldsymbol{\xi}) e^{i\boldsymbol{\xi}\mathbf{x}} e^{i\sqrt{k^2 - \boldsymbol{\xi}^2}z} t_R \left( \mathbf{x} - \boldsymbol{\xi} \frac{z}{k_z(\boldsymbol{\xi})} \right) d\xi_x d\xi_y \\ &= 2\pi \int_{\mathbb{R}^2} \mathcal{F}[E_0](\mathbf{k}) e^{i(\mathbf{k}\mathbf{x} + \sqrt{k^2 - \mathbf{k}^2}z)} t_R \left( \mathbf{x} - \mathbf{k} \frac{z}{k_z(\mathbf{k})} \right) dk_x dk_y \quad \checkmark \end{aligned}$$

## A.2.8 Nebenrechnung zum Beweis von Satz 4.3.2

Nun wird  $P_{hyp}\Psi_{app}(x, y, 0) = v(x, y, 0)$  und  $\partial_z P_{hyp}\Psi_{app}(x, y, 0) = \partial_z v(x, y, 0)$  aus dem Beweis von Satz 4.3.2 auf Seite 105 nachgerechnet.  $\Psi_{app}(x, y, 0) = v(x, y, 0)$  ist äquivalent zu

$$\frac{\chi(k_x, k_y)}{\varepsilon^2} \left( \widehat{w}_1 \left( \frac{k_x}{\varepsilon}, \frac{k_y}{\varepsilon}, 0 \right) + \widehat{w}_2 \left( \frac{k_x}{\varepsilon}, \frac{k_y}{\varepsilon}, 0 \right) \right) = \widehat{v}_0(k_x, k_y)$$

und  $\partial_z P_{hyp}\Psi_{app}(x, y, 0) = \partial_z v(x, y, 0)$  ist äquivalent zu

$$\chi(k_x, k_y) \frac{i\widehat{\beta}(k_x, k_y)}{\varepsilon^2} \left( \widehat{w}_1 \left( \frac{k_x}{\varepsilon}, \frac{k_y}{\varepsilon}, 0 \right) - \widehat{w}_2 \left( \frac{k_x}{\varepsilon}, \frac{k_y}{\varepsilon}, 0 \right) \right) = i\widehat{\kappa}(k_x, k_y)\widehat{v}_0.$$

Mit Auslassung der Funktionsargumente ergibt sich das Gleichungssystem

$$\begin{aligned} \chi(\widehat{w}_1 + \widehat{w}_2) &= \varepsilon^2 \widehat{v}_0 \\ \chi(\widehat{w}_1 - \widehat{w}_2) &= \varepsilon^2 \frac{\widehat{\kappa}}{\beta} \widehat{v}_0. \end{aligned}$$

<sup>4</sup>es gilt  $\mathcal{F}[t_R](\mathbf{k}) = R \frac{J_1(R|\mathbf{k}|)}{|\mathbf{k}|}$



Das ist äquivalent zu

$$\begin{aligned} 2\chi\widehat{w}_1 &= \left(\varepsilon^2 + \varepsilon^2 \frac{\widehat{\kappa}}{\widehat{\beta}}\right) \widehat{v}_0 \Rightarrow \widehat{v}_0 = 2 \left(\varepsilon^2 + \varepsilon^2 \frac{\widehat{\kappa}}{\widehat{\beta}}\right)^{-1} \widehat{w}_1 = 2\chi\varepsilon^{-1}\widehat{\gamma}\widehat{w}_1 \\ \chi\widehat{w}_2 &= \varepsilon^2\widehat{v}_0 - \widehat{w}_1 = (\varepsilon^2 2\varepsilon^{-2}\widehat{\gamma} - 1) \widehat{w}_1 \chi = \chi(2\widehat{\gamma} - 1)\widehat{w}_1. \end{aligned}$$

Mit der Wahl von  $v_0$  und  $\widehat{w}_2$  aus dem Beweis von Satz 4.3.2 sind diese Gleichungen erfüllt und somit gilt  $P_{hyp}\Psi_{app}(x, y, 0) = v(x, y, 0)$  und  $\partial_z P_{hyp}\Psi_{app}(x, y, 0) = \partial_z v(x, y, 0)$ .

Als nächstes wird

$$\begin{aligned} \widehat{\beta}(k_x, k_y) &> 0 \\ \widehat{\beta}(k_x, k_y) + \widehat{\kappa}(k_x, k_y) &\neq 0 \\ \widehat{\omega}(k_x, k_y) &> 0 \end{aligned}$$

in  $\text{supp}(\chi)$  bewiesen. Es gilt

$$\begin{aligned} \widehat{\beta}(k_x, k_y) &= k - \frac{k_x^2 + k_y^2}{2k} > k - \frac{k^2}{2 \cdot 2k} = \frac{3k}{4} > 0 \\ \widehat{\omega}(k_x, k_y) &= \sqrt{k^2 - k_x^2 - k_y^2} > \sqrt{k^2 - \frac{k^2}{2}} = \frac{k}{\sqrt{2}} > 0 \end{aligned}$$

und

$$\begin{aligned} \widehat{\beta}(k_x, k_y) + \widehat{\kappa}(k_x, k_y) &= 0 \\ \Leftrightarrow k - \frac{k_x^2 + k_y^2}{2k} &= -\sqrt{k^2 n_0^2 - k_x^2 - k_y^2} \\ \Rightarrow \left(k - \frac{k_x^2 + k_y^2}{2k}\right)^2 &= k^2 n_0^2 - k_x^2 - k_y^2 \\ \Leftrightarrow k^2 + \frac{(k_x^2 + k_y^2)^2}{4k^2} &= k^2 n_0^2 \\ \Leftrightarrow k_x^2 + k_y^2 &= \pm \sqrt{4k^4(n_0^2 - 1)} = \pm 2k^2 \sqrt{n_0^2 - 1} \in \mathbb{C}. \end{aligned}$$

Somit gilt  $\widehat{\beta}(k_x, k_y) + \widehat{\kappa}(k_x, k_y) \neq 0$  für alle  $(k_x, k_y) \in \mathbb{R}^2$ .



# Literaturverzeichnis

- [AAK<sup>+</sup>17] E. H. Amara, T. Aoudjit, K. Kheloufi, T. Tamsaout, S. Aggoune, A. Ahmanache, F. Hamadi, and K. Bougherara. Simulation by temperature gradient adaption of wavelength effect in metal laser cutting. *Journal of Laser Applications*, 29(2):022209, 2017.
- [AS07] S. Angleder and O. Steinbach. *Modifizierte Randintegralgleichungen für äussere Randwertprobleme der Helmholtz-Gleichung*, chapter Vorkolloquium: Numerische Akustik. Deutsche Gesellschaft für Akustik e.V., 2007.
- [BKL22] Sabine Bögli, James B. Kennedy, and Robin Lang. On the eigenvalues of the robin laplacian with a complex parameter. *Analysis and Mathematical Physics*, 12(1), Jan 2022.
- [BSR<sup>+</sup>18] K. Beaudette, M. Strupler, J. Ren, B. E. Bouma, and C. Boudoux. Radiometric model for coaxial single-and multimode optical emission from double-clad fiber. *Applied optics*, 57(5):1110–1118, 2018.
- [BW13] M. Born and E. Wolf. *Principles of optics: Electromagnetic theory of propagation, interference and diffraction of light*. Elsevier, 2013.
- [CCB06] P. P. Crooker, W. B. Colson, and J. Blau. Representation of a gaussian beam by rays. *American Journal of Physics*, 74(8):722–727, 2006.
- [CCC00] Y.-P. Chiou, Y.-C. Chiang, and H.-C. Chang. Improved three-point formulas considering the interface conditions in the finite-difference analysis of step-index optical devices. *Journal of Lightwave Technology*, 18(2):243–251, 2000.
- [CK12] D. Colton and R. Kress. *Inverse Acoustic and Electromagnetic Scattering Theory*. Springer Science & Business Media, Berlin Heidelberg, 3rd edition, 2012.
- [Coh98] L. Cohen. The generalization of the Wiener-Khinchin theorem. In *Proceedings of the 1998 IEEE International Conference on Acoustics, Speech and Signal Processing, ICASSP'98 (Cat. No. 98CH36181)*, volume 3, pages 1577–1580. IEEE, 1998.

- [Dum05] É. Dumas. Global existence for maxwell–bloch systems. *Journal of Differential Equations*, 219:484–509, 12 2005.
- [Ein16] A. Einstein. On the quantum theory of radiation. *The Old Quantum Theory: The Commonwealth and International Library: Selected Readings in Physics*, page 167, 2016.
- [Fla13] D. Flamm. *The modal transmission function of optical fibers*. PhD thesis, Friedrich Schiller University Jena, 2013.
- [Flo22] K. Floettmann. Coherent superposition of orthogonal hermite–gauss modes. *Optics Communications*, 505:127537, 2022.
- [FLS07] R. P. Feynman, R. B. Leighton, and M. Sands. *Feynman Vorlesungen über Physik (2. Elektromagnetismus und Struktur der Materie)*. Oldenbourg, Deutschland, 5th edition, 2007.
- [Goo05] J. W. Goodman. Introduction to fourier optics. 3rd. *Roberts and Company Publishers*, 2005.
- [Gra09] T. Graf. *Laser - Grundlagen der Laserstrahlquellen*. Springer Verlag, 2009.
- [Hau12] H. E. Haus. *Electromagnetic Noise and Quantum Optical Measurements*. Springer Science & Business Media, Berlin Heidelberg, 2012.
- [HG09] H. Hügel and T. Graf. *Laser in der Fertigung - Strahlquellen, Systeme, Fertigungsverfahren*. Vieweg + Teubner, Wiesbaden, 2009.
- [HG13] H. Hügel and T. Graf. *Laser in der Fertigung*. Springer Verlag, 2013.
- [HIP15] J. E. Harvey, R. G. Irvin, and R. N. Pfisterer. Modeling physical optics phenomena by complex ray tracing. *Optical Engineering*, 54(3):035105, 2015.
- [Jac07] J. D. Jackson. *Klassische Elektrodynamik*. Walter de Gruyter, Berlin, 2007.
- [Kar04] K. Kark. *Grundlagen der Elektrodynamik*, pages 28–55. Vieweg+Teubner Verlag, Wiesbaden, 2004.
- [KH15] A. Kirsch and F. Hettlich. *The Mathematical Theory of Time-Harmonic Maxwell's Equations*. Springer International Publishing, 2015.
- [KL28] H. Kopfermann and R. Ladenburg. Experimental proof of ‘negative dispersion.’. *Nature*, 122:438–439, 1928.

- [KS22a] M. Klumpp and G. Schneider. A note on the validity of the Schrödinger approximation for the Helmholtz equation. *Journal of Applied Analysis*, 28(1):67–72, 2022.
- [KS22b] M. Klumpp and G. Schneider. The Schrödinger approximation for the Helmholtz equation if the refractive index is a step function. *Wave Motion*, 110:102891, 2022.
- [Lan21] R. Lang. *On the Eigenvalues of the Non-self-adjoint Robin Laplacian on Bounded Domains and Compact Quantum Graphs*. Universität Stuttgart, 2021.
- [Leo44] M. A. Leontovich. Method of solution for problems of electromagnetic waves propagation along the earth surface. *Bulletin of Academy of Sciences, USSR, Physical Series*, 8(1):1622, 1944.
- [LL85] L. D. Landau and E. M. Lifshits. *Elektrodynamik der Kontinua*. De Gruyter, December 1985.
- [LLP84] L. D. Landau, E. M. Lifshitz, and L. P. Pitaevskii. *Electrodynamics of continuous media; 2nd ed.* Course of theoretical physics. Butterworth, Oxford, 1984.
- [Mai60] T. H. Maiman. Optical and microwave-optical experiments in ruby. *Physical review letters*, 4(11):564, 1960.
- [Max65] J. C. Maxwell. VIII. a dynamical theory of the electromagnetic field. *Philosophical Transactions of the Royal Society of London*, 155:459–512, dec 1865.
- [Mes09] D. Meschede. *Optik, Licht und Laser*. Springer-Verlag, Berlin Heidelberg New York, 3rd edition, 2009.
- [Mic14] A. Michalowski. *Untersuchungen zur Mikrobearbeitung von Stahl mit ultrakurzen Laserpulsen*. Herbert Utz Verlag, München, 2014.
- [MMKT22] A. Martinez-Marchese, M. Klumpp, and E. Toyserkani. Directed energy deposition powder stream modeling using a gaussian beam ray representation. *Powder Technology*, 412:117965, 2022.
- [MS97] M. A. M. Marte and S. Stenholm. Paraxial light and atom optics: The optical schrödinger equation and beyond. *Phys. Rev. A*, 56:2940–2953, Oct 1997.

- [NM92] A. C. Newell and J. V. Moloney. *Nonlinear Optics*. ATIMS Series. Addison-Wesley, 1992.
- [Nov13] L. Novotny. Lecture notes on electromagnetic fields and waves, 2013.
- [PCWL22] O. Phillips, S. Chandler-Wilde, and S. Langdon. Towards high frequency boundary element methods for multiple scattering. In *Internoise 2022*, 2022.
- [PHB<sup>+</sup>20] H. Pang, T. Häcker, A. Bense, T. Haist, and D. Flamm. Focal field analysis of highly multi-mode fiber beams based on modal decomposition. *Applied Optics*, 59(22):6584–6592, 2020.
- [PKH21] H. Pang, M. Klumpp, and T. Häcker. Modeling optical emission from a highly multi-mode step-index fiber via ray tracing and the limitations. *Appl. Opt.*, 60(35):10885–10892, Dec 2021.
- [QMW<sup>+</sup>12] Yuan Qin, Andreas Michalowski, Rudolf Weber, Sen Yang, Thomas Graf, and Xiaowu Ni. Comparison between ray-tracing and physical optics for the computation of light absorption in capillaries – the influence of diffraction and interference. *Opt. Express*, 20(24):26606–26617, Nov 2012.
- [Rei16] G. A. Reider. *Photonics - An Introduction*. Springer, Berlin, Heidelberg, 2016.
- [RWR<sup>+</sup>10] D. Rafferty, U. H. Wagner, C. Rau, Chang P., Alcock S., Dockree R., and I. R. Robinson. Development of a computer model to simulate wavefront propagation. University College London student project, 2010.
- [SB33] A. Sommerfeld and H. Bethe. *Elektronentheorie der Metalle*, pages 333–622. Springer Berlin Heidelberg, Berlin, Heidelberg, 1933.
- [Sch10] J. D. Schmidt. *Numerical simulation of optical wave propagation with examples in MATLAB*. Bellingham, Wash. : SPIE monograph, PM199, 2010.
- [SH98] R. Stoffer and H. Hoekstra. Efficient interface conditions based on a 5-point finite difference operator. *Optical and quantum electronics*, 30(5-6):375–383, 1998.
- [TET09] N. M. Tanushev, B. Engquist, and R. Tsai. Gaussian beam decomposition of high frequency wave fields. *Journal of Computational Physics*, 228(23):8856–8871, 2009.

- [Tie11] S. Tiesmeyer. Die Simulation der Strahlungspropagation bei den Laserfertigungsverfahren mit vektorieller beam propagation method und leontovich-randbedingungen. Master's thesis, RWTH Aachen, 2011.
- [TMT08] Francesco Torre, Adriano Morando, and Grazia Todeschini. Three-phase distributed model of high-voltage windings to study internal steep-fronted surge propagation in a straightforward transformer. *Power Delivery, IEEE Transactions on*, 23:2050 – 2057, 11 2008.
- [Vas92] C. Vassallo. Improvement of finite difference methods for step-index optical waveguides. *IEE Proceedings J (Optoelectronics)*, 139:137–142(5), April 1992.
- [Ver] Spektrum Akademischer Verlag. <https://www.spektrum.de/lexikon/physik/curie-temperatur/2656>. Aufgerufen am 29.06.2022 um 21:25 Uhr.
- [VRvdDL81] J. Van Roey, J. van der Donk, and P. E. Lagasse. Beam-propagation method: analysis and assessment. *J. Opt. Soc. Am.*, 71(7):803–810, Jul 1981.
- [VS12] G. Vossen and J. Schüttler. Mathematical modelling and stability analysis for laser cutting. *Mathematical and Computer Modelling of Dynamical Systems*, 18(4):439–463, 2012.
- [VSN10] G. Vossen, J. Schüttler, and M. Nießen. Optimization of partial differential equations for minimizing the roughness of laser cutting surfaces. In Moritz Diehl, Francois Glineur, Elias Jarlebring, and Wim Michiels, editors, *Recent Advances in Optimization and its Applications in Engineering*, pages 521–530, Berlin, Heidelberg, 2010. Springer Berlin Heidelberg.
- [War13] H.-J. Warnecke. *Laser in der Produktion - 20. IPA-Arbeitstagung 13./14. September 1988 in Stuttgart*. Springer-Verlag, Berlin Heidelberg New York, 2013.
- [WHO<sup>+</sup>13] W. Waidelich, H. Hügel, H. Opower, H. Tiziani, R. Wallenstein, and W. Zinth. *Laser in Forschung und Technik / Laser in Research and Engineering - Vorträge des 12. Internationalen Kongresses. Proceedings of the 12th International Congress. Laser 95*. Springer-Verlag, Berlin Heidelberg New York, 2013.
- [WWH13] W. Waidelich, R. Waidelich, and A. Hofstetter. *Laser in der Medizin / Laser in Medicine - Vorträge der 11. Tagung der Deutschen Gesellschaft für Lasermedizin und des 13. Internationalen Kongresses*. Springer-Verlag, Berlin Heidelberg New York, 2013.

- [YPM06] H. Yoda, P. Polynkin, and M. Mansuripur. Beam quality factor of higher order modes in a step-index fiber. *J. Lightwave Technol.*, 24(3):1350, Mar 2006.
- [YSU<sup>+</sup>97] J. Yamauchi, M. Sekiguchi, O. Uchiyama, J. Shibayama, and H. Nakano. Modified finite-difference formula for the analysis of semivectorial modes in step-index optical waveguides. *IEEE Photonics Technology Letters*, 9(7):961–963, 1997.



# Abbildungsverzeichnis

1.1	Von der Laserquelle wird das elektrische Feld durch eine Faser zum Werkstück geführt, dort interagiert es mit der metallischen Oberfläche. Quelle: Trumpf .	12
1.2	Die Kantenrauheit beim Laserschneiden variiert stark je nach Laser/Werkstück und kann z.T. noch verbessert werden. Quelle: Trumpf . . .	13
1.3	Zylindermodell, Quelle: [HG09, S. 133] . . . . .	28
1.4	Winkelabhängigkeit der Absorption für $s$ - und $p$ -Polarisation bei $\lambda = 10 \mu m$ .	29
1.5	Winkelabhängigkeit der Absorption für $s$ - und $p$ -Polarisation bei $\lambda = 1 \mu m$ .	30
2.1	Standard beam propagation method (rechts), wide-angle beam propagation method (mitte), analytische Lösung (links) Quelle: [Tie11, S.47] . . . . .	38
2.2	Die Lichtstrahlen (grau) folgen der Kaustik (schwarz). . . . .	41
2.3	Wird der Laserstrahl oben links abgeschattet, so wirkt sich das nach dem Fokusbereich mit einem Schatten unten rechts aus. . . . .	41
2.4	Links: Schematische Darstellung des Strahlenmodells auf der Basis einer Stufenindexfaser, rechts: repräsentative Intensitätsprofile im Nah- und Fernfeld .	41
2.5	Vergleich des Strahldurchmessers berechnet durch Raytracing (blauer Kreis) und ABCD-Matrix (rote Linie) . . . . .	48
2.6	Die Leistung ist im Verlauf der Propagation nicht konstant . . . . .	54
2.7	Leistungsabfall beim „Löffelmodell“ . . . . .	57
2.8	Die Startpunkte der Ansatzfunktionen sind rotationssymmetrisch in der $xy$ -Ebene verteilt. . . . .	58
2.9	Absoluter Fehler zwischen Modell (2.27) und $TEM_{00}$ . . . . .	58
2.10	Schnittspalt (links) wird in verschiedenen $z$ -Ebenen diskretisiert (mitte). Für diesen Blendenstapel wird das elektrische Feld berechnet (rechts). . . . .	60
3.1	Reflexion an einer schiefen Ebene . . . . .	75
3.2	Schematische Darstellung des Reflexionsmodells . . . . .	77
3.3	$TEM_{00}$ -Mode, die auf einen Schnittspalt gestrahlt wird, der durch das Halbkreismodell entstand . . . . .	79
3.4	Probe L82 (links) und Probe L89 (rechts) . . . . .	79

3.5	Schneidproben L83 bis L88 . . . . .	80
3.6	Überlagerung der Moden $TEM_{00}$ , $TEM_{20}$ und $TEM_{02}$ . . . . .	81
3.7	Ein Überhang muss durch mehrere Funktionen $z(x, y)$ dargestellt werden. . .	82
3.8	Wellenoptische Simulation in einem schwarzen Schlitzspalt . . . . .	84
3.9	Differenz zwischen exaktem und genähertem Absorptionsgrad für verschiedene Steigungswinkel $\theta$ und verschiedene Strahlqualitäten $M^2$ . . . . .	85
3.10	Links: Exakte Lösung nach (3.3) bei $\theta = 80^\circ$ Mitte: Genäherte Lösung nach (3.5) bei $\theta = 80^\circ$ Rechts: Differenz zwischen (3.3) und (3.5) . . . . .	86
3.11	Maximaler Fehler abhängig vom Steigungswinkel . . . . .	87
4.1	Der Realteil von $W(2, \cdot)$ , $W(5, \cdot)$ , and $W(25, \cdot)$ im Fall $n_0 = 4 + 4i$ und $k = 1$ .	100
4.2	Absolutbetrag von $v$ und $\Psi_{app}$ . . . . .	100
4.3	Fehler zwischen der exakten Lösung $v$ und der Näherungslösung $\Psi_{app}$ . . . . .	101

# Danksagungen

An dieser Stelle möchte ich mich bei all denen bedanken, die mich vor, während und gegen Ende dieser Dissertation motiviert und unterstützt haben.

Nachdrücklicher Dank geht an Prof. Dr. Guido Schneider vom Institut für Analysis, Dynamik und Modellierung (IADM) der Universität Stuttgart, der mir diese Doktorarbeit ermöglicht hat. Vielen Dank für die guten Denkanstöße, konstruktive Kritik, Bewilligung von Summer Schools, Offenheit für Anwendungsthemen, Ermutigung in der Hochschulpolitik und vieles mehr.

Besonders bedanken möchte ich mich auch bei der Trumpf-Gruppe, die mir die Möglichkeit eröffnet hat, die Dissertation mit praktischer Anwendung zu verbinden. Ich habe einzigartige Erfahrungen gemacht und hoffe, dass meine Doktorarbeit gute Verwendung findet. Insbesondere danke ich Dr. Tobias Häcker für die Betreuung, außerdem Daniel Mock, Hao Pang, Thomas Lehleiter und Dr. Martin Bea für den konstruktiven Austausch.

Mein (erneuter) Dank geht an Dr. Giulio Romani, Alex Martinez-Marchese, Hao Pang, Dr. Tobias Häcker und Prof. Dr. Guido Schneider für die gute wissenschaftliche Zusammenarbeit.

Außerdem möchte ich mich bei meinen Kolleginnen, Kollegen, Freunden, bei meiner Familie und bei Jenny bedanken. Sie alle haben mir Kraft und Motivation geschenkt, wenn ich sie gebraucht habe.

Schließlich danke ich noch der Friedrich-Ebert-Stiftung für die Förderung durch ein Promotionsstipendium. Der Austausch mit Promovierenden aus anderen Fachgebieten half manchmal Dinge von einer anderen Seite zu betrachten.

All diese Personen haben zum Gelingen dieser Dissertation beigetragen. Nun möchte ich schließen mit einem Vers aus 2. Makkabäer 2: „Und wenn es gut gelungen und geschickt geordnet ist, so war das meine Absicht. Ist's aber zu schlicht und einfach geraten, so habe ich doch getan, soviel ich vermochte.“



# Erklärung

Ich bestätige hiermit,

1. dass ich die vorliegende Dissertation bis auf die Betreuung an der Universität Stuttgart und durch die Trumpf-Gruppe ohne fremde Hilfe verfasst habe,
2. dass ich keine anderen als die angegebenen Quellen benutzt und alle wörtlich oder sinngemäß aus anderen Werken übernommenen Aussagen als solche gekennzeichnet habe,
3. dass die eingereichte Arbeit weder vollständig noch in wesentlichen Teilen Gegenstand eines anderen Prüfungsverfahrens gewesen ist und
4. dass das elektronische Exemplar mit den anderen Exemplaren übereinstimmt.

Stuttgart, den 4. Januar 2023

---

Maximilian Klumpp