

Schulz, Sebastian

**Research Report**

## Nutzung thermodynamischer Datensätze zur Simulation von Werkstoffgefügen

Beiträge der Hochschule Pforzheim, No. 131

**Provided in Cooperation with:**

Hochschule Pforzheim

*Suggested Citation:* Schulz, Sebastian (2009) : Nutzung thermodynamischer Datensätze zur Simulation von Werkstoffgefügen, Beiträge der Hochschule Pforzheim, No. 131, Hochschule Pforzheim, Pforzheim,  
<https://nbn-resolving.de/urn:nbn:de:bsz:951-opus-545>

This Version is available at:

<https://hdl.handle.net/10419/97607>

**Standard-Nutzungsbedingungen:**

Die Dokumente auf EconStor dürfen zu eigenen wissenschaftlichen Zwecken und zum Privatgebrauch gespeichert und kopiert werden.

Sie dürfen die Dokumente nicht für öffentliche oder kommerzielle Zwecke vervielfältigen, öffentlich ausstellen, öffentlich zugänglich machen, vertreiben oder anderweitig nutzen.

Sofern die Verfasser die Dokumente unter Open-Content-Lizenzen (insbesondere CC-Lizenzen) zur Verfügung gestellt haben sollten, gelten abweichend von diesen Nutzungsbedingungen die in der dort genannten Lizenz gewährten Nutzungsrechte.

**Terms of use:**

*Documents in EconStor may be saved and copied for your personal and scholarly purposes.*

*You are not to copy documents for public or commercial purposes, to exhibit the documents publicly, to make them publicly available on the internet, or to distribute or otherwise use the documents in public.*

*If the documents have been made available under an Open Content Licence (especially Creative Commons Licences), you may exercise further usage rights as specified in the indicated licence.*



<https://creativecommons.org/licenses/by-nc-nd/4.0/deed.de>

**BEITRÄGE DER HOCHSCHULE PFORZHEIM**

---

**„Focus Werkstoffe“**

*(Herausgegeben von Norbert Jost)*

**Sebastian Schulz**

**Nutzung thermodynamischer Datensätze zur Simulation von Werkstoffgefügen**

---

**Nr. 131**

**Herausgeber:** Prof. Dr. Ansgar Häfner, Prof. Dr. Norbert Jost, Prof. Dr. Karl-Heinz Rau, Prof. Dr. Roland Scherr, Prof. Dr. Christa Wehner, Prof. Dr. Hanno Beck (geschäftsführend; Hanno.beck@hs-pforzheim.de)

**Sekretariat:** Frau Alice Dobrinski  
Hochschule Pforzheim  
Tiefenbronner Str. 65  
75175 Pforzheim  
[alice.dobrinski@fh-pforzheim.de](mailto:alice.dobrinski@fh-pforzheim.de)  
Telefon: 07231/28-6201  
Telefax: 07231/28-6666

**Ausgabe:** **September 2009**

**Sebastian Schulz**

**Nutzung thermodynamischer Datensätze zur Simulation  
von Werkstoffgefügen**

**Band 1  
der Publikationserie  
„Focus Werkstoffe“**

Norbert Jost (Hrsg.)

Der Autor:

Sebastian Schulz (M.Sc.)

Institute of Materials and Processes (IMP)  
Hochschule Karlsruhe, Moltkestr. 30, 76133 Karlsruhe  
e-mail: [sebastian.schulz@hs-karlsruhe.de](mailto:sebastian.schulz@hs-karlsruhe.de)

*Sebastian Schulz* ist Masterabsolvent der Hochschule Pforzheim (Studiengang Maschinenbau). Seit 2009 ist er wissenschaftlicher Mitarbeiter an der Hochschule Karlsruhe und arbeitet im Rahmen des CCMSE-Projekts (Center of Computational Materials Science and Engineering, einer Kooperation zwischen der HS Karlsruhe, der HS Pforzheim und weiteren Einrichtungen) an der Nutzung thermodynamischer Datensätze für die Phasenfeldsimulation, ein wichtiges Teilgebiet der Simulation von Werkstoffgefügen.

## Vorwort des Herausgebers

Immer häufiger liefern optimierte oder neuentwickelte Werkstoffe den Schlüssel zum Fortschritt der Technik. Darüber hinaus bestimmen sie ganz wesentlich die Qualität und das Kosten-/Nutzenverhältnis technischer Produkte. In Einzelfällen hat dies bereits bis zu der Etablierung ganz neuer Technologien geführt.

Welchen Stellenwert die Entwicklung neuer Werkstoffe hat, zeigen hochaktuelle Beispiele wie Hochtemperaturwerkstoffe aus Siliziumnitrid, die den Wirkungsgrad von Energieanlagen entscheidend verbessern. Oder auch die Superleichtmetalle auf Aluminium- oder Magnesium-Basis mit Lithium als dem leichtesten metallischen Legierungselement überhaupt, die gerade am Beginn ihres großtechnischen Einsatzes in der Luft- und Raumfahrtindustrie stehen. Weitere innovative Beispiele sind die Formgedächtnislegierungen, die gleichzeitig als Sensor und Stellglied eingesetzt werden und rein temperaturgesteuert Bewegungen ausführen und/oder Kräfte übertragen können. Biologisch abbaubare Polymere können auf ökologischste Weise mithelfen, unsere Müllprobleme zu reduzieren und mit supraleitenden Werkstoffen könnte vielleicht einmal der elektrische Strom verlustfrei und wirtschaftlich über weite Strecken transportiert werden. Diese wenigen Beispiele geben dabei nur einen kleinen Ausschnitt aus dem riesigen Potential der Entwicklungsmöglichkeiten mit neuen und/oder optimierten Werkstoffen wieder.

Auch das Werkstoffentwicklungs- und Prüflabor der Hochschule Pforzheim ist in zahlreichen und hochinnovativen Forschungsprojekten aktiv tätig. Die Ergebnisse aus diesen Arbeiten sollen nun zukünftig als Reihe „**Focus Werkstoffe**“ in regelmäßigen Abständen innerhalb der sehr gut eingeführten und weit verbreiteten „Berichte der Hochschule Pforzheim“ publiziert werden.

In dem hier vorliegenden ersten Band der Reihe beschreibt Sebastian Schulz wie effiziente Simulationstechniken zur Modellierung und damit zur Visualisierung von Mikrostrukturausbildungen von Werkstoffen beitragen können. Dabei werden mathematisch-physikalische Modelle angewandt, mit denen in der computergestützten Simulation die Mikrostrukturen der eingesetzten Materialien zunächst visualisiert werden können. Auf dieser Basis und mit dieser grundlegenden Technik sollen zukünftig die möglichen Änderungen von Werkstoffeigenschaften unter unterschiedlichen Prozessbedingungen, Verarbeitungsmethoden oder auch in anderen Materialzusammensetzungen simuliert werden können. Mit der hierbei dann angestrebten Computersimulation wird es möglich, schon am Rechner geeignete Werkstoffe für ein ganz bestimmtes Einsatzgebiet mit den geforderten Eigenschaften zu „entwickeln“.

## Inhaltsverzeichnis

Zusammenfassung / Summary .....	6
1 Einleitung .....	8
2 Definition des Begriffes Phase .....	10
3 Die Calphad-Methode .....	12
3.1 Grundlagen.....	12
3.2 Funktionsweise.....	14
3.3 Pandat.....	15
4 Vorstellung der Phasenfeldsimulationssoftware PACE 3D .....	17
4.1 Zugrundeliegendes Modell .....	17
4.2 Aufbau von PACE 3D .....	18
5 Verknüpfung der Datensätze mit PACE 3D .....	20
6 Simulationsergebnisse .....	22
7 Ausblick.....	24
8 Literatur.....	26

## Zusammenfassung

Um aussagekräftige Ergebnisse aus der Durchführung von Phasenfeldsimulationen zu erhalten, bedarf es der korrekten thermodynamischen Eigenschaften des zu untersuchenden Systems als Eingabewerte. Für Simulationen mit der Software PACE 3D wurde zur Beschreibung der thermodynamischen Eigenschaften eines Systems bisher ein idealisiertes Phasendiagramm zugrunde gelegt. Die Eingabedaten wie Schmelztemperaturen oder latente Wärme mussten aus der Literatur entnommen und von Hand in die Eingabedatei einer Simulation eingegeben werden. Eine Alternative stellt der automatische Zugriff auf thermodynamische Datensätze, wie etwa TDB-Dateien, und deren Auswertung nach der Calphad-Methode dar. In diesem Beitrag wird die Verknüpfung von thermodynamischen Datensätzen mit der Phasenfeldsimulationssoftware PACE 3D und den damit gewonnenen Simulationsergebnissen des Aluminium-Kupfer-Systems vorgestellt

**Stichwörter:** Werkstoffe, Werkstoffkunde, Simulation von Werkstoffgefügen, Thermodynamische Eigenschaften, Zustandsdiagramme, Phasendiagramme, Phasenfeldsimulation, Phase 3D, Pandat.

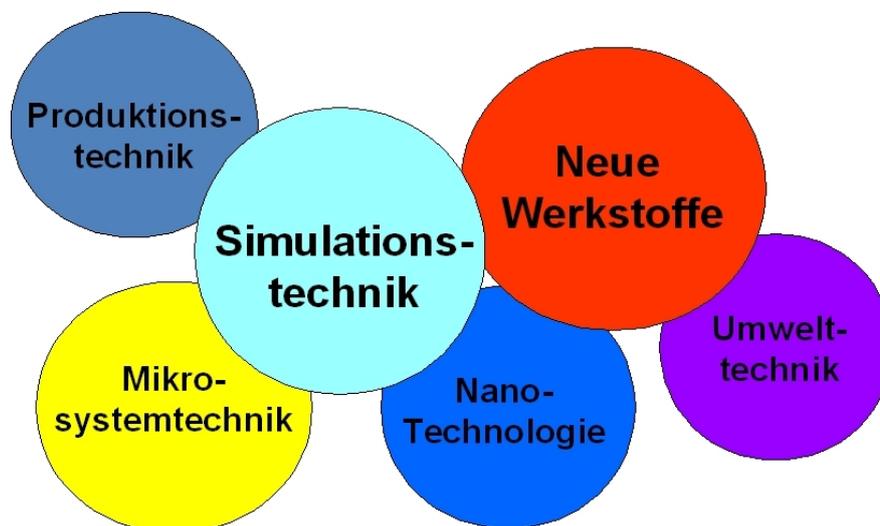
## Summary

To get significant results out of phasefield simulations, precise thermodynamic properties of the system to be investigated are required as input values. For simulations with the PACE 3D software up to now an idealised phase diagram has been used to describe those thermodynamic properties. The input values such as melting temperatures or latent heats had to be taken from literature and written into the input-file of the simulation by hand. An alternative would be the automatic access on thermodynamic datasets and their utilization with the Calphad-method. In this report a coupling of thermodynamic databases to the PACE 3D simulation software and the thereby achieved results from simulations of the aluminium-copper system is presented.

**GBV-Klassifikation:** 51.10

## 1 Einleitung

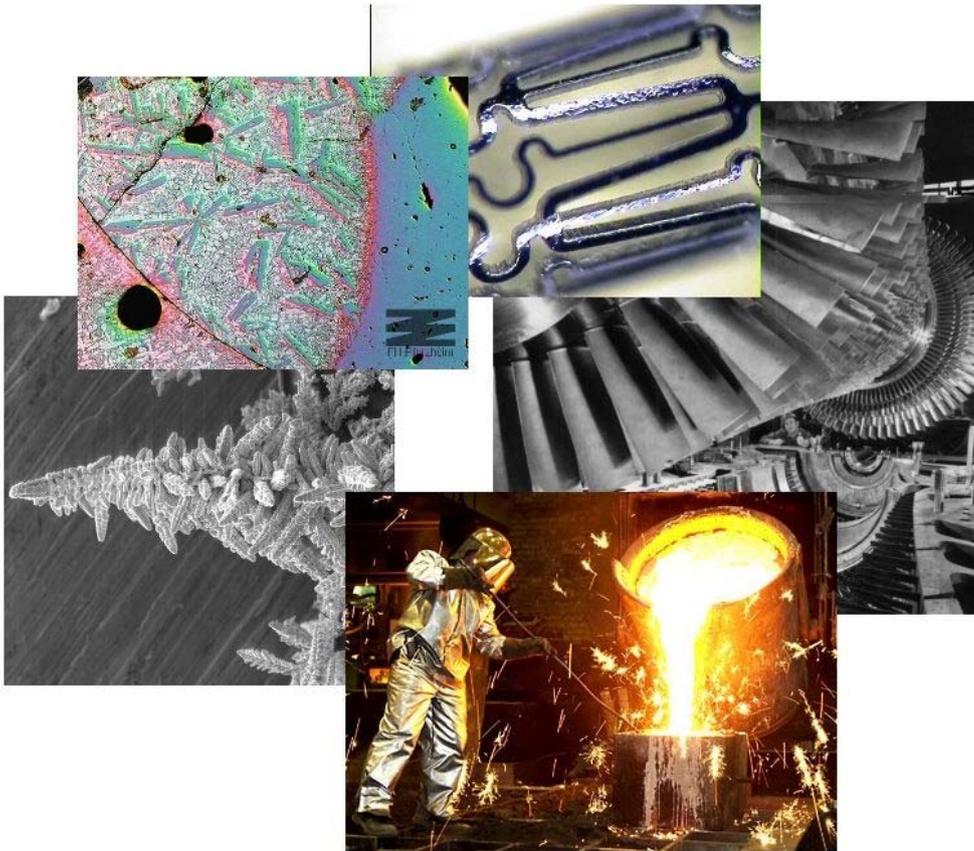
Moderne Werkstoffe tragen durch ihre mechanischen, elektrischen, thermischen, chemischen aber auch optischen und haptischen Eigenschaften wesentlich zur Erfüllung von Produktanforderungen bei. Ihre Auswahl hat überdies einen maßgeblichen Einfluss auf die Herstellkosten des Produkts und entscheidet somit in starkem Maße über den Markterfolg mit. Aus dieser Erkenntnis folgt, dass moderne Werkstoffe heute zunehmend maßgeschneidert werden. Das Ziel, den jeweils optimalen Werkstoff am richtigen Ort einzusetzen, führt jedoch zu einer kaum überschaubaren Zunahme der verfügbaren Werkstoffe, Beschichtungen und Fertigungsverfahren. Zu einem effizienten und kostengünstigen Weg, komplexe moderne Legierungen zu entwerfen und zu studieren, haben sich in den letzten Jahren immer stärker rechnergestützte Ansätze entwickelt. Die Werkstoffsimulation verknüpft die zukunftssträchtigen Forschungsfelder der Simulationstechnik und der neuen Werkstoffe und birgt somit ein großes Innovationspotential, weshalb auch das BMBF (Bundesministerium für Bildung und Forschung) diese Technologie als High-Tech-Strategie im Bereich Werkstoffforschung ausweist /1/.



---

Abbildung 1: Zukunftstechnologien im Bereich Maschinenbau

---



**Abbildung 2: Beispiele für unterschiedliche Metalle und Einsatzfelder. Im Uhrzeigersinn: Stent aus Memov-Effekt-Leaieruna. Turbinenschaukeln. Gießerei. elektrolytisch abaeschiedenes**

Einen Ansatz zur Werkstoffsimulation stellt die Phasenfeldmethode dar, durch welche sich realitätsnahe Gefügestrukturen am Rechner vorhersagen lassen. Am IMP - dem Institute for Materials and Processes - der Hochschule Karlsruhe werden unterschiedliche Bereiche der Materialwissenschaft, wie etwa Erstarrung, Kornreifung, Elastizität, Magnetismus, Diffusionsvorgänge, Einfluss von Strömung bis hin zu Themen aus den Bereichen Geologie und Biologie, durch Anwendung von Phasenfeldsimulationen untersucht [2]. Hierbei findet das eigens entwickelte Softwarepaket PACE 3D Anwendung, das eine ständige Weiterentwicklung erfährt um die unterschiedlichen Vorgänge in möglichst Speicherplatz und Rechenzeit sparender Weise simulieren und die Ergebnisse anschaulich darstellen zu können.

Doch nicht nur effiziente Rechenmethoden und eine ansprechende Darstellung bestimmen die Qualität einer Simulation. Einen entscheidenden Einfluss auf die Richtigkeit der Ergebnisse üben die Eingabewerte aus. In den folgenden Kapiteln wird eine Methode aufgezeigt, um die Eingabewerte von Phasenfeldsimulationen automatisch aus thermodynamischen Datensätzen zu bestimmen mit dem Ziel rea-

le Vorgänge in unterschiedlichen Materialsystemen in verlässlicher Weise verstehen und vorhersagen zu können.

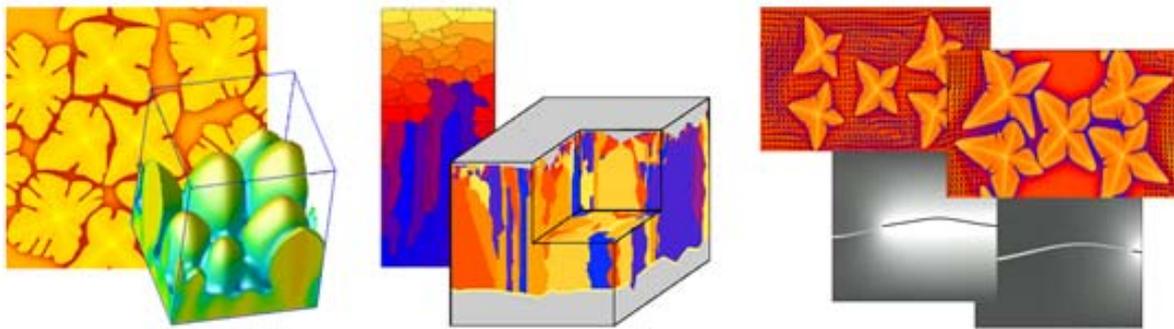


Abbildung 3: Ergebnisse aus Phasenfeldsimulationen. Quelle: /2/

## 2 Definition des Begriffes Phase

Eine Phase kann einer Definition des Materialwissenschaftlers Günter Gottsteins zufolge als physikalisch einheitliche Substanz aufgefasst werden, deren chemische Zusammensetzung jedoch nicht notwendig einheitlich sein muss, wie etwa bei einer Lösung /3/. Diese Substanz besteht aus Komponenten, welche im Falle von Elementen oder deren Gemischen Atomsorten oder in komplexeren Systemen stabile chemische Verbindungen darstellen. Dies lässt sich am Beispiel des Systems Kupfer-Nickel deutlich machen. Bei einer Nickel-Konzentration von 30 % und einer Temperatur von 1500 °C liegt das System als Schmelze vor, es existiert also nur eine Flüssigphase (Abb. 4 a). Unabhängig von der chemischen Zusammensetzung der Schmelze, also dem Anteil der unterschiedlichen Legierungselemente, bleiben die physikalischen Eigenschaften der Phase, wie etwa die Dichte oder die elektrische Leitfähigkeit, im Großen und Ganzen gleich. Kühlt man die Schmelze auf 1200 °C ab, so bilden sich Keime mit einer kristallinen Struktur aus (Abb.4 b). Neben der Flüssigphase liegt nun also gleichzeitig eine kristalline Festphase vor. Bei 1000 °C ist das Stoffsystem vollständig erstarrt, was bedeutet dass nur noch die Festphase vorliegt (Abb.4 c).

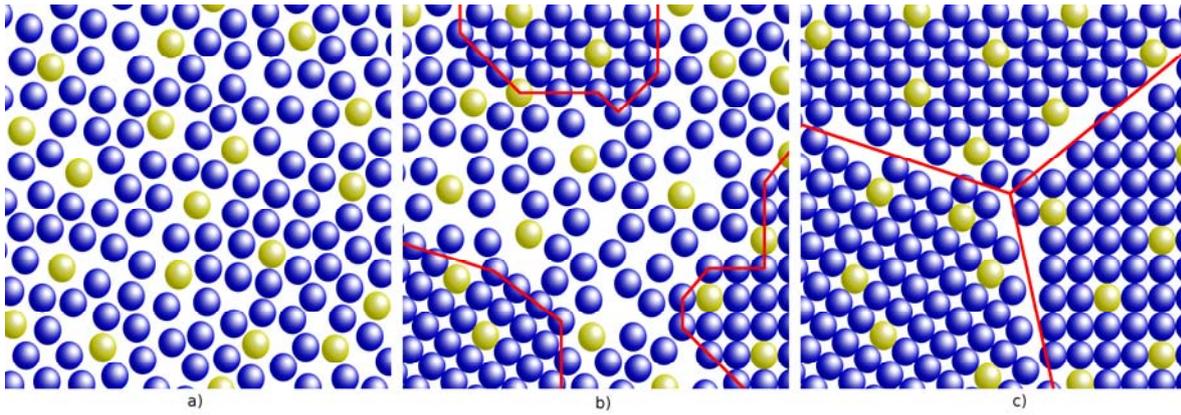


Abbildung 4: a) Schmelze bei 1500 °C      b) Erstarrung bei 1200 °C      c) Festkörper bei 1000 °C

Eine anschauliche Darstellung solcher Prozesse erhält man über sogenannte Phasendiagramme, in denen über der Konzentration einer Komponente in Abhängigkeit der Temperatur die jeweils stabilen Phasen in diesem Zustand dargestellt sind (Abb.5 a). Phasendiagramme lassen sich ebenfalls für ternäre Systeme, also für solche mit drei Komponenten, erstellen (Abb.5 b). Wobei hierbei die Konzentrationen der beteiligten Komponenten an den Rändern eines gleichseitigen Dreiecks aufgetragen werden und ein solches Diagramm nur für einen bestimmten Temperaturwert gilt. Systeme mit noch mehr enthaltenen Komponenten lassen sich nicht mehr in dieser Form grafisch darstellen.

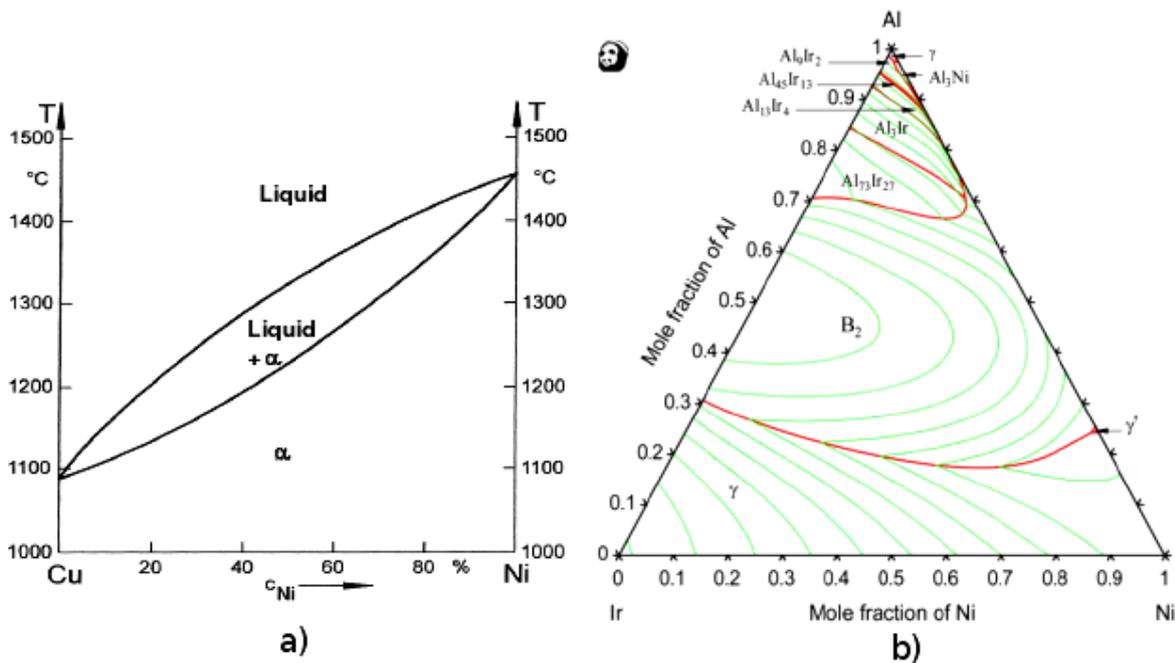


Abbildung 5: a) Phasendiagramm eines binären Systems b) Phasendiagramm eines ternären Systems

### 3 Die Calphad-Methode

Die Eigenschaften einer Legierung hängen neben ihrer chemischen Zusammensetzung hauptsächlich von dem Gefüge ab, welches sich während des Herstellprozesses und auch während des Gebrauches durch Phasenumwandlungen ausbildet. Eine anschauliche Darstellung dieser Umwandlungen erhält man durch den Einsatz von Phasendiagrammen. Experimentell bestimmte Phasendiagramme liegen jedoch zumeist nur für binäre, teilweise für ternäre und in seltenen Fällen auch für Systeme höherer Ordnung vor. Durch den Einsatz der sogenannten Calphad-Methode (CALculation of PHase Diagrams), deren Grundlagen in den frühen 1970er Jahren von Larry Kaufman erarbeitet wurden, ist es dennoch möglich solche komplexen Legierungen rechnergestützt zu beschreiben /4/. Dieses Verfahren ist in verschiedenen kommerziell angebotenen Software-Produkten, wie z. B. ThermoCalc, MTDATA, FactSage oder Pandat implementiert. (Die am IMP vorhandene Software namens Pandat wird im nächsten Kapitel kurz vorgestellt.)

#### 3.1 Grundlagen

Die Grundlage der Calphad-Methode stellt die Tatsache dar, dass ein Phasendiagramm eine Repräsentation der thermodynamischen Eigenschaften eines Systems darstellt. Demnach sollte es möglich sein - sofern die thermodynamischen Eigenschaften bekannt sind - mehrkomponentige Phasendiagramme rechnerisch zu bestimmen. Die Calphad-Methode beruht darauf, dass in einem stofflichen System alle Vorgänge einem Minimum der freien Enthalpie zustreben. Der jeweils stabile Zustand eines Systems unter bestimmten äußeren Bedingungen stellt also derjenige mit der geringsten freien Enthalpie dar. Zustände in denen dieses Gleichgewicht noch nicht erreicht ist, wie etwa in unterkühlten Schmelzen (Gläsern), werden als metastabil bezeichnet.

Bei konstanter Temperatur und gleichbleibendem Druck kann die freie Enthalpie durch folgende Gleichung bestimmt werden:

$$G = H - TS.$$

Hierbei bezeichnet G die freie Enthalpie, H die Enthalpie, T die Temperatur und S die Entropie. Die Enthalpie ist ein Maß für die Energie eines thermodynamischen Systems, während die Entropie ein Maß für die Unordnung eines Systems darstellt. Aus der obigen Formel ist zu erkennen, dass bei zunehmender Temperatur

der Einfluss der Entropie auf die freie Enthalpie zunimmt. Somit werden bei hohen Temperaturen Systeme mit hoher Entropie bevorzugt, da hierdurch die freie Enthalpie geringer wird. Deshalb treten bei hohen Temperaturen keine geordneten Festkörper mehr auf, sondern die Atome liegen regellos als Flüssigkeiten oder bei noch höheren Temperaturen als Gase vor.

Dieses Prinzip lässt sich wieder am Beispiel des Systems Kupfer-Nickel verdeutlichen. In Abbildung 6 a) ist schematisch der Verlauf der freien Enthalpie der Flüssig- (G liquid) und der Festphase (G solid) bei 1500 °C eingezeichnet. Es ist zu erkennen, dass im gesamten Konzentrationsbereich die freie Enthalpie der Flüssigphase geringer als die der Festphase ist, weshalb die Flüssigphase über den gesamten Konzentrationsbereich stabil ist. Die freien Enthalpien der beiden Phasen bei 1000 °C sind schematisch in Abbildung 6 b) abgebildet. Hier verläuft die Kurve der Festphase im gesamten Konzentrationsbereich unterhalb der Kurve der Flüssigphase, weshalb bei dieser Temperatur im thermodynamischen Gleichgewicht das System als Festkörper vorliegt. In Abbildung 6 d) (bei 1200 °C) kreuzen sich die beiden Kurven der freien Enthalpien, weshalb im linken Teil, also bei einer hohen Kupferkonzentration, die Flüssigphase stabil ist, während im rechten Teil mit hohem Nickelanteil die freie Enthalpie der Festphase minimal ist. Es gibt jedoch auch einen Bereich in der Mitte des Konzentrationsspektrums, in dem das Gemenge aus beiden Phasen den stabilen Zustand darstellt, also im thermodynamischen Gleichgewicht beide Phasen koexistieren. Dies ist daran zu erkennen, dass die gemeinsame Tangente an beide Kurven in diesem Bereich stets unterhalb der Kurven der beiden einzelnen Phasen liegt. In Abbildung 6 c) ist das Phasendiagramm dieser Legierung abgebildet, in dem für die drei Temperaturen jeweils eine farbliche Kennzeichnung der stabilen Phasen eingezeichnet ist. Kennt man also die freie Enthalpie jeder Phase über den gesamten Temperatur- und Konzentrationsbereich, so kann man hieraus das Phasendiagramm für das entsprechende System ableiten. Hierauf beruht die Calphad-Methode, deren Funktionsweise im Folgenden kurz erläutert wird.

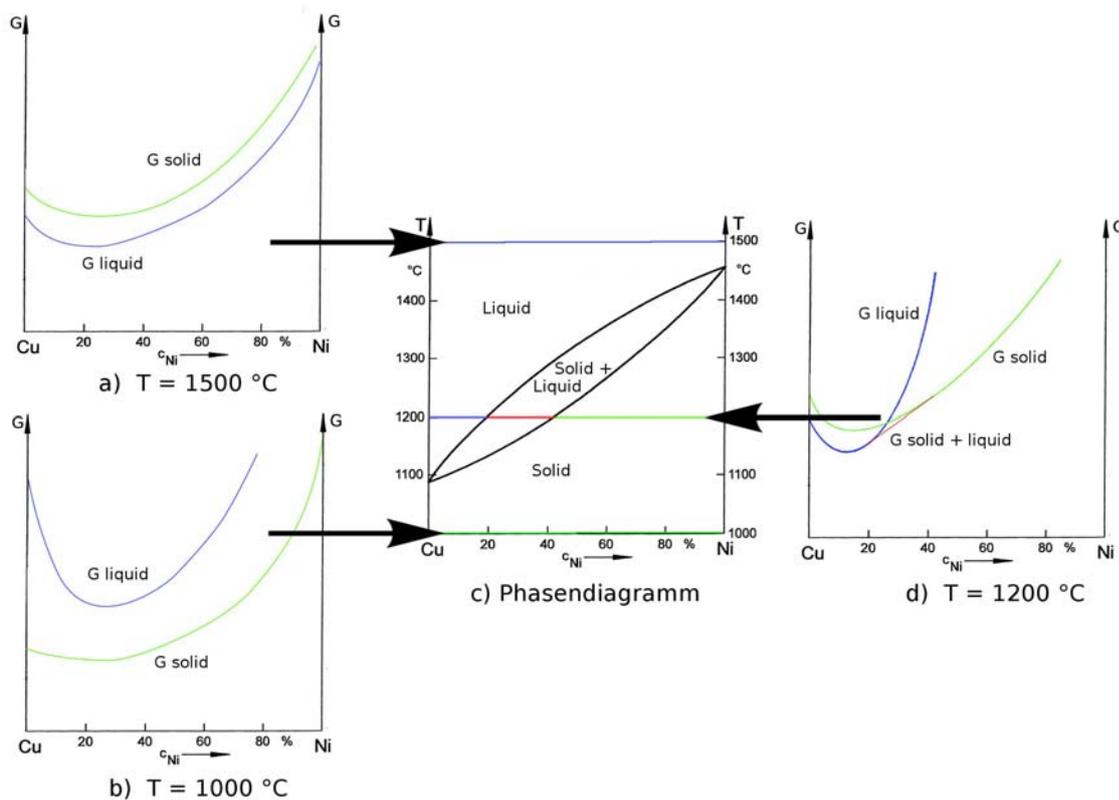


Abbildung 6: a), b), d) schematischer Verlauf der freien Enthalpien von Flüssig- und Festphase

c) Resultierendes Phasendiagramm

### 3.2 Funktionsweise

Durch Experimente lassen sich unterschiedliche Informationen über ein Stoffsystem gewinnen. Diese schließen Schmelztemperaturen, andere Phasenumwandlungstemperaturen und Löslichkeiten genauso ein wie Wärmekapazitäten, Bildungs-Enthalpien und chemische Potentiale. Die Funktionen der freien Enthalpien der einzelnen Phasen können nun aus der Gesamtheit der vorhandenen experimentellen Daten abgeleitet und als Polynome mit Variablen für die Temperatur und chemische Zusammensetzung ausgedrückt werden. Die numerischen Werte der polynomialen Koeffizienten erhält man durch den Einsatz von rechnergestützten Optimierungsmethoden. Ausgehend von den binären und ternären Randsystemen kann die Phasenzusammensetzung eines Legierungssystems höherer Ordnung berechnet werden, indem man nach dem Prinzip der Gibbs'schen Energieminimierung extrapoliert. Die somit erhaltenen thermodynamischen Daten liegen für die

meisten kommerziell bedeutenden Legierungen zumeist im gebräuchlichen TDB-Format vor und können kommerziell erworben werden.

### 3.3 Pandat

Pandat ist ein kommerzielles, windows-basiertes Software-Paket der amerikanischen Firma CompuTherm LLC, mit dessen Hilfe Phasendiagramme und thermodynamische Eigenschaften von mehrkomponentigen Legierungen berechnet werden können /5/. In Abbildung 7 ist die Software-Architektur, bestehend aus drei Ebenen, dargestellt. Die unterste Ebene stellen die thermodynamischen, kinetischen oder sonstigen Datensätze dar, deren gespeicherte Daten die Grundlage jeder Berechnung bilden. Diese Datensätze werden im TDB-Format oder Pandat-eigenen PDB-Format von CompuTherm für kommerzielle Legierungen angeboten oder können von anderen Quellen bezogen werden. Der Anwender bedient Pandat über die graphische Benutzeroberfläche, welche die oberste Ebene bildet. Durch die Eingabe von Befehlen können auf dieser Ebene Rechnungen gestartet und deren Ergebnisse anschaulich in Tabellen- oder Diagrammform angezeigt werden. Die eigentliche Berechnung der stabilen Phasengleichgewichte erfolgt auf Grundlage der Datensätze durch die sogenannte PanEngine, wobei hierfür keine Startwerte des Benutzers benötigt werden. Dieser auf der Calphad-Methode basierende Gleichungslöser kann auch als sogenannte DLL (Dynamic Link Library), also als dynamische Programm-Bibliothek, für problemspezifische Softwareanwendungen, wie z.B. Gefüge- und Ausscheidungssimulationen, genutzt werden. Außer der Berechnung von Phasendiagrammen und thermodynamischen Größen, bietet Pandat mittels PanOptimizer die Möglichkeit, aus experimentellen Daten selbst thermodynamische Datensätze zu erstellen. Mit PanPrecipitation kann die Ausscheidungskinetik während Wärmebehandlungs-Prozessen auf Grundlage von kinetischen Datensätzen simuliert werden.

# Pandat

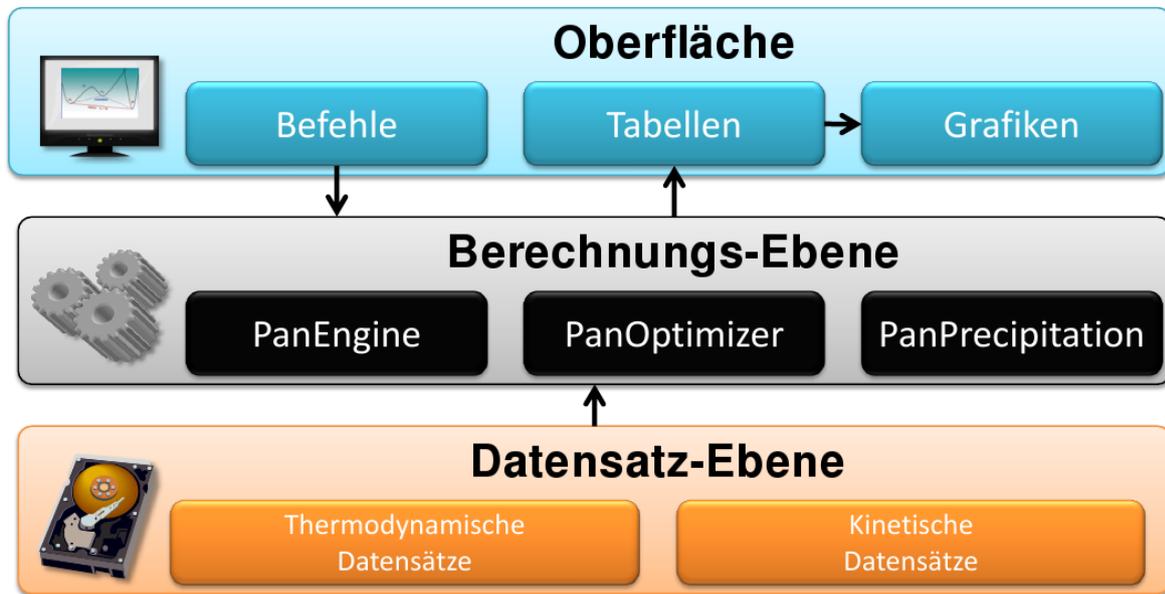


Abbildung 8: Softwarearchitektur von Pandat

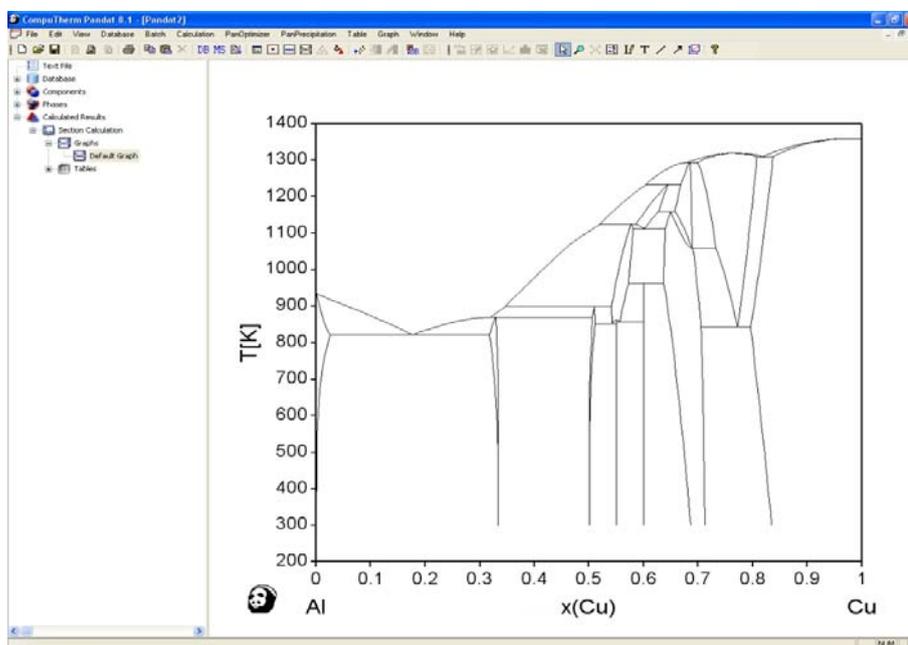


Abbildung 7: Screenshot eines mit Pandat berechneten Phasendiagramms

## 4 Vorstellung der Phasenfeldsimulationssoftware PACE 3D

### 4.1 Zugrundeliegendes Modell

Mit einem Phasenfeldmodell lässt sich das Verhalten von Phasen und ihrer Übergänge ineinander, wie etwa Kristallwachstum oder Kornreifungsprozesse, beschreiben. Das Phasenfeldmodell, welches der PACE 3D-Software zugrunde liegt (siehe /6/), soll an dieser Stelle kurz erläutert werden. Es ist gültig für Materialsysteme bestehend aus mehreren Komponenten und mehreren Phasen. Bei der Phasenfeldsimulation findet jedoch keine Berücksichtigung der einzelnen Komponenten auf atomarer Ebene statt, sondern eine Phase wird als Kontinuum auf einer größeren Längenskala angesehen. Der Einfachheit halber werden für das System ein mechanisches Gleichgewicht, sowie konstanter Druck und konstante Massendichte angenommen. Die Konzentrationen der Komponenten und die lokalen Volumenanteile der Phasen werden jeweils durch einen orts- und zeitabhängigen Vektor repräsentiert. Für den lokalen Volumenanteil der Phase besteht dieser Vektor aus den Phasenfeldparametern  $\varphi_\alpha$  der einzelnen Phasen  $\alpha$ , die im Inneren der zugehörigen Phase den Wert Eins besitzen. Dieser Wert fällt in der diffusen Grenzfläche zwischen der jeweiligen Phase und einer oder mehreren benachbarten Phasen - dem Interface - auf Null ab. Besitzt der Phasenfeldparameter einer Phase an einem Ort den Wert Null, bedeutet dies, dass an dieser Stelle die Phase nicht vorhanden ist. Die 2D-Schemazeichnung Abbildung 9 a) zeigt ein Rechengebiet mit einem festen Korn  $\Omega_S$  in einer Flüssigphase  $\Omega_L$ . In Abbildung 9 b) ist der kontinuierliche Verlauf des Phasenfeldparameters im Schnitt durch die diffuse Grenzfläche abgebildet.

Die physikalischen Effekte, die während der Erstarrung auftreten (wie Wärme- und Massentransport oder die Freisetzung latenter Wärme) werden durch ein Entropiefunktional beschrieben, das von der inneren Energie, den Konzentrationen und den Phasenfeldparametern abhängig ist. Mittels variationeller Ableitung dieses Entropiefunktional erhält man Evolutionsgleichungen für die zeitliche Veränderung der inneren Energie, der Konzentrationen und der Phasenfelder. Hierbei sind die Energie- und Massenerhaltung, sowie eine Erhöhung der gesamten Entropie sicher gestellt. Die Diskretisierung der Evolutionsgleichungen wird durch Verwendung eines expliziten Finite-Differenzen-Verfahrens erzielt. Zur Berechnung von Simulationen wird dieses Gleichungssystem numerisch durch den Solver gelöst.

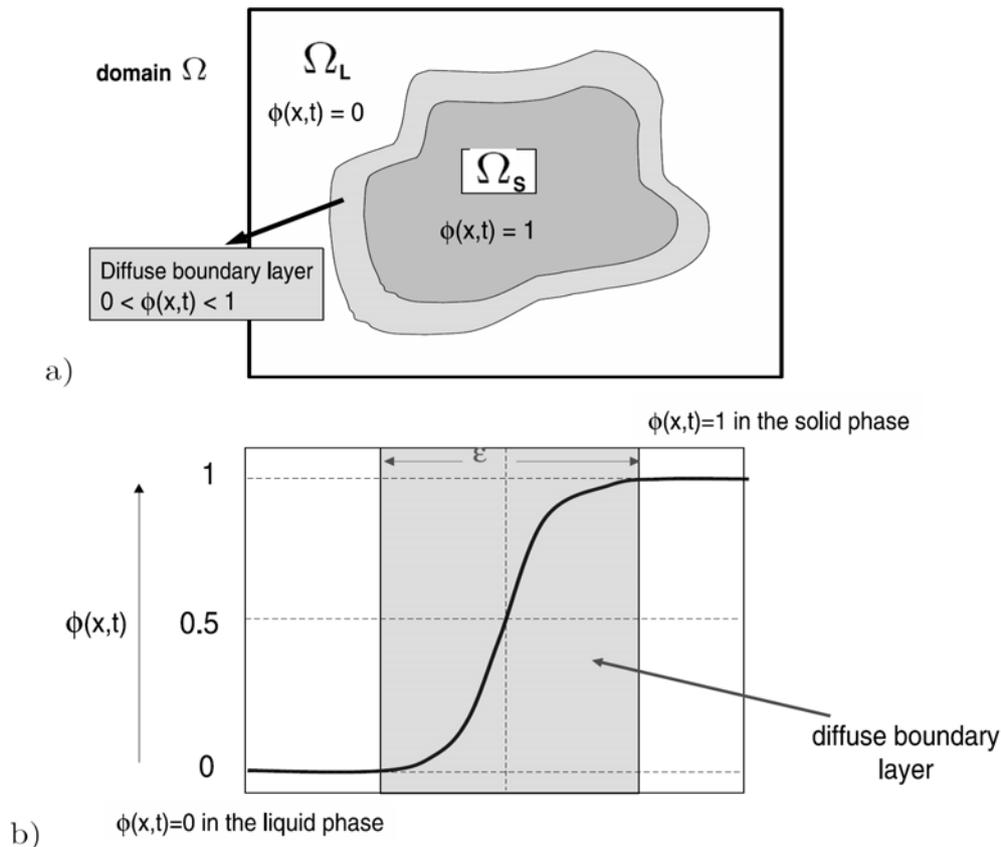


Abbildung 9: a) Rechengebiet mit Festphase ( $\varphi=1$ ) und Flüssigphase ( $\varphi=0$ )

## 4.2 Aufbau von PACE 3D

Mit PACE 3D können Phasenfeldsimulationen in 2 D oder 3 D durchgeführt werden. Der Ablauf einer Simulation (Abb. 10) gliedert sich wie die meisten Computersimulationen in drei Abschnitte:

- das Preprocessing,
- die eigentliche Simulation und
- das Postprocessing.

Mit Preprocessing wird die Vorbereitung einer Simulation bezeichnet, was der Bereitstellung benötigter Eingabedaten in einem definierten Format entspricht. Die Eingabeparameter lassen sich unterteilen in:

- physikalische Eigenschaften des zu simulierenden Systems,
- Größe und Ausgangszustand des Rechengebiets
- und sonstige Simulations-Parameter.

Bisher werden diese Daten zumeist der Literatur entnommen. Zudem können Gefügebilder, die z.B. im Rahmen des CCMSE-Projektes am Labor für Werkstoffentwicklung und -prüfung der Hochschule Pforzheim erstellt werden, mittels einer Bilderkennungssoftware dazu genutzt werden, den Ausgangszustand des Rechengebiets zu bestimmen, oder um nach der Simulation die Ergebnisse mit dem realen Gefüge abzugleichen. Für PACE 3D werden die Parameter in Form einer textbasierten Eingabedatei, dem sogenannten Infile, zur Verfügung gestellt. Diese Datei enthält Kenngrößen des zu simulierenden Materialsystems, Parameter zur Definition des Rechengebietes und des Ausgangszustandes, Angaben zur Zeitschrittweite, zur Berechnungsart, zur Speicherung der Ausgabedaten und weitere Einträge, etwa zur Berechnung von Strömungen. Die Eingabe der Parameter in das Infile kann entweder mittels eines Textverarbeitungsprogrammes oder über einen Eingabe-Assistent mit grafischer Benutzeroberfläche erfolgen. Die eigentliche Simulation wird durch den Solver, also den Gleichungslöser, ausgeführt. Auf Grundlage der Daten aus dem Infile und aus den Werten vergangener Zeitschritte löst dieser die Gleichungen aus dem zugrundeliegenden Modell und ermittelt somit die Zustandswerte für den jeweils nächsten Zeitschritt. Die Daten der einzelnen Zustandsgrößen wie den Konzentrationen, den Phasenfeldparametern oder der Temperatur zu den einzelnen Zeitpunkten werden in verschiedenen Ausgabedateien gespeichert. Durch Methoden wie dem Einsatz von adaptiven Gittern oder dem parallelen Rechnen auf mehreren Prozessoren kann hierbei eine deutliche Verkürzung der Rechenzeit erzielt werden. Im letzten Schritt, dem Postprocessing, werden die Ausgabedaten nach einer Simulation für die Analyse aufbereitet. Die Überprüfung der Daten kann entweder durch verschiedene Analyseprogramme erfolgen oder durch ihre Visualisierung. Hierfür stehen eigens entwickelte Betrachtungsprogramme zur Verfügung, mit denen zwei- oder dreidimensionale Daten in einer ansprechenden Form grafisch dargestellt werden.

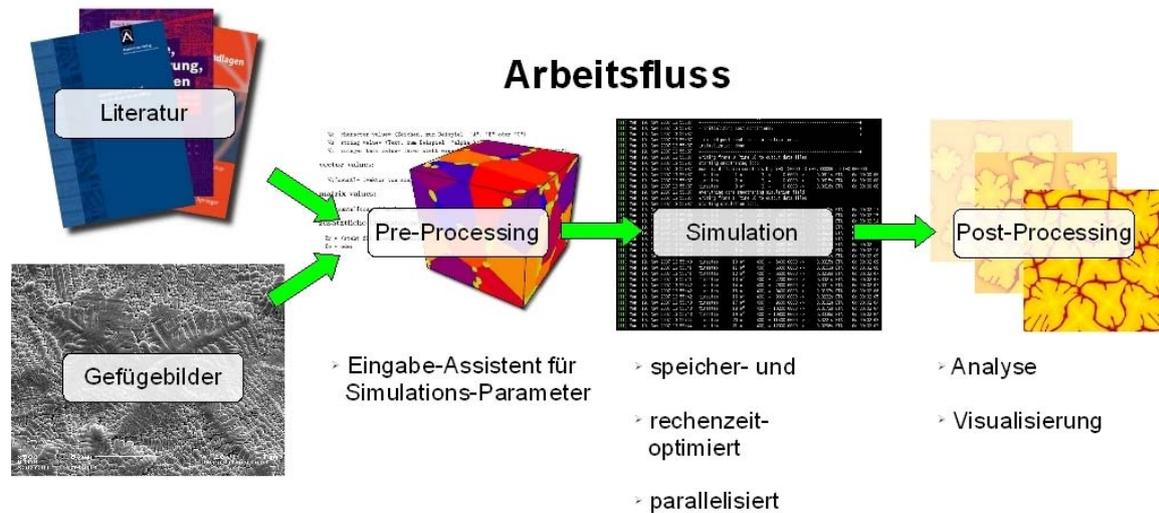


Abbildung 10: bisheriger Prozessablauf

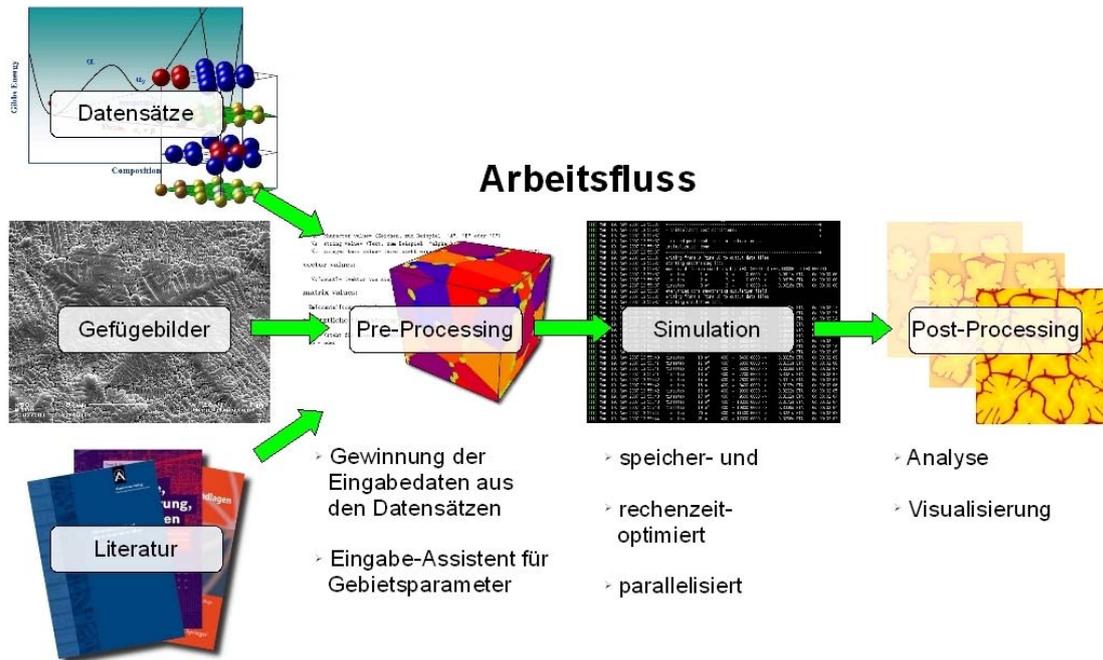
## 5 Verknüpfung der Datensätze mit PACE 3D

Die Datensätze zur Berechnung von Phasendiagrammen nach der Calphad-Methode beruhen auf einer Vielzahl von experimentellen Daten und wurden für kommerziell bedeutende Legierungen ausgiebig auf ihre Richtigkeit überprüft. Sie beinhalten eine Beschreibung der freien Enthalpie verschiedener Phasen, die ebenfalls für die Evolutions-Gleichungen des Phasenfeldmodells genutzt werden kann. Durch eine Integration der Datensätze in das Pre-Processing und die Berechnung von Phasenfeldsimulationen kann das bisher verwendete, idealisierte Phasendiagramm durch ein genaueres Modell ersetzt werden, wodurch gleichzeitig auch die Suche nach den zuvor benötigten latenten Wärmen und Schmelztemperaturen aus der Literatur entfällt. Eine direkte Nutzung der PanEngine des Pandat-Pakets ist hierbei leider nicht möglich, da PACE 3D unter dem Betriebssystem Linux läuft und deshalb nicht auf DLLs zugreifen kann. Somit besteht die Notwendigkeit der Entwicklung eigener Software, welche die Datensätze auslesen kann.

Um die Datensätze im TDB-Format auslesen und deren Inhalte in eine Eingabedatei von PACE 3D, ein sogenanntes Infile, schreiben zu können, wurde ein Konvertierungsprogramm namens *tdb2infile* programmiert. Die Funktionsweise des Programms ist in Abbildung 11 dargestellt. Eine TDB-Datei stellt, wie auch ein Infile,

nichts Anderes als eine Textdatei dar, die sich mit Funktionen aus der C Standard-Bibliothek bearbeiten lässt. Nach dem Öffnen der TDB-Datei wird dessen Inhalt eingelesen und zuerst Zeilenumbrüche und Kommentarzeilen aus dem Text entfernt. Anschließend erfolgt eine Unterteilung des Texts in einzelne Abschnitte, sogenannte Tokens. Die Einträge der einzelnen Schlüsselwörter sind voneinander durch Ausrufezeichen getrennt, nach welchen gesucht wird und bei denen der Text in die einzelnen Tokens unterteilt wird. Durch eine weitere Unterteilung der Tokens an Stellen mit Leerzeichen liegen schließlich Tokens für jeden einzelnen Parameter des jeweiligen Schlüsselwort-Eintrags vor. Anschließend erfolgt das Auslesen der Tokens eine Funktion, die zuerst das Schlüsselwort eines Eintrags erkennt und dann je nach Anzahl und Typ der Parameter diese in einer individuellen Daten-Struktur für das entsprechende Schlüsselwort abspeichert. Nach dem Auslesen der Daten wird ein Menü ausgegeben, in dem der Benutzer die Elemente und Phasen definieren kann, die in das Infile geschrieben werden sollen. Die ausgelesenen Daten werden nun an ein bestehendes Infile angehängt, wobei die Syntax wiederum aus Schlüsselwörtern mit nachfolgenden Argumenten besteht. Nach Schließen der TDB-Datei ist der Programmaufruf von *tdb2infile* beendet.

Damit die zusätzlichen Einträge in der Eingabedatei vom Solver eingelesen und ausgewertet werden können, wurde eine neue Funktion zur Berechnung der freien Enthalpien in den Solver integriert. Diese beruht auf dem sogenannten Compound-Energy-Formalism, der eine Beschreibung der freien Enthalpie unter Berücksichtigung von Kristall-Untergittern darstellt /8/.




---

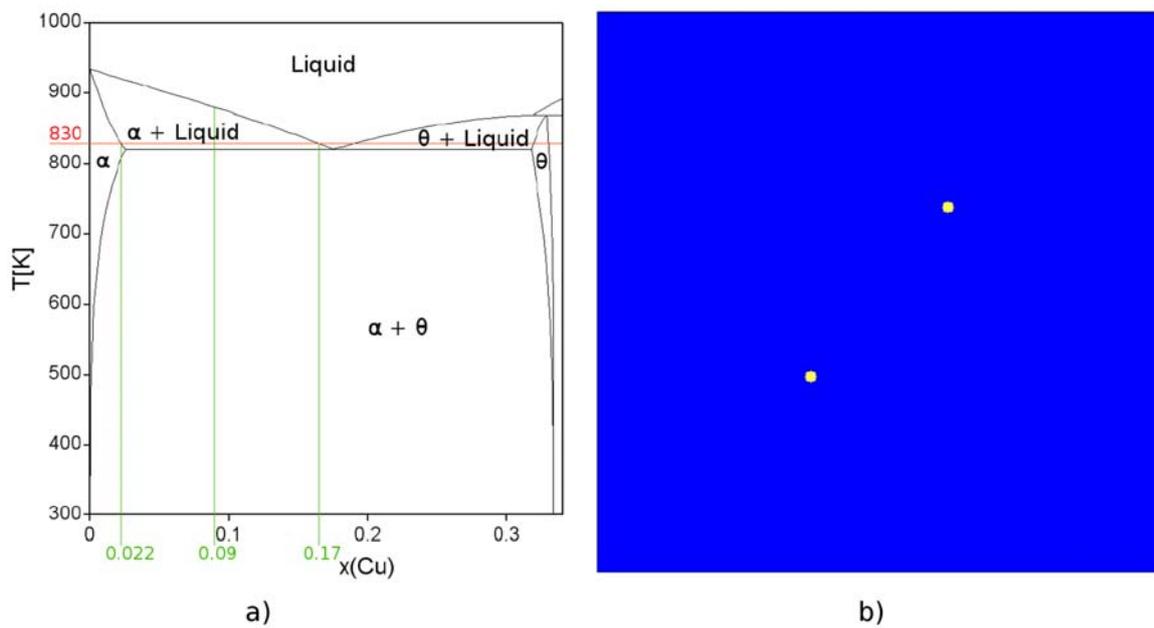
**Abbildung 11: erweiterter Prozessablauf**

---

## 6 Simulationsergebnisse

Mit dem erstellten Konvertierungsprogramm wurden die Parameter aus den Datensätzen von Aluminium-Kupfer an ein Infile angehängt, in welches die weiteren benötigten Parameter eingetragen waren. Die Simulation wurde in einem zweidimensionalen Rechengebiet der Größe 500 x 500 Zellen bei einer konstanten Temperatur von 830 K durchgeführt. In dem Phasendiagramm von Aluminium-Kupfer (Abb. 12 a)) ist zu erkennen, dass man sich bei dieser Temperatur und einer gesamten Kupfer-Konzentration von 0,09 in dem Zweiphasenfeld zwischen der Liquiduslinie und der Eutektikalen befindet, in dem sowohl die Flüssigphase, als auch die Alpha-Phase vorliegt. Im Ausgangszustand (Abb. 12 b)) ist das Gebiet mit der unterkühlten Schmelze der Kupfer-Konzentration von 0,09 gefüllt. In die Mitte des Gebietes wurden zwei kreisförmige Keime der aluminiumreichen Alpha-Phase gesetzt, für die eine Kupfer-Konzentration von 0,022 gewählt wurde, was der im Phasendiagramm erkennbaren Gleichgewichtskonzentration der Phase bei dieser Temperatur entspricht.

In Abbildung 13 a) ist erkennbar, dass die beiden Keime der Alpha-Phase gegenüber dem Ausgangszustand gewachsen sind und anfangen Arme auszubilden. Die hell dargestellte Alpha-Phase ist von aluminiumarmer, dunkel dargestellter Schmelze umgeben, da die Alpha-Phase bei ihrem Wachstum der Flüssigphase Aluminium entzieht. Im Endzustand (Abb. 13 b) haben sich die Keime zu zwei Dendriten mit jeweils vier Hauptarmen entwickelt. Zwischen den beiden Dendriten hat sich ein Bereich aluminiumarmer Flüssigphase ausgebildet.



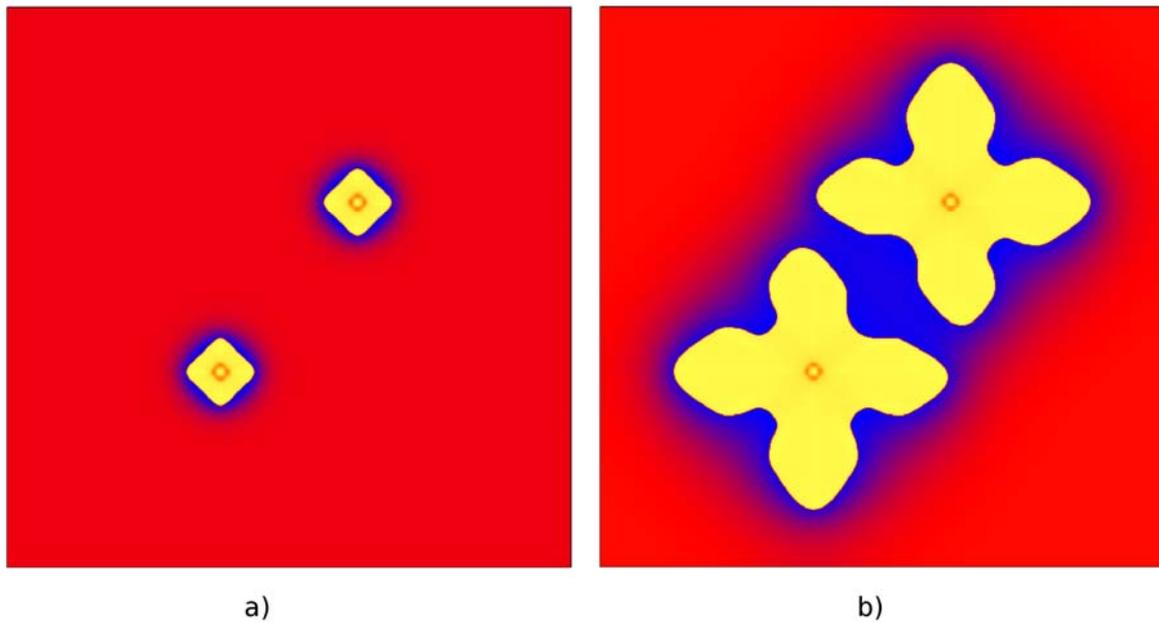
---

**Abbildung 12:** a) Ausschnitt des Phasendiagramms Aluminium-Kupfer

---

b) Ausgangszustand der Simulation

---




---

Abbildung 13: a) Zwischenergebnis b) Endergebnis

---

## 7 Ausblick

Um das angestrebte Ziel der Nutzung von thermodynamischen Datensätzen für die Phasenfeldsimulation in vollem Umfang zu erreichen, bietet sich eine Vielzahl von Möglichkeiten an, die in der Zukunft umgesetzt werden können. Das Konvertierungsprogramm *tdb2infile* sollte um die Möglichkeit ergänzt werden, nicht nur an bestehende Infiles die Material-, Funktions- und Parameter-Daten aus den TDB-Dateien anzuhängen, sondern auch Infiles neu zu erstellen. Dies könnte in Kombination mit einer Integration des Programms in einen Infile-Editor mit grafischer Benutzeroberfläche geschehen. Bisher noch nicht berücksichtigte Schlüsselwörter sollten in einer neueren Version ebenfalls ausgelesen werden, um auch Datensätze mit Ionen und Leerstellen oder auch Effekten wie Magnetismus für Phasenfeldsimulationen nutzen zu können. Hierfür müsste jedoch der Solver um weitere Funktionen erweitert werden, die diese Effekte berücksichtigen können. Die vorhandenen binären Datensätze könnten zu Datensätzen für Systeme höherer Ordnung kombiniert werden, indem beispielsweise drei binäre Datensätze jeweils zweier Komponenten eines ternären Systems als dessen Randsysteme (bei denen jeweils eine Komponente die Konzentration Null besitzt) betrachtet und zur Erstellung des Datensatzes für das ternäre System benutzt würden. Zu guter Letzt könn-

ten in Zukunft neue Datensätze käuflich erworben werden, um auch Systeme simulieren zu können, von denen bisher keine Datensätze vorliegen.

## 8 Literatur

- /1/ [www.bmbf.de/de/1000.php](http://www.bmbf.de/de/1000.php)
- /2/ [www.iwi.hs-karlsruhe.de/~nebr0001/ice/nestler/index.php?id=65](http://www.iwi.hs-karlsruhe.de/~nebr0001/ice/nestler/index.php?id=65)
- /3/ Günter Gottstein, Physikalische Grundlagen der Materialkunde, Springer-Verlag, 2007
- /4/ [www.calphad.org](http://www.calphad.org)
- /5/ [www.computherm.com/pandat.html](http://www.computherm.com/pandat.html)
- /6/ Britta Nestler, H. Garcke und B. Stinner; Multicomponent Alloy Solidification: Phase-field Modelling and Simulations, in: Physical Review, 2005, E 71, 041609
- /7/ Frank Wendler, Kurzanleitung für den PACE3D-Solver Hochschule Karlsruhe, Institute of Computational Engineering, 2008
- /8/ Mats Hillert, The compound energy formalism, Journal of Alloys and Compounds, 2001

## Verzeichnis der bisher erschienenen Beiträge

---

- |     |   |            |  |
|-----|---|------------|--|
| 52. | <b>Werner Pepels</b>  | Aug. 1990  | Integrierte Kommunikation  |
| 53. | <b>Martin Dettinger-Klemm</b>                                     | Aug. 1990  | Grenzen der Wissenschaftsfreiheit. Überlegungen zum Thema: Freiheit und Verantwortung des Wissenschaftlers   |
| 54. | <b>Werner Pepels</b>  | Sept. 1990 | Mediaplanung – Über den Einsatz von Werbegebern in Medien  |
| 55. | <b>Dieter Pflaum</b>  | Sept. 1990 | Werbeausbildung und Werbemöglichkeiten in der DDR  |
| 56. | <b>Rudi Kurz (Hrsg.)</b>  | Nov. 1990  | Ökologische Unternehmensführung – Herausforderung und Chance   |
| 57. | <b>Werner Pepels</b>  | Jan. 1991  | Verkaufsförderung – Versuch einer Systematisierung   |
| 58. | <b>Rupert Huth, Ulrich Wagner (Hrsg.)</b>                         | Aug. 1991  | Volks- und betriebswirtschaftliche Abhandlungen. Prof. Dr. Dr. h.c. Tibor Karpati (Universität Osijek in Kroatien) zum siebzigsten Geburtstag. Mit einem Vorwort von R. Huth und Beiträgen von H.-J. Hof, H. Löffler, D. Pflaum, B. Runzheimer und U. Wagner |
| 59. | <b>Hartmut Eisenmann</b>  | Okt. 1991  | Dokumentation über die Tätigkeit einer Industrie- und Handelskammer – Dargestellt am Beispiel der IHK Nordschwarzwald  |
| 60. | <b>Ursula Hoffmann-Lange</b>                                      | Dez. 1991  | Eliten und Demokratie: Unvereinbarkeit oder notwendiges Spannungsverhältnis?   |
| 61. | <b>Werner Pepels</b>  | Dez. 1991  | Elemente der Verkaufsgesprächsführung  |
| 62. | <b>Wolfgang Berger</b>  | Dez. 1991  | Qualifikationen und Kompetenzen eines Europa-managers  |
| 63. | <b>Günter Staub</b>   | Jan. 1992  | Der Begriff „Made in Germany“ – Seine Beurteilungskriterien  |
| 64. | <b>Martin W. Knöll, Hieronymus M. Lorenz</b>                      | Mai 1992   | Gegenstandsbereich und Instrumente der Organisationsdiagnose im Rahmen von Organisationsentwicklungs (OE)-Maßnahmen  |
| 65. | <b>Werner Lachmann</b>  | Juni 1992  | Ethikversagen – Marktversagen  |
| 66. | <b>Paul Banfield</b>  | Juni 1993  | Observations On The Use Of Science As A Source Of Legitimation In Personnel Management   |
| 67. | <b>Bernd Noll</b>   | Aug. 1993  | Gemeinwohl und Eigennutz. Wirtschaftliches Handeln in Verantwortung für die Zukunft – Anmerkungen zur gleichnamigen Denkschrift der Evangelischen Kirche in Deutschland aus dem Jahre 1991   |
| 68. | <b>Siegfried Kreutzer, Regina Moczadlo</b>                        | Aug. 1993  | Die Entdeckung der Wirklichkeit – Integrierte Projektstudien in der Hochschulausbildung  |
| 69. | <b>Sybil Gräfin Schönfeldt</b>                                    | Aug. 1993  | Von Menschen und Manieren. Über den Wandel des sozialen Verhaltens in unserer Zeit. Vortrag gehalten im Rahmen des Studium Generale der Hochschule Pforzheim, Wintersemester 1992/93   |
| 70. | <b>Hartmut Löffler</b>  | Dez. 1993  | Geld- und währungspolitische Grundsatzüberlegungen für ein Land auf dem Weg zur Marktwirtschaft – Das Beispiel Kroatien  |
| 71. | <b>Hans-Georg Köglmayr, Kurt H. Porkert</b>                       | Nov. 1994  | Festlegen und ausführen von Geschäftsprozessen mit Hilfe von SAP-Software  |
| 72. | <b>Alexa Mohl</b>   | Febr. 1995 | NLP-Methode zwischen Zauberei und Wissenschaft. Vortrag gehalten im Rahmen des Studium Generale der Hochschule Pforzheim, Wintersemester 1994/95   |
| 73. | <b>Bernd Noll</b>   | Mai 1995   | Marktwirtschaft und Gerechtigkeit: Anmerkungen zu einer langen Debatte   |
| 74. | <b>Rudi Kurz, Rolf-Werner Weber</b>                               | Nov. 1995  | Ökobilanz der Hochschule Pforzheim. 2. geänderte Auflage, Jan. 1996  |
| 75. | <b>Hans Lenk</b>  | Mai 1996   | Fairneß in Sport und Wirtschaft. Vortrag gehalten im Rahmen des Studium Generale der Hochschule Pforzheim, Wintersemester 1995/96  |
| 76. | <b>Barbara Burkhardt-Reich, Hans-Joachim Hof, Bernd Noll</b>      | Juni 1996  | Herausforderungen an die Sozialstaatlichkeit der Bundesrepublik  |
| 77. | <b>Helmut Wienert</b>   | März 1997  | Perspektiven der Weltstahlindustrie und einige Konsequenzen für den Anlagenbau   |
| 78. | <b>Norbert Jost</b>   | Mai 1997   | Innovative Ingenieur-Werkstoffe  |
| 79. | <b>Rudi Kurz, Christoph Hubig, Ortwin Renn, Hans Diefenbacher</b> | Sept. 1997 | Ansprüche in der Gegenwart zu Lasten der Lebenschancen zukünftiger Generationen  |
| 80. | <b>Björn Engholm</b>  | Okt. 1997  | Ökonomie und Ästhetik. Vortrag gehalten im Rahmen des Studium Generale der Hochschule Pforzheim, Wintersemester 1996/97. 2. geänderte Auflage. Jan. 1998   |
| 81. | <b>Lutz Goertz</b>  | Sept. 1998 | Multimedia quo vadis? – Wirkungen, Chancen, Gefahren. Vortrag gehalten im Rahmen des Studium Generale der Fachhochschule Pforzheim, Wintersemester 1996/97   |
| 82. | <b>Eckhard Keßler</b>   | Nov. 1998  | Der Humanismus und die Entstehung der modernen Wissenschaft. Vortrag gehalten im Rahmen des Studium Generale der Hochschule Pforzheim, Wintersemester 1996/97  |
| 83. | <b>Heinrich Hornef</b>  | Febr. 1998 | Aufbau Ost – Eine Herausforderung für Politik und Wirtschaft. Vortrag gehalten im Rahmen des Studium Generale der Fachhochschule Pforzheim, Wintersemester 1997/98   |

## Verzeichnis der bisher erschienenen Beiträge

---

84. **Helmut Wienert** Juli 1998  
50 Jahre Soziale Marktwirtschaft – Auslaufmodell oder Zukunftskonzept? Vortrag gehalten im Rahmen des Studium Generale der Hochschule Pforzheim, Sommersemester 1998  
Peter Kern, Wilhelm Bauer, Rolf Ilg; Heiko Dreyer; Johannes Wößner und Rainer Menge
85. **Bernd Noll** Sept. 1998  
Die Gesetzliche Rentenversicherung in der Krise
86. **Hartmut Löffler** Jan. 1999  
Geldpolitische Konzeptionen - Alternativen für die Europäische Zentralbank und für die Kroatische Nationalbank
87. **Erich Hoppmann** Juni 1999  
Globalisierung. Vortrag gehalten im Rahmen des Studium Generale der Hochschule Pforzheim, Sommersemester 1999
88. **Helmut Wienert (Hrsg.)** Dez. 1999  
Wettbewerbspolitische und strukturpolitische Konsequenzen der Globalisierung. Mit Beiträgen von Hartmut Löffler und Bernd Noll
89. **Ansgar Häfner u.a. (Hrsg.)** Jan. 2000  
Konsequenzen der Globalisierung für das internationale Marketing. Mit Beiträgen von Dieter Pflaum und Klaus-Peter Reuthal
90. **Ulrich Wagner** Febr. 2000  
Reform des Tarifvertragsrechts und Änderung der Verhaltensweisen der Tarifpartner als Voraussetzungen für eine wirksame Bekämpfung der Arbeitslosigkeit
91. **Helmut Wienert** April 2000  
Probleme des sektoralen und regionalen Wandels am Beispiel des Ruhrgebiets
92. **Barbara Burkhardt-Reich** Nov. 2000  
Der Blick über den Tellerrand – Zur Konzeption und Durchführung eines „Studium Generale“ an Fachhochschulen
93. **Helmut Wienert** Dez. 2000  
Konjunktur in Deutschland - Zur Einschätzung der Lage durch den Sachverständigenrat im Jahrestgutachten 2000/2001
94. **Jürgen Wertheimer** Febr. 2001  
Geklonte Dummheit: Der infantile Menschenpark. Vortrag gehalten im Rahmen des Studium Generale der Hochschule Pforzheim, Wintersemester 2000/01
95. **Konrad Zerr** März 2001  
Erscheinungsformen des Online-Research – Klassifikation und kritische Betrachtung
96. **Daniela Kirchner** April 2001  
Theorie und praktische Umsetzung eines Risikomanagementsystems nach KontraG am Beispiel einer mittelständischen Versicherung
97. **Bernd Noll** Mai 2001  
Die EU-Kommission als Hüterin des Wettbewerbs und Kontrolleur von sektoralen und regionalen Beihilfen  
**Peter Frankenfeld**  
EU Regionalpolitik und Konsequenzen der Osterweiterung
98. **Hans Joachim Grupp** Juni 2001  
Prozessurale Probleme bei Beschlussmängelstreitigkeiten in Personengesellschaften
99. **Norbert Jost (Hrsg.)** Juli 2001  
Technik Forum 2000: Prozessinnovationen bei der Herstellung kaltgewalzter Drähte. Mit Beiträgen von
100. **Urban Bacher, Mikolaj Specht** Dez. 2001  
Optionen – Grundlagen, Funktionsweisen und deren professioneller Einsatz im Bankgeschäft
101. **Constanze Oberle** Okt. 2001  
Chancen, Risiken und Grenzen des M-Commerce
102. **Ulrich Wagner** Jan. 2002  
Beschäftigungshemmende Reformstaus und wie man sie auflösen könnte  
**Jürgen Volkert**  
Flexibilisierung durch Kombi-Einkommen? Die Perspektive der Neuen Politischen Ökonomie
103. **Mario Schmidt, René Keil** März 2002  
Stoffstromnetze und ihre Nutzung für mehr Kostentransparenz sowie die Analyse der Umweltwirkung betrieblicher Stoffströme
104. **Kurt Porkert** Mai 2002  
Web-Services – mehr als eine neue Illusion?
105. **Helmut Wienert** Juni 2002  
Der internationale Warenhandel im Spiegel von Handelsmatrizen
106. **Robert Wessolly, Helmut Wienert** Aug. 2002  
Die argentinische Währungskrise
107. **Roland Wahl (Hrsg.)** Sept. 2002  
Technik-Forum 2001: Weiterentwicklungen an Umformwerkzeugen und Walzdrähten. Mit Beiträgen von Roland Wahl, Thomas Dolny u.a., Heiko Pinkawa, Rainer Menge und Helmut Wienert
108. **Thomas Gulden** April 2003  
Risikoberichterstattung in den Geschäftsberichten der deutschen Automobilindustrie
109. **Günter Altner** Mai 2003  
Lasset uns Menschen machen – Der biotechnische Fortschritt zwischen Manipulation und Therapie. Vortrag gehalten im Rahmen des Studium Generale der Hochschule Pforzheim, Sommersemester 2003
110. **Norbert Jost (Hrsg.)** Juni 2003  
Technik-Forum 2002: Innovative Verfahren zur Materialoptimierung. Mit Beiträgen von Norbert Jost, Sascha Kunz, Rainer Menge/Ursula Christian und Berthold Leibinger
111. **Christoph Wüterich** Februar 2004  
Professionalisierung und Doping im Sport. Vortrag gehalten im Rahmen des Studium Generale der Hochschule Pforzheim, Sommersemester 2003
112. **Sabine Schmidt** Mai 2004  
Korruption in Unternehmen – Typologie und Prävention
113. **Helmut Wienert** August 2004  
Lohn, Zins, Preise und Beschäftigung – Eine empirische Analyse gesamtwirtschaftlicher Zusammenhänge in Deutschland
114. **Roland Wahl (Hrsg.)** Sept. 2004  
Technik-Forum 2003: Materialentwicklung für die Kaltumformtechnik. Mit Beiträgen von Andreas Baum, Ursula Christian, Steffen Nowotny, Norbert Jost, Rainer Menge und Hans-Eberhard Koch
115. **Dirk Wenzel** Nov. 2004  
The European Legislation on the New Media: An Appropriate Framework for the Information Economy?

## Verzeichnis der bisher erschienenen Beiträge

---

116. **Frank Morelli, Alexander Mekyska, Stefan Mühlberger** Dez. 2004  
Produkt- und prozessorientiertes Controlling als Instrument eines erfolgreichen Informationstechnologie-Managements
117. **Stephan Thesmann, Martin Frick, Dominik Konrad** Dez. 2004  
E-Learning an der Hochschule Pforzheim
118. **Norbert Jost (Hrsg.)** Juni 2005  
Technik-Forum 2004: Innovative Werkstoffaspekte und Laserbehandlungstechnologien für Werkzeuge der Umformtechnik
119. **Rainer Gildeggen** Juni 2005  
Internationale Produkthaftung
120. **Helmut Wienert** Oktober 2005  
Qualifikationsspezifische Einkommensunterschiede in Deutschland unter besonderer Berücksichtigung von Universitäts- und Fachhochschulabsolventen
121. **Andreas Beisswenger, Bernd Noll** Nov. 2005  
Ethik in der Unternehmensberatung – ein verminntes Gelände?
122. **Helmut Wienert** Juli 2006  
Wie lohnend ist Lernen? Ertragsraten und Kapitalendwerte von unterschiedlichen Bildungswegen
123. **Roland Wahl (Hrsg.)** Sept. 2006  
Technik-Forum 2005: Umformwerkzeuge - Anforderungen und neue Anwendungen. Mit Beiträgen von Edmund Böhm, Eckhard Meiners, Andreas Baum, Ursula Christian und Jörg Menno Harms
124. **Mario Schmidt** Dez. 2006  
Der Einsatz von Sankey-Diagrammen im Stoffstrommanagement
125. **Norbert Jost (Hrsg.)** Okt. 2007  
Technik-Forum 2006: Innovative neue Techniken für Werkzeuge der Kaltverformung. Mit Beiträgen von Franz Wendl, Horst Bürkle, Rainer Menge, Michael Schiller, Andreas Baum, Ursula Christian, Manfred Moik und Erwin Staudt.
126. **Roland Wahl (Hrsg.)** Okt. 2008  
Technik-Forum 2007: Fortschrittsberichte und Umfeldbetrachtungen zur Entwicklung verschleißreduzierter Umformwerkzeuge. Mit Beiträgen von Klaus Löffler, Andreas Zilly, Andreas Baum und Paul Kirchhoff.
127. **Julia Tokai, Christa Wehner** Okt. 2008  
Konzept und Resultate einer Online-Befragung von Marketing-Professoren an deutschen Fachhochschulen zum Bologna-Prozess
128. **Thomas Cleff, Lisa Luppold, Gabriele Naderer, Jürgen Volkert** Dez. 2008  
Tätermotivation in der Wirtschaftskriminalität
129. **Frank Thuselt** Juni 2009  
Das Arbeiten mit Numerik-Programmen. MATLAB, Scilab und Octave in der Anwendung.
130. **Helmut Wienert** August 2009  
Wachstumsmotor Industrie? Zur Bedeutung des Verarbeitenden Gewerbes für die Entwicklung des Bruttoinlandsprodukts
131. **Sebastian Schulz** Sept. 2009  
Nutzung thermodynamischer Datensätze zur Simulation von Werkstoffgefügen (aus der Reihe „Focus Werkstoffe“, Hrsg. Norbert Jost).