

Forschungsbericht 2012

FAKULTÄT FÜR VERFAHRENS- UND SYSTEMTECHNIK

Universitätsplatz 2, Gebäude 10, 39106 Magdeburg
Tel. +49 (0)391 67 18443, Fax +49 (0)391 67 11190

1. Leitung

Prof. Dr.-Ing. habil. Jürgen Tomas/ Prof. Dr. rer. nat. habil. Helmut Weiß (Dekan)
Prof. Dr.-Ing. habil. Dominique Thévenin (Prodekan)
Prof. Dr.-Ing. Eckehard Specht (Studiendekan)

2. Institute

Institut für Strömungstechnik und Thermodynamik
Institut für Verfahrenstechnik
Institut für Apparate- und Umwelttechnik
Institut für Chemie

3. Forschungsprofil

Partikeltechnologie und Partikelsysteme - insbesondere Herstellung, Funktionalisierung, Charakterisierung und Handhabung von partikulären Produkten, z.B. Pulver und Granulate Chemische Produktgestaltung und analytische Produktcharakterisierung - z.B. Synthese von Natur- und Wirkstoffen; metallorganische Verbindungen für Halbleiter-, Sensor- und Katalysetechnik Innovative Stoff- und Energiewandlungsprozesse - z.B. Membranreaktoren, Brennstoffzellensysteme, chromatographische Reaktoren, Synthese von Antikörpern Dynamik verfahrenstechnischer Systeme - z.B. Dynamik von Bioprozessen, Simulation und Regelung von Prozessen, Mehrphasenströmungen und reaktive Strömungen Wahrscheinlichkeitsmethoden bei Ingenieurberechnungen - z.B. probabilistische Sicherheitsanalyse, Unsicherheiten, Brand- und Explosionsschutz

4. Veröffentlichungen

Dissertationen

Atanga, Gordon Fru; Thévenin, Dominique [Gutachter]

Direct numerical simulation of turbulent flames on parallel computers. - Magdeburg, Univ., Fak. für Verfahrens- und Systemtechnik, Diss., 2012; XXI, 166 S.: graph. Darst.; 2012

Bernhardt, Alexander; Hauptmanns, Ulrich [Gutachter]; Dassow, Jürgen [Gutachter]

Graphentheoretische Modellierung von Entfluchtungsvorgängen unter Berücksichtigung des Zusammenwirkens baulicher Gegebenheiten, Personeneigenschaften und Entscheidungsverhalten. - Zugl.: Magdeburg, Univ., Fak. für Verfahrens- und Systemtechnik, Diss., 2012; Berlin: Pro Business; XVIII, 123 S.: graph. Darst., ISBN 978-3-86386-961-8; 2012

Bock, Andreas; Reichl, Udo [Gutachter]

Überwachung und Regelung von Hochzelldichtekultivierungen in der Influenza-Impfstoffproduktion. - Zugl.: Magdeburg, Univ., Fak. für Verfahrens- und Systemtechnik, Diss., 2012; Aachen: Shaker; XI, 175 S.: Ill., graph. Darst.; 210 mm x 148 mm, 300 g - (Forschungsberichte aus dem Max-Planck-Institut für Dynamik komplexer technischer Systeme; 33), ISBN 978-3-8440-1040-4; 2012

Breuninger, Tobias; Schmidt, Jürgen [Gutachter]

Untersuchung der Spraycharakteristik von Piezo-Injektoren in Bezug auf das Entflammungsverhalten beim strahlgeführten Brennverfahren. - Magdeburg, Univ., Fak. für Verfahrens- und Systemtechnik, Diss., 2012; X, 177 S.: graph. Darst.; 2012

Do, Duc Hai; Specht, Eckehard [Gutachter]

Simulation of lime calcination in normal shaft an parallel flow regenerative kilns. - Magdeburg, Univ., Fak. für Verfahrens- und Systemtechnik, Diss., 2012; IX, 117 S.: graph. Darst.; 2012

Ivanov, Ivan; Schinzer, Dieter [Gutachter]; Sundmacher, Kai [Gutachter]

Development of a glucose-oxygen enzymatic fuel cell. - Magdeburg, Univ., Fak. für Verfahrens- und Systemtechnik, Diss., 2012; IX, 118 S.: graph. Darst.; 2012

Kaemmerer, Henning; Seidel-Morgenstern, Andreas [Gutachter]

New concepts for enantioselective crystallisation. - Zugl.: Magdeburg, Univ., Fak. für Verfahrens- und Systemtechnik, Diss., 2011; Aachen: Shaker, 2012; XIII, 202 S.: graph. Darst.; 21 cm, 327 g - (Forschungsberichte aus dem Max-Planck-Institut für Dynamik Komplexer Technischer Systeme; 32), ISBN 978-3-8440-0804-3; 2012

Petruševska-Seebach, Katerina; Seidel-Morgenstern, Andreas [Gutachter]

Overcoming yield limitations when resolving racemates by combination of crystallization and/or chromatography with racemization. - Zugl.: Magdeburg, Univ., Fak. für Verfahrens- und Systemtechnik., Diss., 2012; Barleben: docupoint Verl.; [24], 131 S.: graph. Darst.; 21 cm, ISBN 978-3-86912-070-6; 2012

Seebach, Axel; Seidel-Morgenstern, Andreas [Gutachter]; Scheffler, Franziska [Gutachter]

Enantiomerentrennung mit molekular geprägten, monolithischen Polymerphasen. - Zugl.: Magdeburg, Univ., Fak. für Verfahrens- und Systemtechnik, Diss., 2011; Barleben: docupoint Verl., 2012; XII, 183 S.: graph. Darst.; 21 cm, ISBN 978-3-86912-069-0; 2012

Sistla, Venkata Subbarayudu; Seidel-Morgenstern, Andreas [Gutachter]

Formation and crystallization based separation of diastereomeric salts. - Magdeburg, Univ., Fak. für Verfahrens- und Systemtechnik, Diss., 2012; XVIII, 133 S.: graph. Darst.; 2012

Steyer, Christiane; Sundmacher, Kai [Gutachter]; Tomas, Jürgen [Gutachter]; Mangold, Michael [Gutachter]

Precipitation of barium sulfate in a semi-batch stirred tank reactor - influence of feeding policy on particle size and morphology. - Magdeburg, Univ., Fak. für Verfahrens- und Systemtechnik, Diss., 2012; X, 172 S.: graph. Darst.; 2012

INSTITUT FÜR STRÖMUNGSTECHNIK UND THERMODYNAMIK

Universitätsplatz 2, 39106 Magdeburg
Tel. +49 (0)391 67 18654, Fax +49 (0)391 67 12840
thevenin@ovgu.de

1. Leitung

Prof. Dr.-Ing. D. Thévenin (geschäftsführender Leiter)
Prof. Dr.-Ing. J. Schmidt
Prof. Dr.-Ing. E. Specht

2. Hochschullehrer

Prof. Dr.-Ing. J. Schmidt (Lehrstuhl für Technische Thermodynamik)
Prof. Dr.-Ing. E. Specht (Lehrstuhl für Thermodynamik und Verbrennung)
Prof. Dr.-Ing. D. Thévenin (Lehrstuhl für Strömungsmechanik und Strömungstechnik)
Prof. Dr.-Ing. B. Futterer (Dorothea-Erxleben-Professur)
Prof. Dr.-Ing. Dr. h.c. (i. R.) H. J. Kecke

3. Forschungsprofil

Lehrstuhl Technische Thermodynamik (Prof. Dr.-Ing. J. Schmidt).

- Simulation von Wärme- und Stofftransportprozessen: Einlaufströmungen und Mikrokanäle; Lösung inverser Probleme und Mikro-Makro-Wechselwirkungen bei der Sprühkühlung; Wärmetransportprozesse im Verbrennungsmotor.
- Ein- und zweiphasiger Wärmeübergang unter Mikrosystembedingungen: Experimentelle Untersuchung des Wärmeübergangs in Kapillarrohren und Mikrokanalverdampfern bei ebener und Ringspalt-Geometrie; Betriebscharakteristik von Kompaktverdampfern und Dimensionierung.
- Wärmeübergang und Strahl-Wand-Wechselwirkungen bei Sprühprozessen: Messung des Wärmeübergangs mittel Infrarotthermografie und Korrelation mit den charakteristischen Sprühstrahlparametern; Mikromodell auf Basis von Einzeltropfen; PDA-Messungen zur Sprühstrahlcharakterisierung.
- Automotive: thermische Motorsimulation und Energiemanagement; Spraycharakterisierung und Gemischbildung bei der motorischen Verbrennung, Einsatz optischer Messmethoden (PDA, PIV, LIF/LIEF).
- Energieeffizienter Einsatz von Gasmotorwärmepumpen: Versuchsanlagen zur Klimatisierung sowie zur Kälte-Wärme-Kopplung.
- Infrarotthermografie, Phasen-Doppler-Anemometrie und Thermoanalyse: Anwendung und Weiterentwicklung von Methoden zur Bestimmung von Wärmeübergangskoeffizienten, von Tropfengrößen- und Geschwindigkeitsverteilungen, sowie der thermischen Stoffwerte.

Lehrstuhl Thermodynamik und Verbrennung (Prof. Dr.-Ing. E. Specht)

- Industrieofenprozesse: Wärmeübergangsbedingungen in Rollenöfen, Wärmeübergangsmessungen in einem Versuchsdrehrohrofen, Simulation des Kalkbrennens in Schachtöfen, Simulation von Prozessen in Drehrohrofen.
- Berechnung von Flammen. Optimierung von Brennern und Luftzuführung für Ausbrand, Flammenlänge, Vermischung und Vergleichmäßigung.

- Simulation des Abkühlvorganges bei der Härtung von Metallen. Modellierung der Plastizität, Berechnung von Gefüge, Wärmespannungen und Verzug, Ermittlung einer Strategie zur verzugsfreien Abkühlung.

Lehrstuhl für Strömungsmechanik und Strömungstechnik (Prof. Dr.-Ing. D. Thévenin)

- Zweiphasenströmungen: experimentelle und numerische Untersuchung von partikel- und blasenbeladenen Strömungen, sowie von tropfenbeladenen Strömungen im Zweiphasenwindkanal (Anwendungen für Meteorologie, Automobilindustrie); Einsatz verschiedener optischer Messmethoden (LDV, PDA, PTV, PIV-LIF, Shadowgraphy, 3D-Videotechnik).
- Strömungen mit chemischen Reaktionen: Charakterisierung des Mischungsverhaltens in Mischern mit chemischen Reaktionen; Untersuchung der Flammen/Wirbel- und der Flammen/Akustik-Wechselwirkung; Eigenschaften von turbulenten Flammen in Brenner- und Motorensystemen; Vorhersage der Schadstoffemissionen in Brennern; plasma-gestützte Verbrennung.
- Strömungsmaschinen: Untersuchung der Strömung und der Instabilitäten in Laufrädern und Gehäusen, insbesondere im off-design-Betrieb; Betriebsverhalten und Wirkungsgrad von Pumpen, auch bei Förderung von Flüssigkeit-Gas-Gemischen; Berechnung und Optimierung unkonventioneller Systeme (Savonius- und Darrieus-Turbinen, Tesla-Turbinen und -Pumpen...); Validierung von Strömungsberechnungsverfahren.
- Biomedizinische und bioverfahrenstechnische Strömungen (z.B. Hämodynamik zerebraler Aneurysmen, Wave-Bioreaktoren).
- Eigenschaften von Flüssigkeiten: Rheologie, Widerstandsverminderungsprozesse in Suspensionen, hydraulischer Transport.
- Entwicklung numerischer Methoden und Computerprogramme für die Simulation laminarer und turbulenter 3D-Strömungen, evtl. mit Berücksichtigung chemischer Reaktionen; Kopplung mit einer Optimierungsschleife.
- Anwendung und Weiterentwicklung optischer Messmethoden: PIV; LIF und Two-Tracer LIF; LDA/PDA; Rayleigh; Shadowgraphy; Dreifarben Particle Tracking Velocimetry; quantitative Spezies-Messungen in reaktiven Strömungen; simultane quantitative Messungen (z.B. PIV-LIF, Zweiphasen-PIV).

4. Serviceangebot

Wir bieten unter anderen:

- Experimentelle Bestimmung und numerische Berechnung von Um- und Durchströmungsfeldern in ruhenden und rotierenden Systemen, bei Ein- und Zweiphasenströmungen
- 3D-Simulation des Strömungs-, Konzentrations- und Temperaturfeldes mit CFD-Programmsystemen
- Druckverlust- bzw. Durchflußbestimmung, Kennwertermittlung für Durchströmungselemente
- Rheologische Untersuchungen, Fließverhaltensbestimmung von Flüssigkeiten, Suspensionen und nicht Newtonschen Fluiden
- Numerische Strömungs- und Temperaturfeldberechnungen, Analyse und Bewertung von Wärmetransportvorgängen
- Infrarotthermografische Untersuchungen mit hoher örtlicher und zeitlicher Auflösung
- Untersuchung von Intensivkühlprozessen und Kühlstreckenauslegung
- Messung der Betriebscharakteristik von Klein- und Mikro-Wärmeübertragern bei ein- und zweiphasigem Betrieb
- Durchführung von Thermoanalysen (simultane thermogravimetrische und kalorische Messungen, TG, DTA, DSC, LFA) bis 1600 °C
- Messung von Geschwindigkeitsverteilungen sowie Partikelgrößen- und -dichteverteilungen (2 Komponenten LDA und PDA, Shadowgraphy)
- Messungen mit autonomen Sonden in Industrieanlagen
- Düsenuntersuchungen (Sprühstrahlcharakteristiken und Wärmeübergang, insbesondere an hoch erhitzten Oberflächen) sowie Ermittlung von Sprühstrahl-Wand-Wechselwirkungen
- Spraycharakterisierung bei der motorischen Verbrennung mit optischen Messtechniken (PDA, PIV, LIF/LIEF)

- Berechnung der Spannungen, der Gefügezusammensetzung und der Formänderung bei der Kühlung von Metallen
- Numerische und experimentelle Prozesssimulation in Schacht-, Drehrohr- und Rollenöfen

5. Methoden und Ausrüstung

Am Institut stehen hochqualitative Messmethoden und numerische Simulationsprogramme zur Verfügung.

6. Kooperationen

- Dr. Alain Laverdant, ONERA (Frankreich)
- Fraunhofer-Institut für Fabrikbetrieb und -automatisierung IFF, Magdeburg
- Prof. Andreas Seidel-Morgenstern, MPI Magdeburg
- Prof. Bernd Michaelis, Lehrstuhl Technische Informatik, Otto-von-Guericke-Universität
- Prof. Bernhard Preim, Inst. für Simulation und Grafik, FIN
- Prof. Dr.-Ing. Helmut Tschöke, FMB-IMS
- Prof. Georg Rose, Lehrstuhl für Medizinische Telematik und Medizintechnik, FEIT
- Prof. Gunther Brenner, T.U. Clausthal
- Prof. J. P. Martin, ICARE, Univ. d'Orleans (Frankreich)
- Prof. Jens Strackeljan, IFME
- Prof. Kai Sundmacher, MPI Magdeburg
- Prof. Klaus Tönnies, Inst. für Simulation und Grafik, FIN
- Prof. Martin Skalej, Zentrum für Radiologie, FME
- Prof. R. Radespiel, T.U. Braunschweig
- Prof. Szabo Szilard, Technical University of Miskolc (Ungarn)
- Prof. Udo Reichl, MPI Magdeburg
- Prof. Ulrich Maas (KIT, Technische Thermodynamik)
- Prof. Uwe Riedel, Univ. Stuttgart & DLR
- Prof. Volker John, Freie Universität Berlin
- Volkswagen AG Wolfsburg

7. Forschungsprojekte

Projektleiter: Prof. Dr.-Ing. Dominique Thévenin

Kooperationen: Prof. Georg Rose, Lehrstuhl für Medizinische Telematik und Medizintechnik, FEIT; Prof. Klaus Tönnies, Inst. für Simulation und Grafik, FIN

Förderer: Industrie; 01.08.2012 - 30.10.2014

Blutflussquantifizierung

Thema dieses Projekts ist die Quantifizierung von Blutfluss in Gefäßen auf Grundlage angiographischer Bilddaten. Aus klinischer Sicht kann das beispielsweise bei der Behandlung von Stenosen oder Aneurysmen eine wichtige Rolle spielen. Hierbei sollen sowohl 2D DSA Serien (bei fixer Angulation des C-Bogens) als auch 3D Datensätze basierend auf geeigneten Rotationsangiographien verwendet werden. Zugrundeliegende Algorithmen zur Flusserschätzung sollen zunächst unter Verwendung von Phantomen, Patientendaten (offline, retrospektive Analyse) und Flussmessgeräten validiert werden. Es erfolgt außerdem eine Validierung der bildbasierten Ergebnisse unter Verwendung von Flusskathetern, Doppler-Ultraschallmessungen und Particle Tracking Velocimetry (PTV).

Projektleiter: Prof. Dr.-Ing. Dominique Thévenin

Förderer: Industrie; 01.04.2012 - 15.07.2012

Charakterisierung der Makromischung in einem statischen Mischer

Vorrangiges Ziel dieses Forschungsprojektes ist es, einen industriellen statischen Mischer für verschiedene Strömungsbedingungen (Reynolds-Zahlen) im turbulenten Bereich auf seine Mischgüte hin zu untersuchen. Hierbei kommt das beim Auftragnehmer entwickelte Verfahren der Untersuchung des Makromischverhaltens mittels Tracerfarbstoffen zum Einsatz.

Projektleiter: Prof. Dr.-Ing. Dominique Thévenin
Projektbearbeiter: Dr. R. Bordas, Dr. B. Wunderlich, Dr. K. Zähringer, Dr. G. Janiga
Kooperationen: Prof. Szabo Szilard, Technical University of Miskolc (Ungarn)
Förderer: DAAD; 01.01.2011 - 31.12.2012

Development of measurement technique for simultaneous determination of 2D velocity and temperature fields

Die experimentelle Untersuchung und das numerische Modellieren des konvektiven Wärmetransports in komplexen Strömungen stellen die grundlegende Zielsetzung des Projekts dar. Bei mit Wärmeübertragung verbundenen Aufgaben ist eine äußere Einflussnahme durch Regelung oder Steuerung in Abhängigkeit von der Temperatur sehr oft erforderlich. Die Simulation von solchen Prozessen verlangt wegen der zeitlich veränderlichen Randbedingungen, die sehr oft keinen deterministischen Charakter haben, eine spezielle Handhabung. Methoden zur berührungslosen Messung von Konzentrationen und Temperaturen dienen in der Strömungstechnik zur Erforschung, Auslegung und Optimierung von Anlagen, in denen Mischungsprozesse oder chemische Reaktionen stattfinden. Im Rahmen dieses Forschungsvorhabens werden die Möglichkeiten und Grenzen eines neuen Verfahrens dieser Art untersucht. Es handelt sich hierbei um die sogenannte Background-Oriented-Schlieren (BOS) Technik, die die Abhängigkeit des Brechungsindex von der Temperatur und Zusammensetzung des Gemisches ausnutzt. BOS wird mit Particle Image Velocimetry (PIV) kombiniert, um gleichzeitig das Geschwindigkeitsfeld zu erhalten.

Projektleiter: Prof. Dr.-Ing. Dominique Thévenin
Projektbearbeiter: Dr.-Ing. Bernd Wunderlich
Förderer: BMWi/AIF; 01.12.2011 - 31.01.2014

Entwicklung einer neuen Pumpen-Zentrifuge zur Trennung von flüssigen Stoffgemengen auf Basis einer Kreiselpumpe mit Pitot-Rohren

Ziel des Projektes ist es, eine neue Technologie zur Trennung von Flüssigkeitsgemischen zu entwickeln. Ausgehend von einer Kreiselpumpe mit Pitot-Rohr wird ein neuartiges Verfahren entwickelt, das die Trennung von Flüssigkeitsgemischen wie z.B. Öl/Wasser, mit einer wesentlich höheren Reinheit der getrennten Stoffe, einer höheren Leistungsfähigkeit, und zu geringeren Kosten, im Vergleich mit bisher angewendeten Verfahren bzw. Technologien, ermöglicht. Darüber hinaus sollen die Prozessparameter an die Gemischzusammensetzung angepasst werden können. Dieses Projekt wird auf Basis von Computersimulation/CFD durchgeführt und mit experimentellen Messungen am Prototyp validiert.

Projektleiter: Prof. Dr.-Ing. Dominique Thévenin
Projektbearbeiter: Dr.-Ing. Gordon Fru
Kooperationen: Prof. Ulrich Maas (KIT, Technische Thermodynamik)
Förderer: DFG; 01.08.2010 - 31.07.2013

Ermittlung der Zündwahrscheinlichkeit in turbulenten Strömungen anhand Direkter Numerischer Simulation

Die Bedingungen, die zu einer erfolgreichen Selbstzündung führen, wurden in der Vergangenheit vorwiegend experimentell oder mit stark vereinfachten Modellen ermittelt. Eine quantitative numerische Vorhersage erfordert eine sehr gute Beschreibung der turbulenten Strömungseigenschaften zusammen mit entsprechenden chemischen, diffusiven und thermodynamischen Modellen. Dies führt zu extrem hohen Rechenzeiten, so dass dieser Lösungsweg bis jetzt für eine praktische Verwendung zur sicherheitstechnischen Beurteilung unpraktikabel bleibt. Es ist deswegen erforderlich, entsprechende Untersuchungen weiterzuführen, insbesondere mit dem Ziel, validierte, reduzierte Modelle zu entwickeln. Dies wird in dem vorliegenden Projekt auf Basis direkter numerischer Simulationen mit einer exakten Beschreibung aller physikalisch-chemischen Eigenschaften erfolgen.

Projektleiter: Prof. Dr.-Ing. Dominique Thévenin
Projektbearbeiter: Dipl.-Ing. Andreas Lehwald, Dr.-Ing. Bernd Wunderlich
Kooperationen: Prof. Gunther Brenner, T.U. Clausthal; Prof. Jens Strackeljan, IFME

Förderer: BMWi/AIF; 01.03.2010 - 31.03.2013

Experimentelle Untersuchung von dynamischen Lasten in Industrieventilatoren

In zahlreichen Industriebereichen werden heute Ventilatoren unterschiedlicher Leistungsklassen eingesetzt. Als Beispiele seien die Luft- und Klimatechnik, Trocknungstechnik und Verfahrenstechnik genannt. Diese Maschinen sind in der Regel Bestandteile komplexer Anlagen. Daher kommt neben der Erfüllung einer vorgegebenen Leistungscharakteristik (Volumenstrom, Druckerhöhung, Effizienz, usw.) der Lebensdauer und Zuverlässigkeit des Ventilators eine große Bedeutung zu. In diesem Zusammenhang spielen dynamische Belastungen für das Versagen eine große Rolle. Aufgrund der Komplexität dieser Vorgänge sind diese aber in der Vorhersage mit erheblichen Unsicherheiten behaftet. Mögliche Ursachen für Beeinträchtigungen des Betriebs von Ventilatoren sind Rotorschwingungen durch aerodynamische Lasten. Fluktuierende Strömungszustände oder Strömungsinstabilitäten können die Maschine zu Schwingungen anregen, welche im Resonanzfall zum Ausfall der Maschine führen können. Die Mechanismen, die zu diesen fluktuierenden Lasten führen, sind im Ansatz bekannt. Allerdings besteht erheblicher Klärungsbedarf, um diese Mechanismen im Designprozess berücksichtigen zu können. Vor diesem Hintergrund zielt dieses Projekt darauf ab, moderne methodische Entwicklungen im Bereich der numerischen Simulation und der Messtechnik einzusetzen, um den sicheren Betriebsbereich der Ventilatoren besser abgrenzen zu können, und damit deren technische und wirtschaftliche Sicherheit zu erhöhen.

Projektleiter: Prof. Dr.-Ing. Dominique Thévenin

Projektbearbeiter: M.Sc. Nils Lichtenberg

Förderer: Industrie; 01.08.2011 - 31.07.2013

Mathematische Modellierung und experimentelle Untersuchung der Strömung in einem Gießcaster

Zur energieeffizienten Herstellung von Stahl soll ein Gießverfahren optimiert werden. Hierbei wird die Schmelze aus der Pfanne direkt der Gießmaschine zugeführt. Die Zuführung soll strömungstechnisch optimiert werden. Hierbei sollen möglichst wenig Gase und Feuerfestmaterial eingeblasen werden. Die Strömung soll folglich eine geringe Turbulenz aufweisen.

Projektleiter: Prof. Dr.-Ing. Dominique Thévenin

Projektbearbeiter: Dr.-Ing. R. Bordás, Dr.-Ing. B. Wunderlich

Förderer: Industrie; 01.04.2012 - 31.03.2013

Reduzierung der Gasbelastung in Schlickermassen

Zentrales Anliegen ist hier die Entwicklung einer Apparatur, mit der vor Ort in einem Betrieb an verschiedenen Stellen der Anlage die real vorliegende Gasbelastung im Schlicker akkurat und statistisch sinnvoll vermessen werden kann. Für die Messungen wären keinerlei gesonderte Messstellen anzubringen, es muss nur die Möglichkeit einer Probenentnahme bestehen.

Projektleiter: Prof. Dr.-Ing. Dominique Thévenin

Projektbearbeiter: Dr.-Ing. R. Bordas

Kooperationen: Prof. Volker John, Freie Universität Berlin

Förderer: DFG; 01.10.2008 - 30.09.2013

Referenzexperimente im mehrphasigen Windkanal, numerische Simulationen und Validierung

Dieses Vorhaben verfolgt das zentrale Ziel, eine ausführliche Datenbank anhand berührungsloser experimenteller Messungen in einer zweiphasigen Luft/Wasser-Strömung im Windkanal zu erstellen. Diese soll vorwiegend der Validierung numerischer Simulationen dienen. In den Experimenten werden sowohl die Geschwindigkeiten der anwesenden Phasen wie auch die Eigenschaften der dispersen Phase quantitativ und so weit wie möglich simultan vermessen. Die Ergebnisse dieser Referenzexperimente werden allen Teilnehmern des Schwerpunktprogramms zur Verfügung gestellt. Insbesondere werden auch innerhalb dieses Teilprojektes entsprechende numerische Simulationen durchgeführt, so dass eine direkte gegenseitige Validierung der Messergebnisse und der numerischen Ergebnisse erfolgt. Die entsprechenden numerischen Simulationen basieren auf eigenen Entwicklungen, die sowohl VMS- als auch LES-Ansätze (MooNMD, AG John) wie auch bei Bedarf DNS-Ansätze (AG Thévenin) für die kontinuierliche Phase verwenden. Für die Beschreibung der nicht-kontinuierlichen Phasen werden hauptsächlich populationsdynamische Modelle verwendet, die in beiden Arbeitsgruppen bereits eine zentrale Rolle spielen. Dieses Projekt liefert Modellinformationen, die für das Verständnis der Regenbildung in turbulenten Wolkenströmungen hilfreich sein sollen.

Projektleiter: Prof. Dr.-Ing. Dominique Thévenin

Projektbearbeiter: M.Sc. Nils Lichtenberg

Förderer: Industrie; 01.08.2011 - 31.07.2013

Strömungstechnische Optimierung eines Verteilers für Stahlschmelze

Für eine effiziente und kostengünstige Herstellung von hochwertigen Stahlprodukten sollen kleine Mengen zusätzlicher Komponenten in die Schmelze homogen eingebracht werden. Daraus resultieren mindestens zwei Schwierigkeiten:- die zugeführten Komponenten müssen binnen weniger Sekunden in der Schmelze homogen verteilt werden;- für den Eintrag in die Schmelze ist ein spezielles Verfahren hierfür zu entwickeln, das bei hohen Umgebungstemperaturen betrieben werden kann.

Projektleiter: Prof. Dr.-Ing. Dominique Thévenin

Projektbearbeiter: M.Sc. Kiryl Pliavaka, Dr.-Ing. Katharina Zähringer

Kooperationen: Prof. Uwe Riedel, Univ. Stuttgart & DLR

Förderer: DFG; 01.07.2011 - 30.06.2013

Verbrennung erneuerbarer Brennstoffe unter Zuhilfenahme nicht-thermischer Plasmas

Die Plasma-unterstützte Verbrennung wurde in letzter Zeit zu einem wichtigen Forschungsgebiet. In den meisten Fällen führen die verwendeten Plasmas zu einem starken Temperaturanstieg und werden dazu verwendet, die Zündung zu erleichtern. Nicht-thermische Plasmas erscheinen hingegen prinzipiell interessanter für die Verbrennungsunterstützung, da sie direkt, auf molekularem Niveau die Reaktionsprozesse beeinflussen und sehr wenig Energie benötigen. Dies ist insbesondere der Fall, wenn die Plasmas verwendet werden, um angeregte Spezies innerhalb des Reaktionsgemisches zu produzieren. Die Bedeutung nicht-thermischer Plasmas für Verbrennungsanwendungen wurde bereits in Projekten gezeigt, die hauptsächlich Wasserstoff- oder Methanflammen verwendeten. Drei Hauptprobleme bleiben jedoch bisher ungelöst: 1) die Anregung der reagierenden Spezies durch elektronische Stöße funktioniert gut bei Unterdruck, aber wird, mit den vorhandenen Plasmageneratoren, nicht bei erhöhtem Druck oder sogar Atmosphärendruck erreicht; 2) der Vorteil der mit nicht-thermischen Plasmas unterstützten Verbrennung zur Vergrößerung des Brennbarkeitsbereiches und zur Verringerung von Abgasemissionen muß noch für technisch relevantere Brennstoffe, und insbesondere erneuerbare Brennstoffe, gezeigt werden; 3) die Wechselwirkung zwischen dem nicht-thermischen Plasma und reaktiven Strömungen ist bisher noch nicht vollständig untersucht, was weitere Modellierungsarbeiten benötigt.

Projektleiter: Prof. Dr.-Ing. Eckehard Specht

Förderer: DFG; 01.12.2009 - 31.12.2013

Simulation of Direct Chill Casting of Metals

Für den Erstarrungsprozess beim Strangguss von NE-Metallen werden die Temperatur-, Gefüge-, Spannungs- und Verzugsfelder simuliert. Der Einfluss der örtlichen Kühlbedingungen beim Aufspritzen von Wasser und beim Übergießen mit Wasserstrahlen aus der Kokille wird untersucht. Daraus werden optimale Kühlstrategien entwickelt.

Projektleiter: Prof. Dr.-Ing. Eckehard Specht

Förderer: DFG; 01.06.2011 - 31.12.2014

Simulation of Tunnel Kiln Processes for bricks

Die Temperaturprofile und Strömungsprofile in Tunnelöfen zum Brennen von Ziegeln werden berechnet. Der Einfluss des Wärmeübergangs auf den fossilen Energieverbrauch wird untersucht. Es wird gezeigt, wie sich mit einer Gasumwälzung im Querschnitt mit Heißgasventilatoren der Energieverbrauch reduzieren lässt.

Projektleiter: Prof. Dr. Jürgen Schmidt

Projektbearbeiter: Dipl.-Ing. Tobias Breuninger

Kooperationen: Prof. Dr.-Ing. Helmut Tschöke, FMB-IMS

Förderer: DFG; 01.07.2009 - 31.03.2012

Analyse des Entflammungsverhaltens bei Ladungsschichtung für strahlgeführte Brennverfahren mit Multifunkenzündung

Ottomotoren mit Direkteinspritzung und vorwiegend strahlgeführtem Verbrennungsverfahren besitzen gegenwärtig das größte Potenzial zur Kraftstoffeinsparung und Minimierung der Schadstoffemission. Herausforderungen bei der Entwicklung derartiger innovativer Motoren sind die Optimierung der Gemischaufbereitung und insbesondere die sichere Entflammung des Gemisches bei unterschiedlichen Drehzahlen und Lasten. In Voruntersuchungen konnten

bereits wesentliche Größen, die das Entflammungsverhalten beeinflussen, u. a. der Flüssigkeitsanteil in der Umgebung des Funkenplasmas, identifiziert, und mit der Entflammungsaussetzerrate korreliert werden. Die Ergebnisse der Messungen an einem Versuchsmotor ließen sich quantitativ durch eine neu eingeführte Entflammungskennzahl beschreiben, die es jetzt in interdisziplinärer Zusammenarbeit zu erweitern gilt. Ausgehend von einer Modellierung des Energieeintrages und der relevanten Transportvorgänge im Kontrollvolumen (KV) um die Zündelektroden sowie einer Parameteranalyse sollen zusätzliche Einflussgrößen herausgearbeitet werden. Insbesondere gilt es die Wirkung des Flüssigkeitsanteils im KV, der sich in bisherigen Untersuchungen als sehr wesentlich erwiesen hat, weiter zu präzisieren. Dabei ist von einem Einfluss des Verhältnisses von Tropfenoberfläche zu Tropfenvolumen auszugehen.

Grundlage der experimentellen Untersuchungen bildet die Ermittlung der Entflammungsaussetzerrate im befeuerten Motor in Abhängigkeit der Betriebsparameter und der Zündbedingungen unter Verwendung nach außen öffnender Piezoinjektoren in zentraler Brennraumlage. Im Sinne der Grundlagenuntersuchung sollen die erzielten Ergebnisse mit den charakteristischen Gemischparametern zum Zündzeitpunkt korreliert werden. Da eine direkte Bestimmung dieser Parameter im Basismotor nicht möglich ist, sind PDA- und LIEF-Messungen in einem nicht befeuerten Transparentmotor und einer Druckkammer unter motornahen Randbedingungen geplant.

Im Ergebnis dieser Vorgehensweise sollen quantifizierbare Kriterien zur Bewertung der Entflammungssicherheit in Abhängigkeit der wesentlichen Gemischparameter aufgestellt werden. Damit werden eine Verallgemeinerung der Messergebnisse und eine physikalisch fundiertere Auslegung des strahlgeführten Brennverfahrens erreicht.

Projektleiter: Prof. Dr. Jürgen Schmidt

Projektbearbeiter: Dipl.-Ing. Stephan Baer

Kooperationen: Prof. Dr. rer. nat. habil. Lutz Tobiska, FMA-IAN; Prof. Dr.-Ing. Eckehard Specht, FVST-ISUT

Förderer: DFG; 01.04.2010 - 30.09.2014

Mikro-Makro-Wechselwirkungen von strukturierten Medien und Partikelsystemen (Graduiertenkolleg 1554, Teilprojekt: Wärmeübergang bei der Sprühkühlung)

Ein Themenbereich des Graduiertenkollegs befasst sich mit Festkörpern unter thermischer Beanspruchung. Bei stofflichen Veränderungen von Festkörpern sind die auf der Mikroebene stattfindenden Vorgänge in der Regel stark temperaturabhängig. Diese Vorgänge sind zudem mit Umwandlungsenthalpien verbunden. Zur gezielten Einstellung von stofflichen Eigenschaften müssen somit thermische Lasten erzeugt werden. Beispielsweise müssen Metalle von hohen Temperaturen definiert abgekühlt werden, um bestimmte Gefüge oder Härten zu erhalten. Hierfür benötigt man Kühlverfahren, mit denen gezielt lokale Wärmeübergangskoeffizienten eingestellt werden können. Besonders geeignet ist die Sprühkühlung, auf die sich die Arbeiten im Kolleg konzentrieren. Untersucht werden der Wärmeübergang und die Sprühstrahl-Wand-Wechselwirkungen auf der Mikro- und Makroebene im Bereich des Übergangs- und des stabilen Filmsiedens.

Projektleiter: Prof. Dr. Jürgen Schmidt

Projektbearbeiter: Dipl.-Wirtsch.-Ing. Patrick Varga

Förderer: BMWi/AIF; 01.04.2010 - 31.03.2012

Simulation des Wärmetransportes in Verbrennungsmotoren zur Reduzierung der Reibung und der CO₂-Emissionen unter Warmlaufbedingungen

Die endlichen Vorräte fossiler Energien erfordern einen effizienten Umgang mit ihnen. Dies zwingt auch zu einer weiteren Optimierung konventioneller Verbrennungsmotoren und zur Entwicklung neuer Antriebskonzepte mit dem Ziel, den Kraftstoffverbrauch zu senken und damit auch einen verminderten CO₂ Ausstoß. Dieses Ziel verfolgen die Motorenentwickler durch Verbesserung der Gemischbildung und Brennverfahren sowie der Reduzierung der Reibungsverluste und des Leistungsbedarfs der Nebenaggregate seit vielen Jahren erfolgreich. Hinzu kommen heute Downsizing - Auslegungen sowie Fahrzeugkonzepte, die einerseits den Verbrennungsmotor nach wie vor ausschließlich und unmittelbar für den Antrieb nutzen als auch indirekt zur Erzeugung elektrischer Energie für hybride Antriebe verwenden. Diese neuen Konzepte haben Veränderungen des Thermomanagements zur Folge, die sowohl Wärmeströme und Flussrichtungen im Fahrzeugmotor beeinflussen als auch Baugruppen wie die Kühlaggregate im Gesamtfahrzeug. Aber auch bei den weiterentwickelten Verbrennungsmotoren für den direkten Standardantrieb ergeben sich Verbrauchs Einsparpotenziale durch örtlich und zeitlich gezielt geführte Wärmeströme zu den Reibstellen des Motors, die besonders unter Warmlaufbedingungen von Bedeutung sind.

Das beantragte Forschungsvorhaben soll einen Beitrag zur Reibungsverminderung und damit zur Reduzierung des Kraftstoffverbrauches und der CO₂ Emission während des Warmlaufes nach einem Kaltstart, dem Warmlauf nach einem Warmstart und der Lastwechselphasen durch eine optimale Steuerung des Wärmeflusses zu verbrauchskritischen Lagerstellen des Motors liefern. Aus stationären Messungen ist z.B. bekannt, dass der Reibmitteldruck bei Erhöhung der Öltemperatur von 20 °C auf ca. 90 °C um etwa 50% reduziert werden kann. Nach Schwaderlapp bietet die Motorreibung ein hohes Verbrauchssenkungspotenzial von über 12%.

Um bereits in der Konstruktionsphase den zeitlich veränderlichen Wärmefluss abschätzen und gezielt beeinflussen zu können, wird ein geeignetes Simulationsmodell erstellt, das durch Messungen an einem 4-Zylinder Motor verifiziert wird und das sich durch eine gute Übertragbarkeit auszeichnet. Die diesbezügliche Methodenentwicklung ist wesentlicher Bestandteil des Projektes.

Projektleiter: Prof. Dr. Jürgen Schmidt

Projektbearbeiter: Dipl.-Ing. Jörg Sauerhering

Kooperationen: apl. Prof. Dr.-Ing. habil. Dr.-Ing. E. h. Rüdiger Bähr, FMB-IFQ; Prof. Dr. Michael Scheffler, FMB-IWF;
Prof. Dr.-Ing. habil. Dr. h. c. Ulrich Gabbert, FMB-IFME

Förderer: Industrie; 01.07.2011 - 30.06.2013

Thermische Optimierung eines integrierten Abgaskrümmers

Die Einführung integrierter Abgaskrümmers ist mit deutlichen Material- und Kosteneinsparungen verbunden, führt zur Reduzierung des Gewichtes und erlaubt eine kompaktere Bauweise. Nachteile sind die notwendige Vergrößerung der Leistung des Fahrzeugkühlers und die Sensibilität der Konstruktion auf mögliche Überschreitungen der zulässigen Grenzwerte für die meist verwendeten AlSi-Aluminiumlegierungen. Durch konstruktive Maßnahmen sollen die Temperaturspitzen im Bereich des integrierten Abgaskrümmers, die zu Ölverkokungen führen, reduziert werden. Gleichzeitig wird damit eine Reduzierung der dem Abgas in der Kaltstartphase entzogenen Energie angestrebt. Die Bearbeitung erfolgt in enger Kooperation mit apl. Prof. Dr.-Ing. habil. Dr.-Ing. E. h. Rüdiger Bähr, Prof. Dr.-Ing. habil. Dr. h. c. Ulrich Gabbert und Prof. Dr. Michael Scheffler.

8. Eigene Kongresse, wissenschaftliche Tagungen und Exponate auf Messen

Die internationale Konferenzreihe "Conference on Modelling Fluid Flow" (siehe <http://www.cmff.hu>) findet regelmäßig unter Federführung von Prof. Thévenin statt, zuletzt im September 2012 in Budapest mit mehr als 200 Teilnehmern. Herr Priv.-Doz. Dr. Janiga hat dabei einen Workshop bezüglich der Optimierung von Windturbinen organisiert.

9. Veröffentlichungen

Begutachtete Zeitschriftenaufsätze

Bordás, Róbert; John, Volker; Schmeyer, Ellen; Thévenin, Dominique

Measurement and simulation of a droplet population in a turbulent flow field

In: Computers & fluids. - Amsterdam [u.a.]: Elsevier Science, Bd. 66.2012, S. 52-62; ... [weitere Infos](#); 2012

[Imp.fact.: 1,935]

Bordás, Róbert; John, Volker; Schmeyer, Ellen; Thévenin, Dominique

Numerical methods for the simulation of a coalescence-driven droplet size distribution

In: Theoretical and computational fluid dynamics. - Berlin: Springer, insges. 19 S., 2012; ... [weitere Infos](#); 2012

[Imp.fact.: 1,034]

Bordás, Róbert; Seshadhri, Santhosh; Janiga, Gábor; Skalej, Martin; Thévenin, Dominique

Experimental validation of numerical simulations on a cerebral aneurysm phantom model

In: Interventional medicine and applied science. - Budapest: Akadémiai Kiadó, Bd. 4.2012, 4, S. 193-205;

... [weitere Infos](#); 2012

Fru, Gordon; Janiga, Gábor; Thévenin, Dominique

Impact of volume viscosity on the structure of turbulent premixed flames in the Thin Reaction Zone regime

In: Flow, turbulence and combustion. - Dordrecht [u.a.]: Springer Science + Business Media B.V, Bd. 87.2011, 4, S. 451-478, 2012; ... [weitere Infos](#); 2012
[Imp.fact.: 1,108]

Gasteiger, Rocco; Lehman, Dirk Joachim; Pelt, R. van; Janiga, Gábor; Beuing, Oliver; Vilanova, Anna; Theisel, Holger; Preim, Bernhard

Automatic detection and visualization of qualitative hemodynamic characteristics in cerebral aneurysms
In: IEEE transactions on visualization and computer graphics. - New York, NY: IEEE, Bd. 18.2012, 12, S. 2178-2187;
... [weitere Infos](#); 2012
[Imp.fact.: 1,922]

Hofmann, Ingo; Tretau, Anne; Specht, Eckehard

Actuating variables for the tensile strength of drying brick green bodies
In: Zi annual. - Gütersloh: Bauverl., S. 74-88, 2012; 2012

Jinga, Gábor; Rössl, Christian; Skalej, Martin; Thévenin, Dominique

Realistic virtual intracranial stenting and computational fluid dynamics for treatment analysis
In: Journal of biomechanics. - Amsterdam [u.a.]: Elsevier Science, insges. 6 S., 2012; ... [weitere Infos](#); 2012
[Imp.fact.: 3,023]

Lehwald, Andreas; Janiga, Gábor; Thévenin, Dominique; Zähringer, Katharina

Simultaneous investigation of macro- and micro-mixing in a static mixer
In: Chemical engineering science. - Amsterdam: Elsevier, Bd. 79.2012, S. 8-18; ... [weitere Infos](#); 2012
[Imp.fact.: 2,601]

Meng, P.; Specht, Eckehard; Tretau, A.; Rimpel, E.

The solid-solid-recuperator tunnel kiln for energyefficient firing of clay facing bricks and roof tiles
In: Zi annual. - Gütersloh: Bauverl., S. 89-100, 2012; 2012

Pavan Kumar, P.; Nallathambi, Ashok; Specht, Eckehard; Bertram, Albrecht

Mechanical behavior of mushy zone in DC casting using a viscoplastic material model
In: Technische Mechanik. - Magdeburg: Magdeburger Verein für Techn. Mechanik, Bd. 32.2012, 2, S. 342-357;
... [weitere Infos](#); 2012

Buchbeiträge

Aranyi, P.; Janiga, Gábor; Zähringer, Katharina; Thévenin, Dominique

Comparison of different POD methods for time-resolved measurements in complex flows
In: Conference proceedings // Conference on Modelling Fluid Flow, CMFF '12, September 4 - 7, 2012. - Budapest, S. 369-376
Kongress: CMFF'12; 15 (Budapest): 2012.09.04-07; 2012

Berg, Philipp; Janiga, Gábor; Thévenin, Dominique

Detailed comparison of numerical flow predictions in cerebral aneurysms using different CFD software
In: Conference proceedings // Conference on Modelling Fluid Flow, CMFF '12, September 4 - 7, 2012. - Budapest
Kongress: CMFF'12; 15 (Budapest): 2012.09.04-07; 2012

Berg, Philipp; Janiga, Gábor; Thévenin, Dominique

Detaillierter Vergleich numerischer Flussvorhersagen in zerebralen Aneurysmen unter Verwendung verschiedener CFD Software
In: Digitales Engineering zum Planen, Testen und Betreiben technischer Systeme. - Stuttgart: Fraunhofer-Verl., S. 319-327, 2012
Kongress: IFF-Wissenschaftstage; 15 (Magdeburg): 2012.06.26-28; 2012

Köhler, Benjamin; Neugebauer, Mathias; Gasteiger, Rocco; Janiga, Gábor; Speck, Oliver; Preim, Bernhard

Surface-based seeding for blood flow exploration

In: Bildverarbeitung für die Medizin 2012. - Berlin [u.a.]: Springer, S. 81-86; ... [weitere Infos](#)

Kongress: Workshop Bildverarbeitung für die Medizin; (Berlin): 2011.03.18-20; 2012

Mátrai, Zsolt; Roloff, Christoph; Bordás, Róbert; Szaszák, Nobert; Szilád, Szabó; Thévenin, Dominique

Investigation of the velocity field in a full-scale artificial medical model

In: Conference proceedings // Conference on Modelling Fluid Flow, CMFF '12, September 4 - 7, 2012. - Budapest, S. 136-143

Kongress: CMFF'12; 15 (Budapest): 2012.09.04-07; 2012

Mohamed, Mohamed H.; Gábor, Janiga; Thévenin, Dominique

Optimal design of a Savonius turbine

In: Conference proceedings // Conference on Modelling Fluid Flow, CMFF '12, September 4 - 7, 2012. - Budapest, S. 55-62

Kongress: CMFF'12; 15 (Budapest): 2012.09.04-07; 2012

Rauchegger, Christian; Schröder, Volkmar; Lohse, Volkmar; Thévenin, Dominique

Release and dispersion of heavy gases - experimental results and numerical simulations

In: , insges. 16 S., 2012

Kongress: Global Congress on Process Safety; 8 (Houston, Tex.): 2012.04.01-05; 2012

Schulz, Florian; Könnig, Michael; Schmidt, Jürgen; Kufferath, Andreas; Samenfink, Wolfgang; Hammer, Jürgen

Infrarotthermographische Untersuchungen der Spray-Wand-Wechselwirkung in Ottomotoren mit Direkteinspritzung

In: Direkteinspritzung im Ottomotor VIII. - Renningen: expert-Verl., S. 50-56, 2012 - (Haus der Technik - Fachbuchreihe; 122); 2012

Szaszák, Norbert; Bordás, Róbert; Mátrai, Zsolt; Szabó, Szilárd; Thévenin, Dominique

Experimental characterization of a cost-effective semi-active grid for turbulence stimulation

In: Conference proceedings // Conference on Modelling Fluid Flow, CMFF '12, September 4 - 7, 2012. - Budapest, S. 362-368

Kongress: CMFF'12; 15 (Budapest): 2012.09.04-07; 2012

Herausgeberschaften

Bertram, Albrecht; Tomas, Jürgen; Warnecke, Gerald; Altenbach, Holm; Tsotsas, Evangelos; Schmidt, Jürgen; Specht, Ekehard; Tobiska, Lutz; Naumenko, Konstantin

Micro-macro-interactions in structured media and particle systems - GRK 1554 - Berlin Summer School 2012, 04.06.2012 - 08.06.2012; Summer School Proceedings, August 2012. - Magdeburg: Univ., 2012; XIII, 285 S.

Kongress: Berlin Summer School; (Berlin): 2012.06.04-06; 2012

Artikel in Kongressbänden

Gröpler, Robin; Warnecke, Gerald; Do, Duc Hai; Specht, Ekehard

Simulation of lime calcination in normal shaft kilns - influence of the particle size distribution

In: Micro-macro-interactions in structured media and particle systems. - Magdeburg: Univ., S. 244-251, 2012

Kongress: Berlin Summer School; (Berlin): 2012.06.04-06; 2012

Hagemeier, Thomas; Thévenin, Dominique; Zähringer, Katharina

Stereoscopic fluorescence analysis of films, droplets and rivulets

In: 16th International Symposium on Applications of Laser Techniques to Fluid Mechanics, Lisbon, Portugal, July 09-12, 2012. - Lisbon, insges. 8 S.

Kongress: International Symposium on Applications of Laser Techniques to Fluid Mechanics; 16 (Lisbon): 2012.07.09-12; 2012

Lucius, Andreas; Lehwald, Andreas; Brenner, Gunther; Thévenin, Dominique

Investigation of unsteady flows in a centrifugal fan using High-Speed PIV and numerical simulations

In: Fan 2012: CD proceedings. - London: Inst. of Mechanical Engineers, insges. 11 S.

Kongress: International Conference on Fan Noise, Technology and Numerical Methods; (Senlis): 2012.04.18-20; 2012

Medeiros de Souza, Luis G.; Janiga, Gábor; Thévenin, Dominique

Multi-objective parameter optimization of the Realizable k-epsilon turbulence model

In: 9th International ERCOFTAC Symposium on Engineering Turbulence Modelling and Measurements, Thessaloniki, Greece, 6 - 8 June 2012, insges. 6 S.

Kongress: International ERCOFTAC Symposium on Engineering Turbulence Modelling and Measurements; 9 (Thessaloniki, Greece): 2012.06.06-08; 2012

Nallathamibi, Ashok Kumar; Penumakala, Pavan Kumar; Specht, Eckehard

Modeling solidification microstructure of steel in twin-belt caster

In: Micro-macro-interactions in structured media and particle systems. - Magdeburg: Univ., S. 275-284, 2012

Kongress: Berlin Summer School; (Berlin): 2012.06.04-06; 2012

Penumakala, Pavan Kumar; Nallathamibi, Ashok Kumar; Specht, Eckehard

Micro-macro interactions in continuous casting of steel

In: Micro-macro-interactions in structured media and particle systems. - Magdeburg: Univ., S. 266-274, 2012

Kongress: Berlin Summer School; (Berlin): 2012.06.04-06; 2012

Roloff, Christoph; Zähringer, Katharina; Thévenin, Dominique

Error quantification of particle position estimation on colour images for particle tracking velocimetry

In: 16th International Symposium on Applications of Laser Techniques to Fluid Mechanics, Lisbon, Portugal, July 09-12, 2012. - Lisbon, insges. 12 S.

Kongress: International Symposium on Applications of Laser Techniques to Fluid Mechanics; 16 (Lisbon): 2012.07.09-12; 2012

Sandaka, Gourisankar; Specht, Eckehard

Modeling of lime calcination from single particle to macro kiln

In: Micro-macro-interactions in structured media and particle systems. - Magdeburg: Univ., S. 236-243, 2012

Kongress: Berlin Summer School; (Berlin): 2012.06.04-06; 2012

Schmidt, Jürgen; Baer, Stephan

Investigations on intermittent spray cooling

In: Micro-macro-interactions in structured media and particle systems. - Magdeburg: Univ., S. 109-117, 2012

Kongress: Berlin Summer School; (Berlin): 2012.06.04-06; 2012

Sunkara, Koteswara Rao; Specht, Eckehard; Mellmann, Jochen

Design of rectangular flights in rotary drums

In: Micro-macro-interactions in structured media and particle systems. - Magdeburg: Univ., S. 226-235, 2012

Kongress: Berlin Summer School; (Berlin): 2012.06.04-06; 2012

Andere Materialien

Tarlet, Dominique; Bendicks, Christian; Roloff, Christoph; Bordás, Róbert; Wunderlich, Bernd; Michaelis, Bernd; Thévenin, Dominique

Gas flow measurements by 3D particle tracking velocimetry using coloured tracer particles

In: Flow, turbulence and combustion. - Dordrecht [u.a.]: Springer Science + Business Media B.V, Bd. 88.2012, 3, S. 343-365; ... [weitere Infos](#); 2012

Dissertationen

Abdalrahman, Khalid Haroun Mohamed; Specht, Eckehard [Gutachter]

Influence of water quality and kind of metal in the secondary cooling zone of casting process. - Magdeburg, Univ., Fak.

für Verfahrens- und Systemtechnik, Diss., 2012; XIII, 157: graph. Darst.; 2012

Atanga, Gordon Fru; Thévenin, Dominique [Gutachter]

Direct numerical simulation of turbulent flames on parallel computers. - Magdeburg, Univ., Fak. für Verfahrens- und Systemtechnik, Diss., 2012; XXI, 166 S.: graph. Darst.; 2012

Chittipotula, Thirumalesha; Thévenin, Dominique [Gutachter]

Numerical prediction of nanoparticle formation in flames. - Magdeburg, Univ., Fak. für Verfahrens- und Systemtechnik, Diss., 2012; XVI, 139 S.: graph. Darst.; 2012

Do, Duc Hai; Specht, Eckehard [Gutachter]

Simulation of lime calcination in normal shaft an parallel flow regenerative kilns. - Magdeburg, Univ., Fak. für Verfahrens- und Systemtechnik, Diss., 2012; IX, 117 S.: graph. Darst.; 2012

EI-Fakharany, Magda Kotb Moursy; Specht, Eckehard [Gutachter]

Process simulation of lime calcination in mixed feed shaft kilns. - Magdeburg, Univ., Fak. für Verfahrens- und Systemtechnik, Diss., 2012; XIII, 124 S.: Ill., graph. Darst.; 30 cm; 2012

Herz, Fabian; Specht, Eckehard [Gutachter]

Entwicklung eines mathematischen Modells zur Simulation thermischer Prozesse in Drehrohröfen. - Zugl.: Magdeburg, Univ., Fak. für Verfahrens- und Systemtechnik, Diss., 2012; Barleben: docupoint Verl.; XVI, 231 S.: graph. Darst.; 21 cm, ISBN 978-3-86912-075-1; 2012

Lorenz, Nadine; Krause, Ulrich [Gutachter]; Specht, Eckehard [Gutachter]

Vereinfachtes eindimensionales Modell zur Simulation der Erderwärmung durch anthropogenes Kohlenstoffdioxid. - Magdeburg, Univ., Fak. für Verfahrens- und Systemtechnik, Diss., 2012; XVI, 130, S.: graph. Darst.; 2012

Stitterich, Eike Rainer Ernst; Tschöke, Helmut [Gutachter]; Schmidt, Jürgen [Gutachter]

Experimentelle Untersuchung zur Wirkung von Kühlkanälen in Kolben von Pkw-Dieselmotoren. - Zugl.: Magdeburg, Univ., Fak. für Maschinenbau, Diss., 2012; Herzogenrath: Shaker, 1., Aufl; 124 S: 76 farb. Ill; 210 mm x 148 mm, 186 g - (Schriftenreihe des MAHLE Doktorandenprogramms; 2), ISBN 978-3-8440-1447-1; 2012

INSTITUT FÜR VERFAHRENSTECHNIK

Universitätsplatz 2, 39106 Magdeburg
Tel. +49 (0)391 67 58643, Fax +49 (0)391 67 12028
andreas.seidel-morgenstern@ovgu.de

1. Leitung

Prof. Dr.-Ing. habil. Andreas Seidel-Morgenstern (geschäftsführender Leiter)
Prof. Dr.-Ing. Udo Reichl
Prof. Dr.-Ing. habil. Kai Sundmacher
Prof. Dr.-Ing. habil. Evangelos Tsotsas
Prof. Dr.-Ing. habil. Jürgen Tomas
Jun.-Prof. Dr. Ulrike Krewer
Jun.-Prof. Dr. Thomas Metzger
Jun.-Prof. Dr. Mirko Peglow
Dr.-Ing. Christof Hamel
Dipl.-Phys. Diethard Kürschner

2. Hochschullehrer

Prof. Dr.-Ing. Udo Reichl
Prof. Dr.-Ing. habil. Andreas Seidel-Morgenstern
Prof. Dr.-Ing. habil. Kai Sundmacher
Prof. Dr.-Ing. habil. Jürgen Tomas
Prof. Dr.-Ing. habil. Evangelos Tsotsas
Jun.-Prof. Dr. Thomas Metzger
Jun.-Prof. Dr. Mirko Peglow
Jun.-Prof. Dr. Ulrike Krewer

3. Forschungsprofil

1. Chemische Verfahrenstechnik (Prof. Dr.-Ing. habil. A. Seidel-Morgenstern)

- Untersuchung heterogen katalysierter Reaktionen
- Kopplung von Reaktion und Stofftrennung
- Membranreaktoren
- Chromatographische Trennverfahren
- Enantiomerentrennung

2. Bioprozesstechnik (Prof. Dr.-Ing. U. Reichl)

- Fermentationstechnik
- Säugerzellen, Hefen, Bakterien
- Aufarbeitungstechnik

- Modellierung, Simulation und Optimierung von Bioprocessen
- Prozessüberwachung und -regelung

3. Systemverfahrenstechnik (Prof. Dr.-Ing. habil. K. Sundmacher, Jun.-Prof. U. Krewer)

- Multifunktionale Systeme
- Brennstoffzellensysteme
- Eigenschaftsverteilte Systeme
- Modellierung, Simulation und Analyse komplexer Prozesssysteme
- Modellierung biologischer Systeme

4. Mechanische Verfahrenstechnik (Prof. Dr.-Ing. habil. J. Tomas)

- Energetisch effiziente, mechanische Verfahren der Wandlung disperser Feststoffe
 - Herstellung, Produktgestaltung & Produktformulierung ultrafeiner bis nanoskaliger Partikelsysteme
 - Grundlagen der Partikelmechanik und Schüttguttechnik
 - Grundlagen, Mikroprozesse und Prozessauslegung der Zerkleinerung, Fällung, Partikelreinigung (Sortierung, Klassierung), Pressfiltration
 - Multiskalige Modellierung und Simulation verfahrenstechnischer Prozesse und Prozessgruppen
 - Auslegung energetisch effizienter und ökologisch verträglicher Prozesse & Maschinen, Prozessgruppen und Verfahren (Anlagen) der Partikeltechnik
- Verfahrenstechnik komplexer Stoffkreisläufe (Werk- und Wertstoffrecycling)
 - Aufbereitungsprozesse fester Abfälle (Aufschlusszerkleinerung und Wertstoffabtrennung)
 - Abwasserreinigung (Schlammwässerung & Klärschlammverwertung)
 - Baustoffrecycling
 - Entwicklung energetisch und ökonomisch effizienter Stoffrecyclingverfahren einschließlich Gestaltung und Formulierung hochwertiger Recyclingprodukte

5. Thermische Verfahrenstechnik (Prof. Dr.-Ing. habil. E. Tsotsas, Jun.-Prof. T. Metzger, Jun.-Prof. M. Peglow)

Am Lehrstuhl und der angegliederten Nachwuchsforschungsgruppe NaWiTec werden die Grundlagen der Stoff- und Wärmeübertragung in Partikelsystemen und porösen Stoffen untersucht. Hierzu zählen Wirbelschichten, mechanisch durchmischte Schüttungen, Festbetten, Agglomerate und Membranen. Anwendungsgebiete sind Trocknung und Partikelformulierung (Agglomeration, Granulation, Coating) für die Feinchemie, Pharma- und Lebensmittelindustrie, Reaktions- und Trenntechnik, Energieerzeugung aus biogenen Feststoffen und Speichermedien für die Energietechnik.

In der Theorie werden moderne Simulationsmethoden wie Porennetzwerke, Populationsbilanzen, diskrete Elemente (insbesondere thermische DEM) und diskrete Monte-Carlo eingesetzt und entwickelt. Apparativ stehen unter anderem ein großes Wirbelschichttechnikum sowie diverse Methoden der Charakterisierung von Feststoffen (z.B. Röntgen-Mikrotomographie, NMR) und Partikelsystemen (z.B. PIV) zur Verfügung.

Folgende Themen werden schwerpunktmäßig untersucht:

- Untersuchung der partikelbildenden Wirbelschichtprozesse im Bereich der Agglomeration, Granulation und Coating
- Partikelcharakterisierung wie z.B. mittels Mikro-Röntgentomographie (innere Struktur), Rasterelektronenmikroskopie (Topologie), Magnetschwebewaage (Sorption- und Trocknungsverhalten)
- Messung und Simulation von Partikelströmungen in Wirbelschichten
- Inline-Messung von Partikeleigenschaften wie z.B. Feuchtigkeit und Größenverteilung in Wirbelschichten
- Durchführung von Machbarkeitsstudien

- Populationsdynamische Modellierung disperser Systeme insbesondere von Wirbelschichtprozessen
- Untersuchung und Modellierung der Vergasung und Verbrennung biogener Brennstoffe in Wirbelschichten
- Entwicklung von verfahrenstechnischen Konzepten
- Porennetzwerk-Modelle
- Thermische Diskrete-Elemente-Methode
- Poröse bzw. granulare Medien für Reaktion oder Trennung
- Trocknungstechnik

4. Forschungsprojekte

Projektleiter: Prof. Dr.-Ing. habil. Dr. h.c. Andreas Seidel-Morgenstern

Förderer: DFG; 01.07.2008 - 30.06.2012

SFB-Teilprojekt "Integration gen- und verfahrenstechnischer Methoden zur Entwicklung biotechnologischer Prozesse"

Im Rahmen dieses Projektes wird die Modellierung chromatographischer Prozesse untersucht. Es handelt sich um ein externes Teilprojekt des SFB 578 der TU Braunschweig. Schwerpunkt ist gegenwärtig die Optimierung der kontinuierlichen Gegenstromchromatographie zur Aufreinigung eines Knochenwachstumsfaktors. Ausserdem soll die chromatographische Isolation von Antikörpern erforscht werden.

Projektleiter: Prof. Dr.-Ing. habil. Dr. h.c. Andreas Seidel-Morgenstern

Förderer: DFG; 01.11.2011 - 30.11.2015

SFB-Transregio 63 Teilprojekt "Integrierte chemische Prozesse in flüssigen Mehrphasensystemen", TP A3 "Reaktionskinetik"

Die chemische Industrie steht vor der enormen Herausforderung, die Rohstoffbasis zur Herstellung chemischer Produkte aufgrund der Verknappung von Erdöl und Erdgas auf eine breitere Basis zu stellen und auch nachwachsende Rohstoffe einzubeziehen. Idealerweise sollten diese Rohstoffe derzeitige organische Basischemikalien substituieren, so dass die existierenden, hoch komplexen Netzwerke zur Herstellung chemischer Produkte weitgehend unverändert genutzt werden können. Diese Idealsituation ist gegenwärtig jedoch wegen fehlender, effizienter Produktionsprozesse noch eine Vision, wobei derzeit mehrere Rohstoffklassen bezüglich ihrer Eignung als Substituenten untersucht werden. Eine Klasse derartiger potenzieller Rohstoffe bilden langkettige Olefine. Mit dieser Stoffgruppe befasst sich dieser Sonderforschungsbereich. Langfristiges Ziel des gemeinsam mit der TU Berlin und der TU Dortmund bearbeiteten SFB-Projektes ist es, durch die Optimierung dieser Lösungsmittelsysteme diese für den Einsatz in mehrphasigen chemischen Produktionsprozessen nutzbar zu machen.

Projektleiter: Prof. Dr.-Ing. habil. Dr. h.c. Andreas Seidel-Morgenstern

Förderer: DFG; 01.10.2011 - 30.09.2013

"Trennen der Enantiomere anästhetischer Gase"

Gemeinsam mit der Universität Leipzig werden die Enantiomere der Flurane chromatographisch getrennt. Längerfristiges Ziel ist es, deren unterschiedliche Wirkung im Narkoseprozess in Kooperation mit der Universitätsklinik Magdeburg zu bewerten.

Projektleiter: Prof. Dr.-Ing. habil. Dr. h.c. Andreas Seidel-Morgenstern

Förderer: Land (Sachsen-Anhalt); 01.01.2008 - 31.12.2012

Forschungsschwerpunkt "Dynamische Systeme"

Dient fakultätsübergreifend der interdisziplinären Forschung und Ausbildung des wissenschaftlichen Nachwuchses auf dem Gebiet der dynamischen Systeme in Biologie/Medizin und Prozesstechnik. Es verfolgt das Ziel, zelluläre biologische Systeme und komplexe technische Prozesse unter einem gemeinsamen Blickwinkel zu betrachten. Durch das Zusammenführen von Biologie/Medizin, Ingenieurwissenschaften und Mathematik/Systemtheorie wird ein erheblicher Erkenntnisgewinn erwartet.

Projektleiter: Prof. Dr.-Ing. habil. Kai Sundmacher
Projektbearbeiter: Dr.-Ing. Hannsjörg Freund, Dipl.-Ing. Benjamin Hentschel
Kooperationen: TU Berlin; TU Dortmund
Förderer: DFG; 01.01.2010 - 31.12.2013

SFB/TR 63: Integrierte chemische Prozesse in flüssigen Mehrphasensystemen - TP B1: Optimale Reaktionsführung in flüssigen Mehrphasensystemen

Das Teilprojekt B1 hat zum Ziel, Methoden zur Ermittlung der optimalen Reaktionsführung für flüssige Mehrphasensysteme zu entwickeln und exemplarisch auf die Hydroformylierung langkettiger Alkene anzuwenden. Dabei übernimmt es drei wichtige Funktionen innerhalb des SFB/TR. Erstens wird eine Methodik für die optimale Reaktionsführung und die ideale Reaktorgestaltung als generische Fragestellung entwickelt. Zweitens werden konkrete Reaktorkonzepte für die im SFB/TR behandelten Stoffsysteme entworfen. Drittens übernimmt B1 eine wichtige Brückenfunktion für den SFB/TR, indem es alle drei Projektbereiche miteinander verknüpft.

Projektleiter: Prof. Dr.-Ing. habil. Kai Sundmacher
Projektbearbeiter: Isai Gonzalez Martinez
Förderer: DFG; 01.01.2010 - 31.12.2012

Elektrolyse von Chlor-wasserstoff in einem Polymerelektrolyt-Membranreaktor mit Sauerstoffverzehrkathode

Die Chlorchemie ist einer der wichtigsten Eckpfeiler der Stoffwirtschaft in der chemischen Industrie. Etwa 60 Prozent des Umsatzes, den die deutsche Chemieindustrie erwirtschaftet, hängen direkt oder indirekt von chlorchemischen Verfahren ab. Chlor ist ein wichtiger Baustein für viele Produkte im Produktionsprozess. Das gilt für Grundchemikalien genauso wie für hoch veredelte Produkte, auf die man zum Beispiel in der Informationstechnik oder der Medizin angewiesen ist.

Chlor wird industriell überwiegend durch die Chlor-Alkali-Elektrolyse hergestellt. Ein kleiner, aber stetig wachsender Anteil der Chlorproduktion basiert auf Chlorwasserstoff, welcher bei einigen Produktionsverfahren als Nebenprodukt entsteht. In Rahmen des Projekts wird ein neuer energiesparenderer Prozess für die Rückgewinnung von Chlor aus Chlorwasserstoff erarbeitet. Hierbei sollen experimentelle und modellgestützte Untersuchungsmethoden eng miteinander verzahnt werden. Besondere Aufmerksamkeit wird dabei dem Einfluss der Kinetik der elektrochemischen Reaktionen an Anode und Kathode sowie den Transportprozessen in der Membran geschenkt.

Projektleiter: Prof. Dr.-Ing. habil. Kai Sundmacher
Projektbearbeiter: Dr. Richard Hanke-Rauschenbach, Astrid Bornhoeft
Förderer: Land (Sachsen-Anhalt); 01.11.2009 - 01.10.2012

Green-FC

Im Zuge des Projekts Green-FC werden der Einsatz von biogenen Energieträgern in Brennstoffzellen untersucht. Als eine der grundsätzlichen Herausforderungen in diesem Zusammenhang gilt die stoffliche und energetische Abstimmung der verfahrens-technischen Prozesse zur Erzeugung und Reinigung des Brenngases und der elektrochemischen Stoffumsetzung in der Brennstoffzelle.

Um das Anlagenverhalten gezielt beeinflussen zu können, ist es nötig die einzelnen Teilsysteme im Zusammenhang zu betrachten. Im Rahmen dieses Projekts werden deshalb mathematische Modelle der einzelnen Apparate aufgestellt und analysiert. Daraus folgend werden Optimierungsvorschläge erarbeitet.

Das beschriebene Projekt ist Teil eines Verbundprojekts, in dem auch eine entsprechende Versuchsanlage entwickelt und realisiert wird. Die Erkenntnisse aus den Analysen der Modelle werden sowohl in die Auslegung der Apparate als auch in die Betriebsführung eingehen.

Projektleiter: Prof. Dr.-Ing. habil. Kai Sundmacher
Projektbearbeiter: Prof. Michael Naumann, Prof. Kai Sundmacher, Prof. Michael Mangold, Dr. Michael Wulkow
Kooperationen: Computing in Technology GmH, Dr. Michael Wulkow; Max-Planck-Institut für Dynamik komplexer technischer Systeme Magdeburg; Max-Planck-Institut für Dynamik komplexer technischer Systeme Magdeburg (Prof. Sundmacher); Universität Magdeburg (Prof. Naumann)
Förderer: Bund; 01.09.2009 - 01.08.2012

MODEXA: Modellgestützte Methoden zur optimalen Gestaltung von Stimulus-Experimenten und dynamischen Analyse von Signaltransduktionsprozessen

Das Projekt MODEXA wird im Detail die zelluläre NF- κ B Signaltransduktion nach DNA-Schädigung (z.B. UV-Licht oder chemische Noxen) experimentell und mit Hilfe von systemtheoretischen Methoden bearbeiten. Die NF- κ B Signaltransduktion spielt nicht nur bei Entzündungsprozessen, sondern auch bei Differenzierungsprozessen, z.B. Zellwachstum eine wichtige Rolle.

Faktoren des NF- κ B Systems sind u.a. auch Zielstrukturen für Medikamente in der Krebstherapie (z.B. Topoisomerase Inhibitoren). Die Untersuchung des dynamischen Antwortverhaltens der Zellen gegenüber unterschiedlichen Therapeutika erlaubt den Wissenschaftlern anschließend die Formulierung von Modellen, die die zellulären Signaltransduktionsprozesse mathematisch beschreiben.

Ziel ist es, ein Software-System (MODEXA-Toolbox) für die optimale Versuchsplanung und die optimale Gestaltung von Befragungssignalen zu entwickeln.

Außerdem soll diese Toolbox zuverlässig einsetzbar sein, um die umfangreichen Daten aus den biomedizinisch höchst aufwendigen Experimenten zu erfassen, für die systematische Modellierung der Signaltransduktion strukturiert aufzubereiten und im zyklischen Wechselspiel mit den Experimenten die Aufklärung der komplexen Signal-Netzwerke nachhaltig zu beschleunigen.

Projektleiter: Prof. Dr.-Ing. habil. Kai Sundmacher

Projektbearbeiter: Dr. Andreas Voigt, Franziska Sondej

Förderer: Industrie; 01.07.2011 - 01.06.2012

Verfahrenentwicklung zur Herstellung schmieraktiver Nanopartikel in Emulsionen

Die Fällung von Nanopartikeln in den Tropfen einer Emulsionen ist eine mögliche Alternative, um Feststoff in einer Flüssigkeit zu erzeugen und fein verteilt zu stabilisieren. Durch die Kontrolle der Tropfenpopulation der Emulsion kann eine gezielte Steuerung der Größe und Größenverteilung der Partikelpopulation erreicht werden. Die mögliche Anwendung für industrielle Zwecke steht im Mittelpunkt der Untersuchungen.

Projektleiter: Prof. Dr.-Ing. habil. Evangelos Tsotsas

Projektbearbeiter: Dr. Abdolreza Kharaghani

Kooperationen: Dr. Thomas Metzger, BASF

Förderer: DFG; 01.04.2010 - 31.03.2012

Modellierung der Kapillarkräfte bei der Konvektionstrocknung von Gelen: Einfluss von Produkt- und Prozessparametern auf Strukturhaltung und Strukturänderung (Teilprojekt des SPP 1273 Kolloidverfahrenstechnik)

Um die günstige Konvektionstrocknung zur Herstellung hochporöser Gele zu erschließen, wird der Einfluss von Gelstruktur, Stoffparametern sowie Trocknungsbedingungen auf die mechanische Beanspruchung und Schädigung dieser fragilen Partikelaggregate untersucht. Hierzu wird zum einen eine Kombination von Volume-of-fluid-Methode (für die Flüssigkeitsverteilung) und Diskrete-Elemente-Methode (für die Wirkung der Kapillarkräfte) eingesetzt, zum anderen werden Trocknungsexperimente im Röntgen-Mikrotomographen durchgeführt.

Projektleiter: Prof. Dr.-Ing. habil. Evangelos Tsotsas

Projektbearbeiter: M.Sc. Yujing Wang

Kooperationen: Dr.-Ing. habil. Thomas Metzger, BASF

Förderer: DFG; 01.05.2010 - 30.04.2013

Porenskalige Experimente und Simulationen zur Trocknung von Partikelpackungen

Partikelpackungen werden als Modellstrukturen für poröse Materialien benutzt, um Porennetzwerkmodelle für die Trocknung zu testen. Sowohl Experimente mit Röntgenmikrotomograph als auch Simulationen mit Volume-of-Fluid-Methode werden zu diesem Zweck eingesetzt.

Projektleiter: Prof. Dr.-Ing. habil. Evangelos Tsotsas

Förderer: Industrie; 01.10.2009 - 30.09.2012

Deaktivierung von Inhaltsstoffen bei der Sprühtrocknung von Milchprodukten

Im Rahmen des Projektes wird die Deaktivierungskinetik von essentiellen Aminosäuren während der Sprühtrocknung untersucht. Dabei werden insbesondere Einflussparameter wie die Trocknungstemperatur und zeitliche Exposition untersucht. Zur Validierung der entwickelten Modelle werden auch experimentelle Untersuchungen am Einzeltropfen

am akustischen Levitator durchgeführt.

Projektleiter: Prof. Dr.-Ing. habil. Evangelos Tsotsas
Projektbearbeiter: Dipl.-Ing. Quang Tran
Kooperationen: Dr.-Ing. Markus Henneberg, AVA GmbH
Förderer: BMWi/AIF; 01.05.2012 - 30.04.2013

Entwicklung einer Prozessstrategie zur Entstaubung und Beschichtung grobkörniger Produkte

Es werden neue Wirbelschichttechnologien für die Beschichtung von Saatgut ("Beize") entwickelt. Ziel ist die Vermeidung von Staubbildung beim Austrag des Saatgutes, zur Schonung des Ökosystems. Darüber hinaus sind Energieeffizienz und Produktqualität beim Beschichtungsprozess im Fokus.

Projektleiter: Prof. Dr.-Ing. habil. Evangelos Tsotsas
Projektbearbeiter: Dipl.-Ing. Philipp Bachmann
Kooperationen: Mehrere Industriepartner
Förderer: BMWi/AIF; 01.12.2012 - 30.11.2015

Gestaltung partikulärer Produkte in Wirbelschichttrinnen

Viele industrielle Anwendungen verlangen eine gleichmäßige Verteilung der Feuchte bzw. der Beschichtungsdicke unter allen Einzelpartikeln eines partikulären Produkts. Zu diesem Zweck werden sogenannte Wirbelschichttrinnen eingesetzt. Es wird untersucht, wie sich die Gestaltung eines solchen Apparates auf die Verweilzeit und Produktqualität bei der Trocknung und beim Coating auswirkt.

Projektleiter: Prof. Dr.-Ing. habil. Evangelos Tsotsas
Projektbearbeiter: MSc Mubashir Hussain
Kooperationen: Prof. Gerald Warnecke; Prof. Mirko Peglow
Förderer: DFG; 01.07.2010 - 30.06.2013

Herleitung von Agglomerationskernen aus diskreten oder Compartment Modellen für Sprühwirbelschichten

Die zeitliche Entwicklung der Partikelgrößenverteilung während der Agglomeration in Sprühwirbelschichten lässt sich auf makroskopischer Ebene mit Hilfe von Populationsbilanzen erfassen, für die schnelle und effiziente Löser existieren. Jedoch scheitert die Methode in der Praxis an Unkenntnis über die kinetischen Parameter des makroskopischen Ansatzes (Agglomerationskern). Daher ist es Ziel des Projektes, diskrete mikroskalige Modelle des Prozesses (Monte Carlo) zur Parametrisierung der Populationsbilanzen zu nutzen. Dies ist auch deswegen interessant, weil die mikroskaligen Modelle Größen (z.B. Oberflächenfeuchte) liefern, die messtechnisch kaum zugänglich sind. Ergänzend hierzu werden Kombinationen von Populationsbilanzen für unterschiedliche Bereiche der Wirbelschicht benutzt, um eine für die gesamte Wirbelschicht als gültig angenommene Populationsbilanz zu parametrisieren.

Projektleiter: Prof. Dr.-Ing. habil. Evangelos Tsotsas
Projektbearbeiter: Dr. Abdolreza Kharaghani
Kooperationen: Dr.-Ing. habil. Thomas Metzger, BASF
Förderer: DFG; 01.04.2012 - 31.03.2014

Modellierung der Kapillarkräfte bei der Konvektionstrocknung von Gelen: Einfluss von Produkt- und Prozessparametern auf Strukturhaltung und Strukturänderung (Teilprojekt des SPP 1273 Kolloidverfahrenstechnik)

Um die günstige Konvektionstrocknung zur Herstellung hochporöser Gele zu erschließen, wird der Einfluss von Gelstruktur, Stoffparametern sowie Trocknungsbedingungen auf die mechanische Beanspruchung und Schädigung dieser fragilen Partikelaggregate untersucht. Hierzu wird zum einen eine Kombination von Volume-of-fluid-Methode (für die Flüssigkeitsverteilung) und Diskrete-Elemente-Methode (für die Wirkung der Kapillarkräfte) eingesetzt, zum anderen werden Trocknungsexperimente im Röntgen-Mikrotomographen durchgeführt.

Projektleiter: Prof. Dr.-Ing. habil. Evangelos Tsotsas
Projektbearbeiter: M.Sc. Thi Thu Hang Tran
Kooperationen: Nestlé, Switzerland

Förderer: Sonstige; 01.02.2012 - 31.01.2015

Spray drying of products with sensitive ingredients

Food materials contain vital but sensitive ingredients that may deteriorate during spray drying, depending on the evolution of temperature and water activity. Multiscale and multiphysics methods are developed, which can be used for higher quality dairy products dried in more efficient spray drying processes.

Projektleiter: Prof. Dr.-Ing. habil. Evangelos Tsotsas

Projektbearbeiter: M.Sc. Yu Sun

Kooperationen: Dr.-Ing. habil. Thomas Metzger, BASF

Förderer: DFG; 01.12.2010 - 30.11.2013

Untersuchung der Lotionsverteilung in Feuchttüchern mit Porennetzwerkmodellen und Röntgen-Mikrotomographie

Feuchttücher sind nicht-gewobene Fasermaterialien, die mit einer Waschlotion getränkt werden. Ihre Qualität bei der Hautreinigung und in der Handhabung hängt stark von Materialstruktur und räumlicher Verteilung der Flüssigkeit ab. Das Projekt benutzt Porennetzwerkmodelle und Röntgen-Mikrotomographie, um Flüssigkeitsverteilungen und Kapillarkrafteffekte von der Mikroebene ausgehend besser zu verstehen.

Projektleiter: Prof. Dr.-Ing. habil. Evangelos Tsotsas

Projektbearbeiter: MSc Maryam Dadkhah

Förderer: DFG; 01.05.2010 - 30.04.2013

Untersuchung von Agglomeratstruktur und Tropfentrocknung bei der Sprühagglomeration in Wirbelschichten

Die Struktur von Agglomeraten, welche in Sprühwirbelschichten hergestellt werden, beeinflusst deren Gebrauchseigenschaften, z.B. ihre Rehydrierbarkeit. Die Trocknung der eingesprützten Tropfen auf der Partikeloberfläche kann für die Agglomerationskinetik maßgeblich sein. Strukturbildung und Trocknung sind Bestandteile moderner diskreter Methoden (Monte Carlo) zur Simulation der Agglomeration. Ziel des Projektes ist es, das Mikromodell zur Berechnung der Trocknung durch Berücksichtigung der thermischen Auswirkung des Substrats zu verbessern. Die Struktur realer Agglomerate wird mit Hilfe eines Röntgen-Mikrotomographen erfasst und mit Annahmen bzw. Voraussagen der Monte Carlo Simulation verglichen.

Projektleiter: Prof. Dr.-Ing. habil. Evangelos Tsotsas

Projektbearbeiter: Dipl.-Ing. Nicole Vorhauer

Kooperationen: Dr. Marc Prat (Directeur de Recherche), Toulouse; Jun.-Prof. Dr. Thomas Metzger

Förderer: Haushalt; 01.12.2007 - 30.11.2012

Vergleich von Porennetzwerkmodellen für die Trocknung mit Kontinuumsmodellen und Experimenten

Porennetzwerkmodelle zur Beschreibung der Trocknung sollen mit traditionellen Kontinuumsmodellen verglichen werden. Hierzu werden effektive Parameter des Stoff- und Wärmetransports für teilgesättigte Porennetzwerke berechnet, die dann in der Kontinuumsmodellierung benutzt werden. Der Vergleich soll auf unterschiedlichen Komplexitätsebenen erfolgen, was die Berücksichtigung der Transportphänomene betrifft. Zudem werden Experimente zur Validierung der Porennetzwerkmodelle vorbereitet und durchgeführt.

Projektleiter: Prof. Dr.-Ing. Mirko Peglow

Förderer: BMWi/AIF; 01.01.2011 - 30.09.2012

Entwicklung einer innovativen Produktgestaltungstechnologie zur Abwärmenutzung von landwirtschaftlichen Biogasanlagen im Nassfermentationsbetrieb

Zur regenerativen Energieerzeugung werden in landwirtschaftlich geprägten Regionen Blockheizkraftwerke (BHKW) mit vorgeschalteter Fermentation von biologischen Abfällen eingesetzt. Das flüssige und hochwertige Endprodukt aus der Fermentation wird üblicherweise aufgrund schlechter Transporteigenschaften in der näheren Umgebung auf Feldern ausgebracht.

Zur Verbesserung der Transporteigenschaften, der Einsetzbarkeit als Dünger und zur optimalen energetischen Nutzung der BHKW-Abwärme soll das Endprodukt in einem nachgeschalteten Prozess aufgearbeitet werden. Der innovative Strahlschichtprozess umfasst die Trocknung und Funktionalisierung der Gärreste zu einem hochwertigen Dünger mit definierter Zusammensetzung.

Zielstellung des durch das Bundesministerium für Wirtschaft und Technologie geförderten Vorhabens ist die Entwicklung einer neuartigen Strahlschichtapparatur, welche die Verarbeitbarkeit des Produktes ermöglicht. Aus den verfahrenstechnischen Grundlagen des Prozesses soll ein marktfähiges Konzept erarbeitet werden, welches bei lokalen Betreibern von Biogasanlagen in der Umgebung umgesetzt werden soll.

Regionale Partner in diesem Projekt sind die Anhaltinische Verfahrens- und Anlagentechnik GmbH (AVA GmbH) und die Primatech Regenerative Energiesysteme GmbH.

Projektleiter: Prof. Dr.-Ing. Mirko Peglow

Projektbearbeiter: M. Börner, M. Dervedde, C. Fischer, T. Hoffmann, A. Bück (alle Dipl.-Ing.)

Förderer: Bund; 01.03.2008 - 28.02.2013

InnoProfile Nachwuchsforschungsgruppe Wirbelschichttechnik - NaWiTec

Die NaWiTec (Nachwuchsforschungsgruppe Wirbelschichttechnik) beschäftigt sich mit der Untersuchung von partikelbildenden Prozessen in Sprühwirbelschichten.

Die Partikelformulierung in Wirbelschichten nimmt einen bedeutenden Teil im Bereich der Granulierteknik ein. Die vollautomatische Steuerung oder Regelung dieser Prozesse bezüglich der Granulateigenschaften ist bisher kaum möglich. Oftmals kann nur durch die jahrelange Erfahrung des Anlagenpersonals der Granulationsprozess durch eine gezielte Veränderung von Prozessparametern so beeinflusst werden, dass ein Granulat mit den gewünschten Eigenschaften erzeugt wird. Störungen oder Schwankungen im Prozess werden oftmals nicht erkannt, so dass auch entsprechende Veränderungen in der Produktqualität entstehen können.

Ziel des NaWiTec-Vorhabens ist es, ein Regelungskonzept für partikelbildende Wirbelschichtprozesse zu entwickeln, das es ermöglicht, Partikel mit bestimmten Eigenschaften (Partikelgröße, Partikelfeuchte) automatisch zu erzeugen. Im Verlaufe des Projektes soll demonstriert werden, dass es möglich ist, ein derartiges Überwachungs- und Regelungskonzept zunächst im Technikumsmaßstab erfolgreich umzusetzen.

Zur Erreichung dieses Ziels müssen wesentliche Probleme in den Bereichen

- der populationsdynamischen Modellierung der Partikelbildungsprozesse,
- der inline-Messung der partikulären Eigenschaften wie Partikelgröße und Partikelfeuchte,
- der experimentellen Untersuchung der Wirbelschichtprozesse (Partikelbildung und Trocknung) und
- der Entwicklung von Regelungskonzepten und -strategien

gelöst werden. Der NaWiTec steht eine hervorragende experimentelle Ausstattung zur Verfügung. Dies umfasst neben zahlreicher Technikumsanlagen auch hochmoderne Systeme zur Charakterisierung partikulärer Eigenschaften.

Wichtige Methoden, die innerhalb der NaWiTec eingesetzt werden, sind u.a.

- makroskopische und diskrete Populationsbilanzmodelle
- Zustandsschätzung verteilter Eigenschaften
- Strömungs- und DEM-Simulation

Experimentell stehen unter anderem folgende Ausrüstungen verwendet

- Particle Image Velocimetry (PIV)
- Röntgentomographie
- Rasterelektronenmikroskopie
- Faseroptische Methoden zur Messung der Größenverteilung, Konzentration und Geschwindigkeit von Partikeln
- Nuclear Magnetic Resonanz

Projektleiter: Prof. Dr. Udo Reichl

Projektbearbeiter: Dipl.-Ing. M. Meininger

Förderer: Bund; 01.10.2008 - 31.03.2012

Einsatz synthetischer Liganden zur Aufreinigung salinsäurehaltiger, rekombinanter humaner Proteine und Impfstoff-Antigene

Das Projekt hat zum Ziel die Stärkung des Produktionsstandortes in der Biotechnologie sowie die Entwicklung neuer Aufreinigungstechnologien. Unter anderem soll die Entwicklung hochaffiner sialinsäure-spezifischer Liganden zur Aufreinigung rhu-Proteine sowie die Entwicklung hochaffiner kontinuierlicher (SMB) und diskontinuierlicher Trennverfahren für virale Antigene und Influenzaviren und der Ausbau von Ausbildungsmöglichkeiten im Bereich "DSP biologischer und pharmazeutischer Wirkstoffe" erforscht und verbessert werden.

Projektleiter: Prof. Dr. Udo Reichl

Projektbearbeiter: Prof. U. Reichl

Förderer: Industrie; 01.08.2009 - 15.12.2012

Kultivierung und Infektion von CAP Zelllinien

Neu entwickelte humane Suspensionszellen sollen überprüft werden, ob sie als Substrat zur Influenzavirus-Vermehrung dienen können. Dabei soll abgeschätzt werden, ob ein Impfstoff Herstellungsprozess analog zu bestehenden Zellkultur-Prozessen möglich wäre. Dazu wird die Vermehrung verschiedener Influenzaviren unter unterschiedlichen Prozessbedingungen bis zu einem Produktionsmaßstab von 1 L im Bioreaktor getestet.

Projektleiter: Prof. Dr. Udo Reichl

Projektbearbeiter: Dipl.-Ing. R. Heyer

Förderer: Deutsche Bundesstiftung Umwelt; 01.08.2011 - 30.07.2014

Prozesskontrolle und Optimierung der Biogasproduktion mittels Metaproteomanalyse

Die Biogasproduktion in Biogasanlagen ist die viertwichtigste Form der Erzeugung von erneuerbaren Energien in Deutschland. Bei diesem Prozess wandelt eine komplexe mikrobielle Gemeinschaft unter anaeroben Bedingungen Biomasse in Methan um. Das Methan wird anschließend in Blockheizkraftwerken zur Bereitstellung von Strom und Wärme genutzt. Für die effiziente Biogasproduktion sind stabile Wachstumsbedingungen für die mikrobiellen Lebensgemeinschaften in den Biogasanlagen wichtig. Beispielsweise führt eine zu schnelle Freisetzung von organischen Säuren aus dem Substrat zu einem starken Abfall des pH-Wertes und damit zum Absterben der methanogenen Mikroorganismen. Ziel dieses Promotionsvorhabens ist die Entwicklung eines auf Markerproteinen basierenden Schnelltestes, um diese Prozessprobleme rechtzeitig zu erkennen und ihnen entgegenwirken zu können. Zur Suche nach diesen Biomarkern sollen die mikrobiellen Lebensgemeinschaften auf dem Niveau der Proteine mittels Metaproteomeanalyse untersucht werden. Erwartet wird ein neuartiger Einblick in die Black Box der Biogasbildung, zum Beispiel durch die Detektion von Proteinen, die spezifisch für die Hydrolyse der Substrate und die Methanogenese sind. Einige dieser Proteine sollen anschließend als Biomarker für einen semiquantitativen Schnelltest auf immunologischer Basis genutzt werden. Dieser Schnelltest soll vor Ort eingesetzt werden und dem Anlagenbetreiber ermöglichen Prozessinstabilitäten frühzeitig zu erkennen. Dadurch können entsprechende Gegenmaßnahmen rechtzeitig ergriffen und so die Leistung und die Ausbeute der Biogasanlage verbessert werden.

Projektleiter: Prof. Dr. Udo Reichl

Projektbearbeiter: Dr. D. Benndorf

Förderer: Bund; 01.11.2011 - 31.10.2013

Prozessmikrobiologie in landwirtschaftlichen Biogasanlagen Ermittlung der mikrobiellen Diversität in Biogasanlagen sowie von hauptsächlichen verfahrenstechnischen Einflussfaktoren auf die Mikroflora (BIOGAS-BIOCOENOSIS)

In Biogasanlagen bewirkt eine komplexe und dynamische mikrobielle Lebensgemeinschaft den Aufschluss und Abbau der organischen Biomasse zu methanhaltigem Biogas. Der Großteil der beteiligten Mikroorganismen ist bislang jedoch noch unbekannt, ebenso ihr Einfluss auf die Reaktoreffizienz.

Parallel zu dem bereits durch die FNR geförderten Forschungsvorhabens BiogasEnzyme (FKZ 22027707) soll ein begleitendes Monitoring der Prozessmikrobiologie in ausgewählten landwirtschaftlichen Biogasanlagen stattfinden. Da die meisten der Biogas-Mikroben mittels konventioneller mikrobiologischer Verfahren nicht zu kultivieren sind, sollen vorrangig molekulargenetische Ansätze zur kulturunabhängigen Erfassung der mikrobiellen Diversität auf Basis der Sequenzierung ausgewählter mikrobieller Gene (16S rRNA Gen, mcrA Gen) angewandt werden. Mittels modernster Hochdurchsatz-Technologien wie der 454-Pyrosequenzierung soll ein umfangreicher Datenbestand erarbeitet werden, welche eine Analyse der Auswirkung verschiedener Betriebsweisen von Biogasanlagen auf die Prozessmikrobiologie erlauben. Weiterhin sollen ebenfalls Zusammenhänge zwischen Prozessmikrobiologie sowie Reaktorleistung ermittelt

werden. Es wird erwartet, dass sich aus dem Datenmaterial Aussagen über besonders prozessrelevante Arten oder Organismengruppen ableiten lassen, welche als Grundlage für eine weitere biotechnologische Optimierung der Biogasfermentation genutzt werden können.

Projektleiter: Prof. Dr. Jürgen Tomas

Projektbearbeiter: Dipl.-Ing. Peter Müller

Förderer: Haushalt; 13.01.2010 - 13.01.2013

Druck-, Stoß- und Bruchverhalten feuchter kugelförmiger Granulate

Gegenstand der Arbeit bilden die experimentelle Ermittlung und physikalisch begründete Beschreibung der Mikro-Makro-Wechselwirkungen feuchter Granulate bei Druck- und Stoßbeanspruchung. Mikromechanische Wechselwirkungen sind Mikrobruchprozesse sowie Mikroeingenschaften der Primärpartikel und Flüssigkeitsbrücken. Makromechanische Wechselwirkungen kennzeichnen das Makroverhalten der feuchten Granulate bezüglich des Deformationsverhaltens, der Bruchvorgänge und der Energiedissipation im ganzen Granulat Korn. Die gewonnenen Daten werden mit der Diskrete-Elemente-Methode (DEM) in 3 Dimensionen simuliert.

Projektleiter: Prof. Dr. Jürgen Tomas

Förderer: DFG; 01.12.2010 - 30.11.2012

Die Radio- und die Lichtwellenemission während der Kontaktdeformation und während des Partikelbruches

Das Ziel des Projektes besteht darin, die Radio- und Lichtimpulse, welche während der Kontaktbeanspruchung von Partikeln entstehen, zu erfassen und diese bei der Beschreibung der Mikromechanik des Partikelkontaktverhaltens anzuwenden. Die Mikromechanik ist in einer Beziehung zu erfassen, welche die Ursache (Kraft, Energieeintrag), Wirkung (Spannungen, Mikrorisse, Mikrobrüche) und Antwort (Licht- und Radiowellenemission) beinhaltet. Dabei sollen die entstehenden Radio- und Lichtwellen zu den wesentlichen Mikroprozessen an der Kontakt- und Bruchoberfläche der Partikel zugeordnet werden. Die entstehenden Spannungen, Mikrorisse und Mikrobrüche in den Partikeln können während der Kontaktkompression mit einer erhöhten zeitlichen Auflösung verfolgt und dargestellt werden. Für diese Kontaktkompression werden die Kraft-Weg-Kurven der Belastung, Entlastung, Wiederbelastung und Kontaktablösung zeitsynchron mit den Radiowellen und der Lichtstrahlung erfasst und analysiert. Die Kinetik der Mikroprozesse, welche durch die Radiowellen und Lichtemission bei der inelastischen Kontaktverformung erfasst werden, wird durch numerische Rechnungen überprüft. Diese numerischen Rechnungen werden mit Verwendung des Kontaktmodells steife Partikel mit weichen Kontakten, welche vom Kooperationspartner entwickelt wurde, durchgeführt. Dabei lassen sich die Mess- und Modellierungsergebnisse gegenseitig ergänzen und bewerten. Die Korrelation zwischen dem Verlauf der Lichtimpulse und den Mikroprozessen in der Partikelschicht wurde vom Antragsteller untersucht und bewertet. Leider ist die Erfassung der Mikroprozesse mit Hilfe der Lichtemission nur für optisch transparente Partikelschichten anwendbar. In diesem Zusammenhang besteht ein großer Bedarf darin, die Anwendungsbereiche der entwickelten Methode auf dicke und optisch nicht transparente Partikelschichten zu erweitern. Im Unterschied zu den Lichtimpulsen lassen sich die Radioimpulse durch optisch nicht transparente Partikelschichten durchleiten und können so zur Ermittlung der Mikroprozesse in dickeren Partikelschichten verwendet werden. Die entstehende Lichtemission ist als Referenzsignal mit einer hohen Zeitauflösung zu betrachten. Radiowellenimpulse werden zeitsynchron mit Lichtemission gemessen. Dabei werden den Radiowellenimpulsen wesentliche Mikroprozesse zugeordnet, die bei der Kontaktdeformation in der Partikelschicht entstehen. Aufgrund dieser Untersuchungen wird eine neue zeitlich hochauflösende, experimentelle Methode zur Ermittlung der Mikroprozesse während der Kontaktdeformation in Partikelkollektiven entwickelt, die einen wichtigen kooperativen Beitrag im Schwerpunktprogramm Partikel im Kontakt Mikromechanik, Mikroprozessdynamik und Partikelkollektive leisten wird.

Projektleiter: Prof. Dr. Jürgen Tomas

Projektbearbeiter: Azamat Omarov

Förderer: DFG; 01.05.2010 - 30.04.2012

Die Untersuchung der mechanischen Eigenschaften von Getreidekörnern und Kornschichten

Die meisten verfahrenstechnischen Prozesse in der getreideverarbeitenden Industrie sind mit der Verarbeitung disperser Partikelsysteme und ihrer elastisch-plastischen, viskosen und reibungsdominierten Eigenschaften der Körner und Haufwerke verbunden. Die detaillierte Untersuchung ihrer mechanischen Eigenschaften erlaubt es, tiefer in die Physik der verfahrens-technischen Mikroprozesse und -vorgänge zu schauen. Diese mikromechanischen Eigenschaften sollen künftig sowohl für die Simulationen der Dynamik makroskopischer verfahrenstechnischer Prozesse als auch für die

Auslegung der zugehörigen Apparate und Maschinen verwendet werden. Das Ziel des Projekts ist die Untersuchung mechanischer Eigenschaften von Getreidekörnern und die Messungen des Kraft-Weg-Verhaltens von Weizenkörnern. Bei diesen Messungen wird jeweils ein einzelnes Weizenkorn bis zum Bruch beansprucht und die Kraft-Weg-Kurve ermittelt. Bei diesen Druckversuchen wird der Einfluss der Lage der Körner auf ihre Festigkeit berücksichtigt. Die Größe der Bruchkraft, des Bruchenergievalues, des E-Moduls, der Fließgrenze, des plastischen Fließdrucks und der Bruchspannung wird mittels dieser Kraft-Weg-Kurven bestimmt.

Projektleiter: Prof. Dr. Jürgen Tomas

Projektbearbeiter: Dr. rer. nat. Werner Hintz, Tel. 0391-67-12295

Förderer: Haushalt; 01.01.2010 - 31.12.2012

Entwicklung eines neuartigen Photokatalysators auf Basis von TiO₂ mit erweiterter spektraler Sensibilität für die Behandlung von pharmazeutisch belasteten Abwässern

Nanopartikel finden in immer weiteren Bereichen Anwendungen. Eine viel versprechende Anwendung im Umweltbereich ist die der Behandlung von Trink- und Abwasser zur Entfernung von unerwünschten Spurenstoffen. Das vorliegende Projekt untersucht die Herstellung und Verwendung eines neuartigen, nanostrukturierten Photokatalysators aus TiO₂, mit dessen Hilfe bestehende Probleme, bei der Beseitigung von Spurenschadstoffen und pathogenen Keimen aus Abwasser oder Trinkwasser, gelöst werden können. Das wissenschaftliche Ziel ist die Herstellung und Evaluierung praxistauglicher neuer Photokatalysatoren zur Entfernung organischer Kontaminanten aus Abwasser und Trinkwasser. Dazu werden Photokatalysatoren in Form von einer dünnen Schicht als auch als Nanofasern hergestellt. Die dünnen Schichten werden mittels Eintauchen von einem Substrat in eine Nanopartikel-Suspension abgelagert. Die Fasern aus Titandioxid (Anatas) werden mit Hilfe eines Elektrospleißverfahrens mit einem Durchmesser im Nanometerbereich hergestellt und mit nanoskaligen TiO₂ - Partikeln imprägniert. Diese Strukturen werden nachfolgend mittels chemischer Additive bzw. mit Hilfe eines Lasers modifiziert, um einen nanoskaligen Photokatalysator mit festgelegter Morphologie und Phasenzusammensetzung zu erhalten. Die Forschungsaktivitäten im Projekt umfassen insbesondere die Kombination verschiedener Herstellungsprozesse für einen innovativen Photokatalysator mit hoher spezifischer Oberfläche, niedrigen Rekombinationsraten und hocheffizienter photokatalytischer Aktivität hinsichtlich der Abbaubarkeit von im Wasser vorhandenen organischen, biologisch schwer abbaubaren Schadstoffen und pathogenen Keimen wie z.B. Viren oder Bakterien.

Projektleiter: Prof. Dr. Jürgen Tomas

Projektbearbeiter: Dr.-Ing. Andreas Schlinkert, Tel. 0391-67-12295

Förderer: Sonstige; 01.01.2009 - 31.12.2013

Forschungs- und Entwicklungsprojekt zur Herstellung eines Katalysatorproduktes

Forschungs- und Entwicklungsprojekt zur Katalysatorentwicklung: Gemeinsam mit der TRG Cyclamin GmbH Schönebeck wird gegenwärtig ein Forschungs- und Entwicklungsprojekt zur Katalysatorentwicklung bearbeitet. Auf der Basis von mineralischen Recyclingprodukten, die auf Grund ihres räumlichen Strukturgerüsts große Oberflächen bilden können, werden unter reaktiven Bedingungen Adsorbentien für einen industriellen Einsatz hergestellt. Die Entwicklung verfolgt das Ziel, Adsorptionsmittel zu erzeugen, die sowohl den rauen technischen Einsatzbedingungen genügen als auch über eine hohe Adsorptionsfähigkeit verfügen. Diese Eigenschaften lassen sich meßtechnisch mit Hilfe von Festigkeitsuntersuchungen und Oberflächenmessungen mit Hilfe der Tieftemperatur-Stickstoff-Adsorption erfassen. Besonders geeignet erweist sich die von R.Haul und G. Dümbgen vereinfachte Messmethode zur Bestimmung der spezifischen Oberfläche nach DIN 66132 (Einpunkt-BET-Verfahren). Die experimentellen Untersuchungen werden mit dem Messgerät Areameter II der Firma Juwe Laborgeräte GmbH durchgeführt. Im Herstellungsverfahren der Produkte werden neben den unterschiedlichen Reaktionsbedingungen, die sehr wesentlich durch die Temperaturprofilierung beeinflusst werden, auch Zusatzkomponenten getestet, die wiederum dem Zweck dienen, eine Vielzahl von hochenergetischen Adsorptionsplätzen zu schaffen. Im Zusammenhang mit der Ermittlung der spezifischen Oberfläche kommt der Untersuchung der Aktivierungsreaktion eine besondere Bedeutung zu. In Abhängigkeit von den jeweiligen Bedingungen im Herstellungsverfahren sind die optimalen Parameter zur Voraktivierung der Materialien und deren Einfluß auf die spezifische Oberfläche zu untersuchen. Im Ergebnis des Forschungs- und Entwicklungsprojektes zur Katalysatorentwicklung sind standardisierte Verfahren zu ermitteln, die den Bedingungen eines technischen Herstellungsprozesses genügen.

Projektleiter: Prof. Dr. Jürgen Tomas

Projektbearbeiter: Dr. rer. nat. Werner Hintz, Tel. 0391-67-12295

Förderer: Haushalt; 01.01.2012 - 31.12.2013

Herstellung von Poly-(butylcyanoacrylat)-Nanopartikel (PBCA-NP) zur Überwindung der Blut-Hirn-Schranke

Die Verwendung von Nanopartikel als Arzneimittel-Trägersysteme zur zielgerichteten Pharmakotherapie wird seit mehr als 30 Jahren diskutiert. Mit ihrer Hilfe ist es möglich, die Körperverteilung von Arzneistoffen so zu verändern, dass hohe, pharmakologisch wirksame Konzentrationen am Zielort bei Verringerung der Nebenwirkungen erreicht werden. Diese Trägersysteme dienen nicht nur dem Transport, sondern dienen auch als Schutz für potentielle Wirkstoffe. Dabei stellen die Poly-(butylcyanoacrylat)-Nanopartikel (PBCA-NP) eine besonders vielversprechende Gruppe innerhalb der Arzneimittel-Trägersysteme dar. Sie sind biokompatibel und biologisch abbaubar. Die oberflächenmodifizierten PBCA-NP haben gegenüber anderen Nanopartikeln noch einen weiteren Vorteil, sie ermöglichen den Transport von Substanzen durch die Blut-Hirn-Schranke, die eine biologische Barriere im menschlichen Körper darstellt. Die Herstellung der unmodifizierten PBCA-NP erfolgt heute u.a. mit Hilfe von Fällungsprozessen (z.B. in Aceton), durch anionische Emulsionspolymerisation im sauren Medium unter Verwendung von Stabilisatoren bzw. durch radikalische Emulsionspolymerisation. Die Beladung bzw. Funktionalisierung der NP geschieht mit entsprechenden Wirk- und Farbstoffen, anschließend werden diese NP z.B. mit Tween 80 ummantelt. Diese NP bieten durch ihre physikalischen Eigenschaften und durch die gezielte Freisetzung von Wirkstoffen in den Organen vielfältige Vorteile bei diagnostischen und therapeutischen Anwendungen (verbesserte Pharmakinetik und -dynamik, lokale Verabreichungsmöglichkeit). Obwohl bereits beträchtliche Fortschritte bei in-vivo-Untersuchungen und in klinischen Studien erzielt wurden, bleibt die Notwendigkeit bestehen, fundamentale Aspekte der Herstellung der PBCA-NP zu lösen und zu optimieren (größenkontrollierte Synthese und Stabilität der NP, enge Partikelgrößenverteilungen, Biokompatibilität der Beschichtungen, Bindung des Wirkstoffes und physiologische Parameter).

Projektleiter: Prof. Dr. Jürgen Tomas

Projektbearbeiter: Dr. rer. nat. Werner Hintz, Tel. 0391-67-12295

Förderer: Haushalt; 01.01.2012 - 31.12.2013

Maßgeschneiderte superparamagnetische Nanopartikel für Anwendungen in Medizin und Pharmazie

Superparamagnetische Eisenoxid-Nanopartikel (SPIO-NP), wie Magnetit Fe_3O_4 und Maghemit $\text{-Fe}_2\text{O}_3$, zählen zu den am häufigsten angewendeten biokompatiblen Partikelsystemen in der Biomedizin. Diese Nanopartikel bieten durch ihre physikalischen Eigenschaften (u.a. die Partikelgröße) vielfältige Vorteile bei diagnostischen und therapeutischen Anwendungen in der Medizin (gezielte Freisetzung von Wirkstoffen in den Organen, eine verbesserte Pharmakinetik und -dynamik, lokale Verabreichungsmöglichkeiten). Obwohl beträchtliche Fortschritte bei der Untersuchung der Partikelbildungsprozesse magnetischer Nanopartikel erzielt wurden, bleibt die Notwendigkeit bestehen, fundamentale Aspekte der Herstellung magnetischer Fluide zu lösen und zu optimieren (größenkontrollierte Synthese und Stabilität der Nanopartikel, enge Partikelgrößenverteilungen, Biokompatibilität der Beschichtungen, Bindung des Wirkstoffes und physiologische Parameter). Zwar steht heute bereits eine Anzahl von biokompatiblen superparamagnetischen Eisenoxid-Nanopartikel als sogenannte Einzeldomänen-Partikel mit hoher Magnetisierbarkeit zur Verfügung, deren Primärpartikelgrößen liegen aber nur zwischen 3 und 15 nm (einzelne Partikel). Bei Agglomeraten bzw. Aggregaten in Form von Multidomänen-Partikeln werden Durchmesser von bis zu 100 nm erreicht, diese Partikel haben zwar eine relativ hohe Magnetisierbarkeit, die sich aber nur aus der Summation der im Aggregat enthaltenen Partikel ergibt. Größere Eindomäne-Partikel hätten den Reiz, aufgrund der volumenproportionalen Magnetisierbarkeit zur dritten Potenz zu skalieren, aber trotzdem die schaltbaren superparamagnetischen Eigenschaften und die Suspensionsstabilität zu behalten. Aufgrund der Agglomeration ist die Anwendbarkeit in der Biomedizin eingeschränkt. Die Herstellungsprozesse in flüssiger Phase laufen als komplexe, wechselseitig verschaltete Mikroprozesse ab und sind noch nicht umfassend erforscht.

Projektleiter: Prof. Dr. Jürgen Tomas

Projektbearbeiter: Dipl.-Ing. Katja Mader

Förderer: DFG; 01.06.2010 - 31.05.2012

Modellierung des Kontaktverhaltens feiner adhäsiver Partikel

In der Partikeltechnik (z.B. Lebensmitteltechnik, chemische- und pharmazeutische Industrie und Werkstofftechnik) werden aufgrund energiesparender Erzeugung gezielter physikalisch-chemischer Eigenschaften Partikelgrößen kleiner als 100 μm produziert. Mit abnehmender Größe von Partikeln steigt deren volumenbezogene spezifische Oberfläche und damit auch die Häufigkeit und Intensität ihrer Wechselwirkungen. Die damit verbundene verringerte Kontaktsteifigkeit

stellt eine Ursache für zunehmende Adhäsion dar, die auf der Van-der-Waals-Anziehung im unmittelbaren Kontakt beruht.

Ziel des Projektes ist es, bei der Anwendung einer äußeren Beanspruchung die prozessbestimmende Intensivierung der Adhäsion, d.h. die Verknüpfung der inelastischen Kontaktverformung mit der verstärkenden Wirkung der Van-der-Waals-Kräfte innerhalb der Kontaktzone feiner Partikel, herauszuarbeiten. Mit Hilfe des Modells steife Partikel mit weichen Kontakten wird die elastisch-plastische Repulsion bei Normalbelastung eines glatten Kugelkontaktes modelliert. Für diese Art der Kompression werden neue Normalkraft-Weg-Funktionen für Belastung, Entlastung, Wiederbelastung und Kontaktablösung hergeleitet. Aus den Belastungs- und Entlastungsfunktionen kann ein neues Haftkraft-Normalkraft-Modell gewonnen werden, das die momentane zeitinvariante Haftkraftverstärkung beschreibt. Mit der resultierenden lastabhängigen Haftkraft werden die mikromechanischen Modelle für das elastische und reibungsbehaftete Gleiten, Rollen und Verdrehen (Torsion) deutlich erweitert. Außerdem wird eine geschwindigkeitsabhängige viskose Verformung des Kontaktes für diese Art der Beanspruchung eingeführt und anhand numerischer Rechnungen bewertet. Im Anschluss werden die erstellten Kontaktmodelle mittels Rasterkraftmikroskopie (AFM) überprüft, kalibriert und beurteilt.

Projektleiter: Prof. Dr. Jürgen Tomas

Projektbearbeiter: Martin Pieper

Förderer: DFG; 01.06.2009 - 01.06.2013

Prozesskinetik der Desintegration von polydispersen Partikelsystemen bei der Fällung von Bariumsulfat in einem Ringspaltreaktor

Das Ziel des Projektes ist die experimentelle Erfassung und Modellierung eines integrierten Prozesses zur Erzeugung von nanoskaligem Bariumsulfat durch chemische Fällung und gleichzeitiger mechanischer Desintegration in einem Prozessraum. Die Herausforderung ist dabei die Herstellung eines gegen Agglomeration stabilisierten Bariumssulfats, dessen Partikelgrößenverteilung nahezu monodispers ist. Ein geeignet zu gestaltender Ringspaltreaktor fungiert gleichzeitig als chemischer Reaktionsraum zur Fällung und mechanischen Desintegration. Dadurch kann die Redispersierung des polydispersen Partikelsystems zu nanoskaligem Bariumsulfat mit Volumenkonzentrationen bis zu 30 % bei - im Vergleich zur Feinstzerkleinerung - moderaten mechanischen Energieeinträgen realisiert werden.

Projektleiter: Prof. Dr. Jürgen Tomas

Projektbearbeiter: M. sc. Zinaida Kutelova, Tel.: 0391-67-11866

Förderer: DFG; 01.10.2010 - 31.10.2013

Serviceprojekt zur Herstellung, Funktionalisierung und Charakterisierung von Referenzpartikelkollektiven im Rahmen des SPP 1486, Partikel im Kontakt - Mikromechanik, Mikroprozessdynamik und Partikelkollektive PiKo

Das Ziel des Projektes ist (a) die Herstellung von ausgewählten Partikelsystemen als Referenzpartikelkollektive, (b) die Oberflächenmodifizierung und Funktionalisierung dieser Partikel und (c) die physikalisch-chemische Charakterisierung der granulometrischen und mechanischen Eigenschaften der Partikel und Partikelkollektive. Es erfolgt eine Fokussierung auf preiswerte, engverteilte kugelförmige Partikel mit bequem bestimmbar granulometrischen Daten, die typisch für bestimmte mikromechanische Verhaltensmuster sind, wie auf (a) vergleichsweise steife (amorphe) Glaspartikel, deren Haft- und Kontakteigenschaften sich einfach durch Silanisierung chemisch modifizieren lassen, (b) Titan(IV)-oxid-Partikel, die sehr stark haften und agglomerieren aufgrund ihrer großen Hamaker-Konstante, ihres weichen Kontaktverhaltens verbunden mit einer großen Kontaktabplattung und ihres großen Haftkraftanstieges unter Einwirkung einer verfestigenden Normalkraft und (c) monodisperse organische Latexpartikel mit bekannten Hafteigenschaften, die für ein weiches mechanisches Partikelverhalten mit unbekanntem Reibungsverhalten stehen. Beispielhaft sollen dafür folgende Partikelkollektive (a) nicht modifizierte bzw. modifizierte Glaspartikel, (b) monodisperse, poröse (agglomerierte) bzw. nichtporöse (nicht agglomerierte) TiO₂-Partikel und (c) Polystyrol-Partikel mit einem Durchmesser von 50 nm und 5 µm hergestellt werden. Die Herausforderung des Projektes liegt einerseits in der Herstellung von sehr eng verteilten (monodispersen) kugelförmigen Referenzpartikeln geringer Menge (ca. 10 g) mit einer sehr glatten Oberfläche u.a. zur physikalischen Charakterisierung der mechanischen Eigenschaften (z.B. Messung der Haftkräfte mittels Atomkraftmikroskopie AFM), andererseits in der Herstellung größerer Mengen (> 1 kg) möglichst eng verteilter Partikelsysteme aus einer Grundgesamtheit, die repräsentativ zum technischen Produkt sind.

Projektleiter: Dipl.-Ing. Franka Kretschmer

Kooperationen: IFF Magdeburg

Förderer: Bund; 17.06.2009 - 28.02.2013

Populationsdynamische Modellierung und experimentelle Validierung für Biomassenkonversionsprozesse

Die Modellierung von Biomasse-Konversionsprozessen stellt eine Möglichkeit dar die Energieproduktion zur Verwendung in einem neuartigen virtuellen Kraftwerk besser und dynamischer den Anforderungen anzupassen. Die Modellierung bedient sich hier des populationsdynamischen Ansatzes, wofür Einzelpartikelkinetiken hergeleitet bzw. experimentell bestimmt werden müssen. Die Validierung des Gesamtmodells wird an einer Technikumsanlage durchgeführt, die 2010 errichtet wurde.

5. Veröffentlichungen

Begutachtete Zeitschriftenaufsätze

Balawejder, Maciej; Kiwala, Dawid; Lorenz, Heike; Seidel-Morgenstern, Andreas; Piatkowski, Wojciech; Antos, Dorota

Resolution of a diastereomeric salt of citalopram by multistage crystallization

In: Crystal growth & design. - Washington, DC: American Chemical Society, Bd. 12.2012, 5, S. 2557-2566; ... [weitere Infos](#); 2012

[Imp.fact.: 4,720]

Borchert, Christian; Sundmacher, Kai

Morphology evolution of crystal populations - modeling and observation analysis

In: Chemical engineering science. - Amsterdam: Elsevier, Bd. 70.2012, 5, S. 87-98; ... [weitere Infos](#); 2012

[Imp.fact.: 2,379]

Bornhöft, Astrid; Hanke, Rauschenbach, Richard; Sundmacher, Kai

Steady-state multiplicity of a biogas production system based on anaerobic digestion

In: 11th International Symposium on Process Systems Engineering. - Amsterdam [u.a.]: Elsevier, S. 1377-1381, 2012 - (Computer-aided chemical engineering; 31); ... [weitere Infos](#)

Kongress: PSE 2012; 11 (Singapore): 2012.07.15-19; 2012

Bück, Andreas; Klaunick, Günter; Kumar, Jitendra; Peglow, Mirko; Tsotsas, Evangelos

Numerical simulation of particulate processes for control and estimation by spectral methods

In: AIChE journal. - Hoboken, NJ: Wiley-Blackwell, Bd. 58.2012, 8, S. 2309-2319; ... [weitere Infos](#); 2012

[Imp.fact.: 2,261]

Dadkhah, Maryam; Peglow, Mirko; Tsotsas, Evangelos

Characterization of the internal morphology of agglomerates produced in a spray fluidized bed by X-ray tomography

In: Powder technology. - Amsterdam [u.a.]: Elsevier, Bd. 228.2012, S. 349-358; ... [weitere Infos](#); 2012

[Imp.fact.: 2,221]

Flassig, Robert J.; Sundmacher, Kai

Nonlinear design of stimulus experiments for optimal discrimination of biochemical systems

In: 11th International Symposium on Process Systems Engineering. - Amsterdam [u.a.]: Elsevier, S. 540-544, 2012 - (Computer-aided chemical engineering; 31); ... [weitere Infos](#)

Kongress: PSE 2012; 11 (Singapore): 2012.07.15-19; 2012

Fricke, Michael; Sundmacher, Kai

Emulsion-assisted nanoparticle precipitation - time scale analysis and dynamic simulation

In: Industrial & engineering chemistry research. - Washington, DC: American Chemical Society, Bd. 51.2012, 4, S. 1579-1591; ... [weitere Infos](#); 2012

[Imp.fact.: 2,072]

Fricke, Michael; Sundmacher, Kai

Mass transfer model of triethylamine across the n-decane/water interface derived from dynamic interfacial tension experiments

In: Langmuir. - Washington, DC: ACS, Bd. 28.2012, 17, S. 6803-6815; ... [weitere Infos](#); 2012

[Imp.fact.: 4,269]

Hanreich, Angelika; Heyer, Robert; Benndorf, Dirk; Rapp, Erdmann; Pioch, Markus; Reichl, Udo; Klocke, Michael

Metaproteome analysis to determine the metabolically active part of a thermophilic microbial community producing biogas from agricultural biomass

In: Canadian journal of microbiology. - Plattsburgh, NY: NRC Research Press, Bd. 58.2012, 7, S. 917-922; unter URL: =A ... [weitere Infos](#); 2012

[Imp.fact.: 1,363]

Heidebrecht, Peter; Hanke-Rauschenbach, Richard; Jörke, Andreas; Sundmacher, Kai

On the design of cascades of ECPrOx reactors for deep CO removal from reformat gas

In: Chemical engineering science. - Amsterdam: Elsevier, Bd. 67.2012, 1, S. 34-43; ... [weitere Infos](#); 2012

Heinonen, Jari; Rubiera Landa, Héctor Octavio; Sainio, Tuomo; Seidel-Morgenstern, Andreas

Use of adsorbed solution theory to model competitive and co-operative sorption on elastic ion exchange resins

In: Separation and purification technology. - Amsterdam [u.a.]: Elsevier Science, Bd. 95.2012, S. 235-247; ... [weitere Infos](#); 2012

[Imp.fact.: 2,921]

Heldt, Frank S.; Frensing, Timo; Reichl, Udo

Modeling the intracellular dynamics of influenza virus replication to understand the control of viral RNA synthesis

In: Journal of virology. - Baltimore, Md: Soc, Bd. 86.2012, 15, S. 7806-7817; ... [weitere Infos](#); 2012

[Imp.fact.: 5,402]

Henrich-Noack, Petra; Prilloff, Sylvia; Voigt, Nadine; Jin, Jing; Hintz, Werner; Tomas, Jürgen; Sabel, Bernhard A.

In vivo visualisation of nanoparticle entry into central nervous system tissue

In: Archives of toxicology. - Berlin: Springer, Bd. 86.2012, 7, S. 1099-1105; ... [weitere Infos](#); 2012

[Imp.fact.: 4,674]

Hertel, Christoph; Heidebrecht, Peter; Sundmacher, Kai

Experimental quantification and modelling of reaction zones in a cyclic watergas shift reactor

In: International journal of hydrogen energy. - Oxford: Elsevier, Bd. 37.2012, 3, S. 2195-2203; ... [weitere Infos](#) [Special issue: 2010 AIChE Annual Meeting Topical Conference on Hydrogen Production and Storage]; 2012

[Imp.fact.: 4,057]

Isken, B.; Genzel, Y.; Reichl, Udo

Productivity, apoptosis, and infection dynamics of influenza A/PR/8 strains and A/PR/8-based reassortants

In: Vaccine. - Amsterdam: Elsevier, Bd. 30.2012, 35, S. 5253-5261; ... [weitere Infos](#); 2012

[Imp.fact.: 3,572]

Javeed, Shumaila; Qamar, Shamsul; Seidel-Morgenstern, Andreas; Warnecke, Gerald

Parametric study of thermal effects in reactive liquid chromatography

In: Chemical engineering journal. - Amsterdam: Elsevier, Bd. 191.2012, S. 426-440; ... [weitere Infos](#); 2012

[Imp.fact.: 3,074]

Ji, Guangji; Hanke-Rauschenbach, Richard; Bornhöft, Astrid; Zhou, Su; Sundmacher, Kai

Fuel cell power control based on a master-slave structure - a proton exchange membrane fuel cell case study

In: Journal of fuel cell science and technology. - New York, NY: ASME, Bd. 9.2012, 4, insges. 11 S.; ... [weitere Infos](#); 2012

[Imp.fact.: 1,136]

Kache, Guido; Tomas, Jürgen

Schwingungsunterstützter Schwerkraftfluss eines ultrafeinen kohäsiven Kalksteinmehls - Versuche und Modellierung

In: Chemie - Ingenieur - Technik. - Weinheim: Wiley-VCH Verl, Bd. 84.2012, 11, S. 1894-1900; ... [weitere Infos](#); 2012

[Imp.fact.: 0,589]

Kadyk, Thomas; Hanke-Rauschenbach, Richard; Sundmacher, Kai

Nonlinear frequency response analysis of dehydration phenomena in polymer electrolyte membrane fuel cells

In: International journal of hydrogen energy. - Oxford: Elsevier, Bd. 37.2012, 9, S. 7689-7701; ... [weitere Infos](#); 2012
[Imp.fact.: 4,057]

Kaemmerer, Henning; Horvath, Zoltan; Lee, Ju Weon; Kaspereit, Malte; Arnell, Robert; Hedberg, Martin; Herschend, Björn; Jones, Matthew J.; Larson, Kerstin; Lorenz, Heike; Seidel-Morgenstern, Andreas

Separation of racemic bicalutamide by an optimized combination of continuous chromatography and selective crystallization

In: Organic process research & development. - Washington, DC: American Chemical Society, Bd. 16.2012, 2, S. 331-342; 2012
[Imp.fact.: 2,391]

Kelling, R.; Kolios, G.; Tellaèche, C.; Wegerle, U.; Zahn, V. M.; Seidel-Morgenstern, Andreas

Development of a control concept for catalyst regeneration by coke combustion

In: Chemical engineering science. - Amsterdam [u.a.]: Elsevier Science, Bd. 83.2012, S. 138-148; ... [weitere Infos](#); 2012
[Imp.fact.: 2,601]

Kharaghani, Abdolreza; Metzger, Thomas; Tsotsas, Evangelos

An irregular pore network model for convective drying and resulting damage of particle aggregates

In: Chemical engineering science. - Amsterdam: Elsevier, Bd. 75.2012, S. 267-278; ... [weitere Infos](#); 2012
[Imp.fact.: 2,379]

Khirevich, Siahei; Höltzel, Alexandra; Seidel-Morgenstern, Andreas; Tallarek, Ulrich

Geometrical and topological measures for hydrodynamic dispersion in confined sphere packings at low column-to-particle diameter ratios

In: Journal of chromatography. - New York, NY [u.a.]: Science Direct/Journal of chromatography / A, Bd. 1262.2012, S. 77-91; ... [weitere Infos](#); 2012
[Imp.fact.: 4,531]

Kluge, Sabine; Hoffmann, Marcus; Benndorf, Dirk; Rapp, Erdmann; Reichl, Udo

Proteomic tracking and analysis of a bacterial mixed culture

In: Proteomics. - Weinheim: Wiley-Blackwell, Bd. 12.2012, 12, S. 1893-1901; ... [weitere Infos](#); 2012
[Imp.fact.: 4,505]

Langermann, Jan von; Kaspereit, Malte; Shakeri, Mozaffar; Lorenz, Heike; Hedberg, Martin; Jones, Matthew J.; Larson, Kerstin; Herschend, Björn; Arnell, Robert; Temmel, Erik; Bäckvall, Jan-Erling; Kienle, Achim; Seidel-Morgenstern, Andreas

Design of an integrated process of chromatography, crystallization and racemization for the resolution of 2',6'-pipecoloxylidide (PPX)

In: Organic process research & development. - Washington, DC: American Chemical Society, Bd. 16.2012, 2, S. 343-352; ... [weitere Infos](#); 2012
[Imp.fact.: 2,391]

Le Minh, T.; Lorenz, H.; Seidel-Morgenstern, Andreas

Enantioselective crystallization exploiting the shift of eutectic compositions in solid-liquid phase diagrams

In: Chemical engineering & technology. - Weinheim: Wiley-VCH, Bd. 35.2012, 6, S. 1003-1008; ... [weitere Infos](#); 2012
[Imp.fact.: 1,598]

Lehmann, Tino; Seidel-Morgenstern, Andreas

Comment on "effect of pore size and nickel content of Ni-MCM-41 on catalytic activity for ethene dimerization and local structures of nickel ions"

In: The journal of physical chemistry. - Washington, DC: SocThe journal of physical chemistry <Washington, DC> / C, Bd. 116.2012, 42, S. 22646-22648; ... [weitere Infos](#); 2012
[Imp.fact.: 4,805]

Lehmann, Tino; Wolff, T.; Hamel, Christof; Veit, Peter; Garke, Bernd; Seidel-Morgenstern, Andreas

Physico-chemical characterization of Ni/MCM-41 synthesized by a template ion exchange approach

In: Microporous and mesoporous materials. - Amsterdam [u.a.]: Elsevier, Bd. 151.2012, S. 113-125; ... [weitere Infos](#); 2012

Li, Suzhou; Feng, Lihong; Benner, Peter; Seidel-Morgenstern, Andreas

Efficient optimization of simulated moving bed processes using reduced order models

In: 22nd European Symposium on Computer Aided Process Engineering; Pt. B. - Amsterdam [u.a.]: Elsevier [u.a.], S. 1232-1236, 2012 - (Computer-aided chemical engineering; 30); ... [weitere Infos](#)

Kongress: European Symposium on Computer Aided Process Engineering, ESCAPE; 22 (London): 2012.06.17-20; 2012

Melnikov, Sergey M.; Höltzel, Alexandra; Seidel-Morgenstern, Andreas; Tallarek, Ulrich

A molecular dynamics study on the partitioning mechanism in hydrophilic interaction chromatography

In: Angewandte Chemie. - Weinheim: Wiley-VCHAngewandte Chemie / International edition, Bd. 51.2012, 25, S. 6251-6254; ... [weitere Infos](#); 2012

Melnikov, Sergey M.; Höltzel, Alexandra; Seidel-Morgenstern, Andreas; Tallarek, Ulrich

Eine Moleküldynamikstudie zum Verteilungsmechanismus in der Hydrophilen Interaktionschromatographie

In: , Bd. 124.2012, 25, S. 6355-6358; ... [weitere Infos](#); 2012

Mezhericher, M.; Naumann, M.; Peglow, Mirko; Levy, A.; Tsotsas, Evangelos; Borde, I

Continuous species transport and population balance models for first drying stage of nanosuspension droplets

In: Chemical engineering journal. - Amsterdam: Elsevier, Bd. 210.2012, S. 120-135; ... [weitere Infos](#); 2012

[Imp.fact.: 3,074]

Müller, Peter; Tomas, Jürgen

Compression behavior of moist spherical zeolite 4A granules

In: Chemical engineering & technology. - Weinheim: Wiley-VCH, Bd. 35.2012, 9, S. 1677-1684; ... [weitere Infos](#); 2012

[Imp.fact.: 1,598]

Müller, Peter; Tomas, Jürgen

DEM-Simulation des schiefen Stoßvorgangs modellierter Granulate

In: Chemie - Ingenieur - Technik. - Weinheim: Wiley-VCH Verl, Bd. 84.2012, 3, S. 272-278; ... [weitere Infos](#); 2012

[Imp.fact.: 0,347]

Nowak, Jadwiga; Antos, Dorota; Seidel-Morgenstern, Andreas

Theoretical study of using simulated moving bed chromatography to separate intermediately eluting target compounds

In: Journal of chromatography. - New York, NY [u.a.]: Science DirectJournal of chromatography / A, Bd. 1253.2012, S. 58-70; ... [weitere Infos](#); 2012

[Imp.fact.: 4,531]

O'Brien, Alexander G.; Horváth, Zoltán; Lévesque, François; Lee, Ju Weon; Seeberger, Peter H.

Continuous synthesis and purification by direct coupling of a flow reactor with simulated moving-bed chromatography

In: Angewandte Chemie. - Weinheim: Wiley-VCHAngewandte Chemie / International edition, Bd. 51.2012, 28, S. 7028-7030; ... [weitere Infos](#); 2012

[Imp.fact.: 13,455]

O'Brien, Alexander G.; Horváth, Zoltán; Lévesque, François; Lee, Ju Weon; Seeberger, Peter H.

Kontinuierliche Synthese und Aufreinigung durch direkte Kopplung eines Durchflussreaktors mit "Simulated-Moving-Bed"-Chromatographie

In: Angewandte Chemie. - Weinheim: Wiley-VCH, Bd. 124.2012, 28, S. 7134-7137; ... [weitere Infos](#); 2012

Oettel, C.; Rihko-Struckmann, L.; Sundmacher, Kai

Characterisation of the electrochemical water gas shift reactor (EWGSR) operated with hydrogen and carbon monoxide

rich feed gas

In: International journal of hydrogen energy. - Oxford: Elsevier, Bd. 37.2012, 16, S. 11759-11771; ... [weitere Infos](#); 2012
[Imp.fact.: 4,402]

Oettel, C.; Rihko-Struckmann, L.; Sundmacher, Kai

Combined generation and separation of hydrogen in an electrochemical water gas shift reactor (EWGSR)

In: International journal of hydrogen energy. - Oxford: Elsevier, Bd. 37.2012, 8, S. 6635-6645; ... [weitere Infos](#); 2012
[Imp.fact.: 4,057]

Oettel, Christian; Rihko-Struckmann, Liisa; Sundmacher, Kai

Improved CO tolerance with PtRu anode catalysts in ABPBI based high temperature proton exchange membrane fuel cells

In: Journal of fuel cell science and technology. - New York, NY: ASME, Bd. 9.2012, 3, insges. 7 S.; ... [weitere Infos](#); 2012
[Imp.fact.: 0,884]

Peschel, Andreas; Hentschel, Benjamin; Freund, Hannsjörg; Sundmacher, Kai

Design of optimal multiphase reactors exemplified on the hydroformylation of long chain alkenes

In: Chemical engineering journal. - Amsterdam: Elsevier, Bd. 188.2012, S. 126-141; ... [weitere Infos](#); 2012
[Imp.fact.: 3,074]

Peschel, Andreas; Jörke, Andreas; Freund, Hannsjörg; Sundmacher, Kai

Model-based development of optimal reaction concepts for plant wide process intensification

In: 11th International Symposium on Process Systems Engineering. - Amsterdam [u.a.]: Elsevier, S. 150-154, 2012
- (Computer-aided chemical engineering; 31); ... [weitere Infos](#)
Kongress: PSE 2012; 11 (Singapore): 2012.07.15-19; 2012

Popov, Mladen; Nacheva, Genoveva; Reichl, Udo; Ivanov, Ivan

Effect of the 3'-terminal truncation of the human interferon-gamma gene on plasmid segregation in escherichia coli

In: Biotechnology & biotechnological equipment. - Sofia: Diagnosis Press, Bd. 26.2012, 2, S. 2930-2936; ... [weitere Infos](#); 2012
[Imp.fact.: 0,760]

Prat, Marc; Veran-Tissoires, Stéphanie; Vorhauer, Nicole; Metzger, Thomas; Tsotsas, Evangelos

Fractal phase distribution and drying - impact on two-phase zone scaling and drying time scale dependence

In: Drying technology. - New York, NY [u.a.]: Dekker, Bd. 30.2012, 11/12, S. 1129-1135; ... [weitere Infos](#)
[Special Issue to Commemorate 30 Years of Drying Technology]; 2012
[Imp.fact.: 2,084]

Qamar, Shamsul; Elsner, Martin Peter; Hussain, Iltaf; Seidel-Morgenstern, Andreas

Seeding strategies and residence time characteristics of continuous preferential crystallization

In: Chemical engineering science. - Amsterdam: Elsevier, Bd. 71.2012, S. 5-17; ... [weitere Infos](#); 2012

Riedele, Christian; Reichl, Udo

Time-kill studies with a ceftazidime-treated mixed culture consisting of Pseudomonas aeruginosa, Burkholderia cepacia and Staphylococcus aureus

In: Engineering in life sciences. - Weinheim: Wiley-Blackwell, Bd. 12.2012, 2, S. 188-197; ... [weitere Infos](#); 2012
[Imp.fact.: 1,925]

Roedig, Jana Verena; Rapp, Erdmann; Höper, Dirk; Genzel, Yvonne; Reichl, Udo

Impact of host cell line adaptation on quasispecies composition and glycosylation of influenza A virus hemagglutinin

In: PLoS one. - Lawrence, Kan: PLoS, Bd. 6.2012, 12, insges. 10 S.; ... [weitere Infos](#); 2012
[Imp.fact.: 4,092]

Rollié, Sascha; Mahgold, Michael; Sundmacher, Kai

Designing biological systems - systems engineering meets synthetic biology

In: Chemical engineering science. - Amsterdam: Elsevier, Bd. 69.2012, 1, S. 1-29; ... [weitere Infos](#); 2012

[Imp.fact.: 2,379]

Rozenblat, Yevgeny; Grant, Evgeny; Levy, Avi; Kalman, Haim; Tomas, Jürgen

Selection and breakage functions of particle under impact loads

In: Chemical engineering science. - Amsterdam: Elsevier, Bd. 71.2012, S. 56-66; ... [weitere Infos](#); 2012

Seitz, Claudia; Isken, Britta; Heynisch, Björn; Rettkowski, Maria; Frensing, Timo; Reichl, Udo

Trypsin promotes efficient influenza vaccine production in MDCK cells by interfering with the antiviral host response

In: Applied microbiology and biotechnology. - Berlin: Springer, Bd. 93.2012, 2, S. 601-611; ... [weitere Infos](#); 2012

Sewekow, Eva; Bimczok, Diane; Kähne, Thilo; Faber-Zuschratter, Heidi; Kessler, Lars Christian; Seidel-Morgenstern, Andreas; Rothkötter, Hermann-Josef

The major soyabean allergen P34 resists proteolysis in vitro and is transported through intestinal epithelial cells by a caveolae-mediated mechanism

In: The journal of nutrition. - Bethesda, Md., insges. 9 S., 2012; ... [weitere Infos](#); 2012

[Imp.fact.: 3,900]

Stoltenberg, Daniel; Seidel-Morgenstern, Andreas

An attempt to alter the gas separation of mesoporous glass membranes by amine modification

In: Microporous and mesoporous materials. - Amsterdam [u.a.]: Elsevier, Bd. 154.2012, S. 148-152; ... [weitere Infos](#); 2012

[Imp.fact.: 3,285]

Temmel, E.; Müller, U.; Grawe, D.; Eilers, R.; Lorenz, H.; Seidel-Morgenstern, Andreas

Equilibrium model of a continuous crystallization process for separation of substances exhibiting solid solutions

In: Chemical engineering & technology. - Weinheim: Wiley-VCH, Bd. 35.2012, 6, S. 980-985; ... [weitere Infos](#); 2012

[Imp.fact.: 1,598]

Tomas, Jürgen; Kache, Guido

Micro- and macromechanics of hopper discharge of ultrafine cohesive powder

In: International journal of chemical reactor engineering. - Berlin: De Gruyter, Bd. 10.2012, 1, insges. 19 S.;

... [weitere Infos](#); 2012

[Imp.fact.: 0,790]

Tsotsas, Evangelos

Guest editorial: Special Issue to Commemorate 30 Years of Drying Technology

In: Drying technology. - New York, NY [u.a.]: Dekker, Bd. 30.2012, 11/12, S. 1125-1126; ... [weitere Infos](#)

[Special Issue to Commemorate 30 Years of Drying Technology]; 2012

[Imp.fact.: 2,084]

Tsotsas, Evangelos

Influence of drying kinetics on particle formation - a personal perspective

In: Drying technology. - New York, NY [u.a.]: Dekker, Bd. 30.2012, 11/12, S. 1167-1175; ... [weitere Infos](#)

[Special Issue to Commemorate 30 Years of Drying Technology]; 2012

[Imp.fact.: 2,084]

Voigt, Andreas; Sundmacher, Kai

Monte Carlo simulation of shape evolution in solutions - a model study of BaSO₄ precipitation

In: 22nd European Symposium on Computer Aided Process Engineering; Pt. B. - Amsterdam [u.a.]: Elsevier [u.a.], S. 1163-1166, 2012 - (Computer-aided chemical engineering; 30); ... [weitere Infos](#)

Kongress: European Symposium on Computer Aided Process Engineering, ESCAPE; 22 (London): 2012.06.17-20; 2012

Wang, Yujing; Kharaghani, Abdolreza; Metzger, Thomas

Pore network drying model for particle aggregates - assessment by X-ray microtomography

In: Drying technology. - Philadelphia, Pa: Taylor & Francis, Bd. 30.2012, 15, S. 1800-1809; ... [weitere Infos](#)

[Special Issue: Selected Papers from the Asia-Pacific Drying Conference 2011, Part 2]; 2012

[Imp.fact.: 2,084]

Zhai, Shuang; Zhou, Su; Chen, Fengxiang; Sun, Pengtao; Sundmacher, Kai

Advanced study of non-uniform cell voltage distribution for a PEMFC stack

In: Journal of fuel cell science and technology. - New York, NY: ASME, Bd. 9.2012, 1, insges. 8 S.; ... [weitere Infos](#); 2012

[Imp.fact.: 0,884]

Zhou, Teng; Chen, Long; Ye, Yinmei; Chen, Lifang; Qi, Zhiwen; Freund, Hannsjörg; Sundmacher, Kai

An overview of mutual solubility of ionic liquids and water predicted by COSMO-RS

In: Industrial & engineering chemistry research. - Washington, DC: American Chemical Society, Bd. 51.2012, 17, S. 6256-6264; ... [weitere Infos](#); 2012

[Imp.fact.: 2,072]

Zhou, Teng; Wang, Ziyun; Chen, Lifang; Ye, Yinmei; Qi, Zhiwen; Freund, Hannsjörg; Sundmacher, Kai

Evaluation of the ionic liquids 1-alkyl-3-methylimidazolium hexafluorophosphate as a solvent for the extraction of benzene from cyclohexane: (Liquid + liquid) equilibria

In: The journal of chemical thermodynamics. - London [u.a.]: Academic Press, Bd. 48.2012, S. 145-149; ... [weitere Infos](#); 2012

[Imp.fact.: 2,794]

Zinser, Alexander; Rihko-Struckmann, Liisa; Sundmacher, Kai

Storage of renewable energies via chemical conversion using CO₂ - energy systems analysis

In: 11th International Symposium on Process Systems Engineering. - Amsterdam [u.a.]: Elsevier, S. 995-999, 2012 - (Computer-aided chemical engineering; 31); ... [weitere Infos](#)

Kongress: PSE 2012; 11 (Singapore): 2012.07.15-19; 2012

Buchbeiträge

Mader, Katja; Tomas, Jürgen

Modelling of the contact behaviour between fine adhesive particles with viscous damping

In: Discrete element modelling of particulate media. - Cambridge: Royal Soc. of Chemistry, S. 76-85, 2012; 2012

Palis, Stefan; Bück, Andreas; Kienle, Achim

Low order controller design for continuous fluidized bed spray granulation with internal product classification by robust control methods

In: 7th IFAC Symposium on Robust Control Design. - Elsevier, S. 701-706, 2012; ... [weitere Infos](#)

Kongress: IFAC Symposium on Robust Control Design; 7 (Aalborg, Denmark): 2012.06.20-22; 2012

Stein, Sören; Tomas, Jürgen

Modelling of the filtration behaviour using coupled DEM and CFD

In: Discrete element modelling of particulate media. - Cambridge: Royal Soc. of Chemistry, S. 113-120, 2012; 2012

Herausgeberschaften

Tsotsas, Evangelos; Mujumdar, Arun S.

Modern drying technology Vol. 4: Energy savings. - Weinheim: Wiley-VCH, 2012; XXXIII, 342 S.: Ill., graph. Darst., ISBN 3527315594

[Literaturangaben]; 2012

Artikel in Kongressbänden

Dadkhah, Maryam; Peglow, Mirko; Tsotsas, Evangelos

Morphological characterization of spray fluidized bed agglomerates by using X-ray [my]-computer tomography

In: Micro-macro-interactions in structured media and particle systems. - Magdeburg: Univ., S. 153-166, 2012

Kongress: Berlin Summer School; (Berlin): 2012.06.04-06; 2012

Dürr, Robert; Müller, Thomas; Isken, Britta; Schulze-Horstel, Josef; Reichl, Udo; Kienle, Achim

Distributed modeling and parameter estimation of influenza virus replication during vaccine production authors
In: MATHMOD 2012. - Vienna: ARGESIM, ARGE Simulation News, Vienna Univ. of Technology, insges. 6 S. - (ARGESIM report; 38); ... [weitere Infos](#)
Kongress: MATHMOD; 7 (Vienna): 2012.02.15-17; 2012

Hussain, Mubashir; Peglow, Mirko; Tsotsas, Evangelos

Modelling the aggregation Kernel of population balance equation for spray fluidized bed granulation using Monte-Carlo simulations
In: Micro-macro-interactions in structured media and particle systems. - Magdeburg: Univ., S. 167-188, 2012
Kongress: Berlin Summer School; (Berlin): 2012.06.04-06; 2012

Ivanova Kutelova, Zinaida; Hintz, Werner; Tomas, Jürgen

Surface modification of spherical glass beads
In: Micro-macro-interactions in structured media and particle systems. - Magdeburg: Univ., S. 210-215, 2012
Kongress: Berlin Summer School; (Berlin): 2012.06.04-06; 2012

Mader-Arndt, Katja; Tomas, Jürgen

Micro mechanical particle properties and elastic-plastic, frictional contact behaviour with adhesion
In: Micro-macro-interactions in structured media and particle systems. - Magdeburg: Univ., S. 189-198, 2012
Kongress: Berlin Summer School; (Berlin): 2012.06.04-06; 2012

Müller, Peter; Tomas, Jürgen

Generation and calibration of a zeolite 4A granule using 3D-DEM
In: Micro-macro-interactions in structured media and particle systems. - Magdeburg: Univ., S. 146-152, 2012
Kongress: Berlin Summer School; (Berlin): 2012.06.04-06; 2012

Olatunji, Olakunle; Tomas, Jürgen

Stability determination of steric-stabilized nanoparticles - numerical and experimental analysis
In: Micro-macro-interactions in structured media and particle systems. - Magdeburg: Univ., S. 252-265, 2012
Kongress: Berlin Summer School; (Berlin): 2012.06.04-06; 2012

Stein, Sören; Tomas, Jürgen

Simulation of the filtration behaviour of flocculated and nonflocculated particle suspensions
In: Micro-macro-interactions in structured media and particle systems. - Magdeburg: Univ., S. 199-209, 2012
Kongress: Berlin Summer School; (Berlin): 2012.06.04-06; 2012

Sun, Yu; Kharaghani, Abdolreza; Metzger, Thomas; Tsotsas, Evangelos; Müller, Jörg

Investigation of lotion distribution in wet wipes by pore network model and micro computed tomography
In: Fourth international conference on porous media and its applications in science, engineering, and industry. - Potsdam, insges. 7 S., 2012
Kongress: International Conference on Porous Media and Its Applications in Science, Engineering and Industry; 4 (Potsdam): 2012.06.17-22; 2012

Sun, Yu; Kharaghani, Abdolreza; Metzger, Thomas; Tsotsas, Evangelos; Müller, Jörg

Investigation of lotion distribution in wet wipes by pore network model and micro computed tomography
In: Micro-macro-interactions in structured media and particle systems. - Magdeburg: Univ., S. 118-130, 2012
Kongress: Berlin Summer School; (Berlin): 2012.06.04-06; 2012

Vorhauer, Nicole; Metzger, Thomas; Tsotsas, Evangelos; Prat, Marc

Experimental investigation of drying by pore networks - influence of pore size distribution and temperature
In: Fourth international conference on porous media and its applications in science, engineering, and industry. - Potsdam, insges. 6 S., 2012
Kongress: International Conference on Porous Media and its Applications in Science, Engineering and Industry;

4 (Potsdam): 2012.06.17-22; 2012

Wang, Yujing; Kharaghani, Abdolreza; Metzger, Thomas; Tsotsas, Evangelos

Pore network drying model for particle aggregates - assessment by X-ray microtomography
In: Micro-macro-interactions in structured media and particle systems. - Magdeburg: Univ., S. 131-145, 2012
Kongress: Berlin Summer School; (Berlin): 2012.06.04-06; 2012

Abstracts

Dadkhah, Maryam; Peglow, Mirko; Tsotsas, Evangelos

Morphological characterization of spray fluidized bed agglomerates by using x-ray [m]-computed tomography
In: Proceedings of the International Conference on Mechanics of Nano, Micro and Macro Composite Structures.
Politecnico di Torino, Department of Mechanical and Aerospace Engineering Italy, 18 to 20 June 2012. - Torino:
Politecnico di Torino, insges. 1 S.; ... [weitere Infos](#); 2012

Dissertationen

Bock, Andreas; Reichl, Udo [Gutachter]

Überwachung und Regelung von Hochzelldichtekultivierungen in der Influenza-Impfstoffproduktion. - Zugl.:
Magdeburg, Univ., Fak. für Verfahrens- und Systemtechnik, Diss., 2012; Aachen: Shaker; XI, 175 S.: Ill., graph. Darst.; 210
mm x 148 mm, 300 g - (Forschungsberichte aus dem Max-Planck-Institut für Dynamik komplexer technischer Systeme;
33), ISBN 978-3-8440-1040-4; 2012

Ivanov, Ivan; Schinzer, Dieter [Gutachter]; Sundmacher, Kai [Gutachter]

Development of a glucose-oxygen enzymatic fuel cell. - Magdeburg, Univ., Fak. für Verfahrens- und Systemtechnik,
Diss., 2012; IX, 118 S.: graph. Darst.; 2012

Kaemmerer, Henning; Seidel-Morgenstern, Andreas [Gutachter]

New concepts for enantioselective crystallisation. - Zugl.: Magdeburg, Univ., Fak. für Verfahrens- und Systemtechnik,
Diss., 2011; Aachen: Shaker, 2012; XIII, 202 S.: graph. Darst.; 21 cm, 327 g - (Forschungsberichte aus dem Max-Planck-
Institut für Dynamik Komplexer Technischer Systeme; 32), ISBN 978-3-8440-0804-3; 2012

Peschel, Andreas

Model-based design of optimal chemical reactors. - Zugl.: Magdeburg, Univ., Fak. für Verfahrens- und Systemtechnik,
Diss., 2012; Aachen: Shaker; XIII, 169 S.: graph. Darst.; 21 cm, 275 g - (Forschungsberichte aus dem Max-Planck-Institut
für Dynamik komplexer technischer Systeme; 34), ISBN 978-3-8440-1108-1; 2012

Petruševska-Seebach, Katerina; Seidel-Morgenstern, Andreas [Gutachter]

Overcoming yield limitations when resolving racemates by combination of crystallization and/or chromatography with
racemization. - Zugl.: Magdeburg, Univ., Fak. für Verfahrens- und Systemtechnik., Diss., 2012; Barleben: docupoint
Verl.; [24], 131 S.: graph. Darst.; 21 cm, ISBN 978-3-86912-070-6; 2012

Seebach, Axel; Seidel-Morgenstern, Andreas [Gutachter]; Scheffler, Franziska [Gutachter]

Enantiomerentrennung mit molekular geprägten, monolithischen Polymerphasen. - Zugl.: Magdeburg, Univ., Fak. für
Verfahrens- und Systemtechnik, Diss., 2011; Barleben: docupoint Verl., 2012; XII, 183 S.: graph. Darst.; 21 cm, ISBN 978-
3-86912-069-0; 2012

Sistla, Venkata Subbarayudu; Seidel-Morgenstern, Andreas [Gutachter]

Formation and crystallization based separation of diastereomeric salts. - Magdeburg, Univ., Fak. für Verfahrens- und
Systemtechnik, Diss., 2012; XVIII, 133 S.: graph. Darst.; 2012

Steyer, Christiane; Sundmacher, Kai [Gutachter]; Tomas, Jürgen [Gutachter]; Mangold, Michael [Gutachter]

Precipitation of barium sulfate in a semi-batch stirred tank reactor - influence of feeding policy on particle size and
morphology. - Magdeburg, Univ., Fak. für Verfahrens- und Systemtechnik, Diss., 2012; X, 172 S.: graph. Darst.; 2012

Ta, Hong Duc; Seidel-Morgenstern, Andreas [Gutachter]

A kinetic analysis of ester hydrolysis reactions considering volume and enthalpy changes due to mixing. - Magdeburg, Univ., Fak. für Verfahrens- und Systemtechnik, Diss., 2012; 139, 1 Bl.: graph. Darst.; 2012

INSTITUT FÜR APPARATE- UND UMWELTECHNIK

Universitätsplatz 2, 39106 Magdeburg
Tel. +49 (0)391 67 18831, Fax +49 (0)391 67 11128
iaut@ovgu.de
www.iaut.ovgu.de

1. Leitung

Prof. Dr.-Ing. habil. Ulrich Krause (geschäftsführender Leiter)
Prof. Dr.-Ing. habil. Dr. h. c. Lothar Mörl
Prof. Dr.-Ing. habil. Heinz Köser
Jun.-Prof. Dr.-Ing. Marcus Marx
Christine Bohnet (beratend)

2. Hochschullehrer

Prof. Dr.-Ing. habil. Ulrich Krause
Prof. Dr.-Ing. habil. Dr. h. c. Lothar Mörl
Prof. Dr.-Ing. habil. Heinz Köser
Jun.-Prof. Dr.-Ing. Marcus Marx
Prof. i.R. Dr.-Ing. habil. Dr. h. c. Ulrich Hauptmanns

3. Forschungsprofil

1. Einsatz von verschiedenen Brennstoffen in Wirbelschichten zur Vergasung und zur emissionsarmen Verbrennung in Kooperation mit dem Fraunhofer-Institut IFF Magdeburg
 - Untersuchung des Abbrand- und Emissionsverhaltens von festen Brennstoffen in Wirbelschichtfeuerungen
 - Untersuchung der Verbrennungsbedingungen, wie Brennkammertemperatur, Luftverhältnis und Luftführung, Additivzugabe und Optimierung aus verbrennungs- und emissionstechnischer Sicht
 - Schadstoffbildungsmechanismen, insbesondere die NO_x-Bildung
 - Wirbelschichtvergasung von biogenen Brenn- und Abfallstoffen zur Erzeugung eines in Gasmotoren nutzbaren Brenngases
 - Wirtschaftlichkeit der energetischen Nutzung von Biomassen
2. Minimierung der NO_x-Emissionen von gasbefeuerten Heizkesseln und thermisch hochbelasteten Feuerräumen
 - Entwicklung NO_x-armer Gasbrenner (Patent: COSTAIR-Brenner)
 - Optimierung von Brenner-Feuerraum-Geometrien durch Computersimulationen mittels 3-D-Komplexmodellen (FLUENT, PHOENICS)
 - Verbesserung der Verbrennungs-, Wärmeübertragungs- und NO-Bildungs-Modellierung
3. Experimentelle und theoretische Untersuchungen zur Wirbelschichtbehandlung (Trocknen, Granulieren, Agglomerieren, Coating, Rösten) von feststoffhaltigen Flüssigkeiten und körnigen Substanzen im Luft- und Heißdampfstrom
 - Nutzung von DEM-Simulationen zur Analyse der Fluidodynamik bei gleichzeitiger Granulation in einer blasenbildenden Wirbelschicht
 - Nutzung von DEM-Simulationen zur Analyse der Fluidodynamik in der Strahlschicht
 - Einsatz von faseroptischen Messverfahren in Wirbelschichten
 - Nichtlineare Dynamik der kontinuierlichen Wirbelschicht-Bindestrich-Sprühgranulation

- Regelungskonzepte für kontinuierliche Wirbelschicht-Sprühgranulationsanlagen
 - Deformations- und Bruchverhalten von kugelförmigen Granulaten bei Druck- und Stossbeanspruchung: Experiment und DEM-Simulation
 - Modellierung der Temperatur- und Konzentrationsfelder sowie die Aufstellung von Populationsbilanzen in flüssigkeitsbedühten Wirbelschichten an Versuchsanlagen DN 1500, 400 und 200
 - Modellierung diskontinuierlich ablaufender Prozesse in der Wirbelschicht (Aufheizen, Rösten, Kühlen, Trocknen) mit dem Fluidisierungsmedium Heißdampf und Luft
 - Modellierung des Prozesses der SO₂-Absorption in der Wirbelschicht und die experimentelle Verifizierung an der WS-Anlage DN 400
 - Modellierung des Zerfallsverhaltens von Partikeln in Wirbelschichten
 - Entwicklung neuer Strahlschichtapparaturen
 - Wirbelschicht-Verfahren zur schonenden Gewinnung pflanzlicher Wirkstoffe durch Anwendung tiefer Temperaturen
 - Untersuchungen zur Adsorption für die Trocknung temperaturempfindlicher Produkte (auch unter Vakuum)
 - Wirbelschicht-Extraktion von ätherischen und fetten Ölen
 - Experimentelle Untersuchung von membrangestützten Wirbelschicht-Reaktoren mit Katalysatoren
 - Untersuchung von Prozessen der Kaffeeröstung, -kandierung und -kühlung in der Wirbelschicht hinsichtlich Emissionen und Anlagenoptimierung
 - Durchführung von experimentellen Untersuchungen zur Trocknung, Granulation, Agglomeration und zum Coating im Industrieauftrag
 - Entwicklung neuer Trocknungsverfahren mit interner Kälteerzeugung
4. Instrumentelle Schadstoffanalytik und Emissionsmesstechnik
5. Anlagensicherheit
- Unsicherheiten bei Ingenieurberechnungen
 - Entwicklung von Verfahren zur Beurteilung von Sicherheitsmanagement und -kultur
 - Probabilistische Methoden der Sicherheitsanalyse
 - Störfallfrüherkennung
 - Schnittstelle Mensch/Maschine
 - Experimentelle Ermittlung von Sicherheitskenndaten
 - Versorgungs- und Handhabungssicherheit dezentraler Elektroversorgungssysteme
 - Modellierung von Explosionen
 - Früherkennung von CO-Spitzen in Abgasen
 - Theoretische und experimentelle Arbeiten zur passiven Sicherheit

4. Kooperationen

- Dräger Safety AG & Co. KGaA
- Glatt Ingenieurtechnik GmbH

5. Forschungsprojekte

Projektleiter: Prof. Dr.-Ing. habil. Dr. h.c. Lothar Mörl

Projektbearbeiter: Dr.-Ing. Hartmut Haida, Dipl.-Ing. Wolfgang Behns

Förderer: Deutsche Bundesstiftung Umwelt; 01.06.2009 - 30.06.2012

Wirbelschichttrocknung mit überhitztem Dampf in der lebensmittelverarbeitenden Industrie

In Zusammenarbeit mit der Braunschweigischen Maschinenbauanstalt AG wurde ein Projekt zum Thema Wirbelschichttrocknung mit überhitztem Wasserdampf in der Lebensmittel verarbeitenden Industrie bearbeitet, welches durch die Deutsche Bundesstiftung Umwelt (DBU) gefördert wurde. An einer an der Otto-von-Guericke-Universität vorhandenen Heißdampf-Wirbelschicht-Versuchsanlage wurden experimentelle

Untersuchungen mit Stoffsystemen aus dem Bereich der Lebensmittelindustrie durchgeführt. Diese Untersuchungen waren Grundlage für das Konzept einer neuen Heißdampf-Wirbelschicht-Anlage im Technikumsmaßstab, welche im Rahmen dieses Projektes bei der BMA errichtet wurde.

Projektleiter: Prof. Dr. Heinz Köser

Projektbearbeiter: Dipl.-Ing. Jan Schütze

Förderer: Industrie; 01.02.2012 - 30.12.2012

Experimentelle Validierung der Wirksamkeit eines silikatischen Adsorbens für die Quecksilber Bindung un REA Wäschern

Ein silikatisches Adsorbens (d50 8 µm, 150 m²/g) ist für die Co-Abscheidung von Quecksilber in REA-Wäschern entwickelt worden.

In Simulationsuntersuchungen auf Laborebene soll die Wirksamkeit bewertet werden bevor größere Mengen für Feldversuche hergestellt werden.

Projektleiter: Prof. Dr. Heinz Köser

Förderer: Sonstige; 01.11.2012 - 30.11.2013

Abscheidung von metallischem und oxidiertem Quecksilber von speziellen mineralischen Adsorbentien im Vergleich zu Gas-Aktivkohlen

Das Quecksilber-Adsorptionsverhalten von speziell behandelten mineralischen Adsorbentien in Modellabgasen wird ermittelt und mit dem von Aktivkohlen verglichen. Die Ergebnisse werden genutzt das Herstellungsverfahren der Adsorbentien weiterzuentwickeln.

Projektleiter: Prof. Dr. Heinz Köser

Projektbearbeiter: Dipl.-Ing. Sebastian Hopf; Dipl.-Ing. Jan Schütze

Förderer: Industrie; 01.04.2012 - 30.01.2013

Einfluss der Betriebsbedingungen auf die Quecksilberemissionen einer Kupolofenanlage

Hintergrund:

Ausgehend von verschiedenen Eisenschrotten (Blechabfälle der Automobilindustrie und verschiedenen Misch-Schrotten) wird in der Gießerei-Industrie in Heißwind-Kupolöfen (Schachtschmelzöfen) Gießerei-Eisen erschmolzen. Flüssiges Eisen, Schlacke und Gichtgas sind die wichtigsten erzeugten Stoffströme. Das vermutlich im Wesentlichen mit den Schrotten dem Ofen zugeführte Quecksilber (Hg) wird bei den hohen Prozesstemperaturen quasi vollständig verflüchtigt und mit den Gichtgasen abgeführt. Das CO-reiche Abgas/Gichtgas des Heißwindkupolofens (ca. 200 bis 300°C im Normalbetrieb, höhere Temperaturen im Stand-by Betrieb) wird in Theisen-Desintegrator einer nassen Entstaubung unterzogen. Das entstaubte und abgekühlte Gichtgas wird anschließend in einer Brennkammer bei 800-900°C verbrannt und die entstehende Wärme zur Kupol-Ofenluftvorwärmung genutzt. Für Kupolöfen ist eine absatzweise Beschickung typisch. Es werden im Kupolofen verschiedene Betriebszustände durchlaufen, die einen erheblichen Einfluss auf die Speziesverteilung des Quecksilbers im Abgas ausüben können. Problemstellung: Das dem Kupolofen mit dem Schrott versteckt zugeführte Quecksilber kann zu überhöhten Emissionskonzentrationen führen. Die versteckten Hg-Gehalte durch Überwachung der Rohstoffe aufzuspüren, um sie dann auszukreisen, erscheint aufwendig. Zielführender sind vermutlich ergänzende abgasseitige Maßnahmen zur verstärkten präventiven Hg-Abscheidung. Untersuchungsziele: Die Kenntnisse über die Höhe und Art der Quecksilberemissionen des Kupolofens sind zu erweitern und erste Verfahrensansätze für eine verstärkte Quecksilberabscheidung in der vorhandenen Quenche/Naßenstauber Einheit zu entwickeln.

Projektleiter: Prof. Dr. Heinz Köser

Projektbearbeiter: Dipl.-Ing. Sebastian Hopf

Kooperationen: ENEL, GDF Suez, E.ON

Förderer: Weitere Stiftungen; 01.07.2011 - 01.07.2013

Geringe Gesamtquecksilbergehalte und Quecksilberspeziesverteilung in Feuerungsabgasen - Validierung des Dowex/ AC Meßverfahrens

Vor dem Hintergrund der laufenden Diskussionen um die Neubewertung der Umweltwirkungen des Quecksilbers (Hg) sollen Verfahren weiter entwickelt werden, die es gestatten, geringe Quecksilber-emissionen aus kohlegefeuerten Kraftwerken mit geringen Aufwand betriebssicher zu überwachen. Ein wesentliches Ziel des Vorhabens ist es, die Kurzzeit-methode zur quantitativen und differenzierten Hg(0) / Hg(ox)-Messung mit Dowex/Aktivkohle (AC)-Sammlern zukünftig als validiertes Alternativ-Verfahren für die manuelle Überprüfung von Quecksilbergehalten in Feuerungsabgasen einsetzen zu können. Dazu soll zunächst eine abgesicherte Arbeitsvorschrift der Geräte, Reagenzien, Probenahme und analytischen Auswertung erstellt werden. Dann soll durch eine interne Kalibrierung anhand von Feldmessungen, an denen verschiedene Messinstitutionen beteiligt werden, eine Kurzzeit-variante dieses Verfahrens mit dem nasschemischen Referenzverfahren nach DIN EN 13211 verglichen und validiert werden. Zusätzlich sollen Vergleichsmessungen mit der EPA Methode 30B sowie einem kontinuierlichen Hg-Messgerät neuerer Bauart durchgeführt werden. Zudem soll im Vorhaben der Einsatz des Dowex/AC Verfahrens für die Ermittlung der Hg-Speziesverteilung in den Rohgasen vor REA-Wäschern abgesichert werden. Die Kenntnis der Hg-Spezies ist von grundlegender Bedeutung für die Optimierung der Abgasreinigung im Hinblick auf die Mitabscheidung von Quecksilber.

Projektleiter: Prof. Dr. Heinz Köser

Projektbearbeiter: Dipl.-Ing. Jan Schütze

Förderer: Industrie; 01.05.2011 - 30.01.2012

Minderung von Spurenelementemissionen in Feuerungsabgasen

In den REA-Wäschern eines Kraftwerkes wird ein hoher Anteil der wasserlöslichen oxidierten Quecksilber-Spezies im Abgas (Hg_{ox}-Anteil ca. 90%) nach dem Übergang in die Waschsuspension wieder in elementarer Form re-emittiert. Die Abscheidung des Quecksilbers in den Wäschern ist infolge dieser Re-Emission unbefriedigend. Derartig hohe Re-Emissionen sind ungewöhnlich und bisher nicht in der Literatur beschrieben. Folglich sind auch keine Standard-Maßnahmen zur Beherrschung dieses Phänomens verfügbar. Im Rahmen des Vorhabens sollen folgende Betriebsversuche geplant zur Minderung der Hg-Emissionen begleitet werden: -

- Betrieb der Waschsuspensionsaufbereitung mit erhöhter Hg-Ausschleusung
- Betrieb der REA-Wäscher in Ca(OH)₂-CaCO₃-Hybrid Fahrweise
- Betrieb der REA-Wäscher mit TMT Zugabe
- Nutzung des Aktivkohleflugstromverfahrens für die Hg-Minderung

Zudem ist vorgesehen, die potentielle Spurenelement-Emissionen bei der Stabilisatherstellung zu bewerten.

Projektleiter: Prof. Dr. Heinz Köser

Projektbearbeiter: Dipl.-Ing. Katharian Zeng

Förderer: Industrie; 08.08.2010 - 15.08.2012

Quecksilberoxidationsaktivität von neuartigen SCR-DeNO_x-Katalysatoren

Von SCR-DeNO_x Katalysatoren in Kraftwerken wird heute ebenfalls eine hohe Aktivität zur Oxidation von elementarem Quecksilber in Abgasen gefordert.

Ziel des Projektes ist es, die Quecksilber-Oxidationsaktivität eines neuartigen Katalysators unter Modellbedingungen zu ermitteln, die die typischen Betriebsbedingungen in Rohgasen von kohlegefeuerten Kraftwerken abdecken.

Projektleiter: Prof. Dr. Heinz Köser

Projektbearbeiter: Dipl.-Ing. Jan Schütze

Förderer: Industrie; 01.08.2011 - 30.01.2012

Untersuchung zum Einfluss der Bromid-Dosierung auf das Redoxpotential und die Hg-Abscheidung in REA-Wäschern von Kraftwerken

Versuche in verschiedenen Kraftwerken belegten die Wirkung von Iodid als Inhibitor der metallkatalytischen Schwefeldioxid-Oxidation in REA-Wäschern. Durch Iodidzugabe lässt sich folglich das durch die Schwefeloxide maßgeblich bestimmte Redoxpotential in REA-Wäschern in hohen Bereichen steuern. Mit dem Redoxpotentials verändert sich die Hg-Wäscherchemie deutlich:

- Hohe Redoxpotentiale sind durch geringe Iodidkonzentration (<5 mg/l) geringe Hg-Dampfdrücke/Re-Emission sowie hohe gelöste Hg_{aq}-Konzentration in der Waschsuspension (und damit geringe Hg-Gehalte im Gips) gekennzeichnet.

- Ein geringes Redoxpotential infolge der erhöhten Iodidgehalte führte zu verstärkten Hg-Konzentrationen an den Suspensionsfeinteilen (und damit im Gips), einem höheren Weißgrad und höheren Hg-Dampfdrücken/Emissionen.

Iodid ist jedoch eine vergleichsweise teure Prozesschemikalie. Im vorliegenden Projekt zur Steuerung und des Redoxpotentials soll die preiswertere Bromidzugabe zur Wäschersuspension in einem Kraftwerk getestet werden.

Projektleiter: Dipl.-Ing. Antje Stresing

Projektbearbeiter: Dipl.-Ing. Klaus Walter, Dr.-Ing. Michael Jacob, Prof. Dr.-Ing. habil. Dr. h.c. Lothar Mörl

Förderer: Bund; 01.11.2010 - 30.09.2012

INWiTherm Induktiv beheizte Wirbelschichten zur energieeffizienten thermischen Behandlung von feindispersen Stoffsysteme

Ziel des Projektes ist eine neue Technologie für die hoch effiziente Erwärmung von elektrisch beheizten Wirbelschichten zu entwickeln. Dahinter steht die Idee, elektrisch leitfähige aber chemisch inerte Partikel in die Wirbelschicht einzubringen und gemeinsam mit dem zu behandelnden Substrat zu fluidisieren. Über einen anlagenintegrierten Induktor soll die Wirbelschicht mit einem elektro-magnetischen Wechselfeld beaufschlagt werden, was zur induktiven Erwärmung dieser Inertkörper führt. Diese geben nun aus dem Inneren der Wirbelschicht heraus ihre Wärme über eine insgesamt sehr große Oberfläche an das Substrat ab, wodurch eine sehr hohe Energiedichte und im Ergebnis hoch effiziente Wärmeübertragung erreicht werden kann.

6. Eigene Kongresse, wissenschaftliche Tagungen und Exponate auf Messen

7. Veröffentlichungen

Begutachtete Zeitschriftenaufsätze

Hauptmanns, Ulrich

Brände und Explosionen im Rahmen der Risikoermittlung

In: Chemie - Ingenieur - Technik. - Weinheim: Wiley-VCH Verl, Bd. 84.2012, 9, S. 1520-1530; ... [weitere Infos](#); 2012
[Imp.fact.: 0,589]

Krause, Ulrich

Fundamentals of fire evolution of solid flammable matters

In: EUSAS journal. - Duisburg, 7, 2012; ... [weitere Infos](#); 2012

Krause, Ulrich; Grosshandler, William; Gritz, Louis

The international FORUM of fire research directors - a position paper on sustainability and fire safety

In: Fire safety journal. - Kidlington, Oxford: Elsevier, Bd. 49.2012, S. 79-81; ... [weitere Infos](#); 2012
[Imp.fact.: 1,017]

Lerena, Pablo; Auerkari, Pertti; Knaust, Christian; Vela, Iris

Approaches towards a generic methodology for storage of hazardous energy carriers and waste products

In: Journal of risk research. - London [u.a.]: Taylor & Francis, 2012; ... [weitere Infos](#); 2012
[Imp.fact.: 0,880]

Marx, Marcus; Hahn, Sarah

CONRIS - Netzwerk internationaler Sicherheitsstudiengänge

In: Technische Sicherheit. - Düsseldorf: Springer-VDI-Verl, Bd. 2.2012, 1/2, S. 49-50; 2012

Buchbeiträge

Hauptmanns, Ulrich

Do we really want to calculate the wrong problem as exactly as possible? - the relevance of initial and boundary conditions in treating the consequences of accidents

In: Process and plant safety. - Weinheim: Wiley-VCH, S. 333-346, 2012; 2012

Hauptmanns, Ulrich

Kriterien für die Beurteilung von Gefährdungen durch technische Anlagen

In: Sicherheitswissenschaftliches Kolloquium 2010 - 2011. - Wuppertal: Inst. ASER, S. 85-120, 2012 - (Schriftenreihe des Instituts ASER e.V.; Forschungsbericht-Nr. 27)

Kongress: Sicherheitswissenschaftliches Kolloquium; 65-74 (Wuppertal): 2010-2011.; 2012

Hauptmanns, Ulrich

Plant and process safety

In: Ullmann's encyclopedia of industrial chemistry. - Weinheim [u.a.]: Wiley-VCH, insges. 4 S., 2012; ... [weitere Infos](#); 2012

Krause, Ulrich; Rabe, Frederik; Knaust, Christian

Modelling fire scenarios and smoke migration in structures

In: Process and plant safety. - Weinheim: Wiley-VCH, 2012; 2012

Dissertationen

Bernhardt, Alexander; Hauptmanns, Ulrich [Gutachter]; Dassow, Jürgen [Gutachter]

Graphentheoretische Modellierung von Entfluchtungsvorgängen unter Berücksichtigung des Zusammenwirkens baulicher Gegebenheiten, Personeneigenschaften und Entscheidungsverhalten. - Zugl.: Magdeburg, Univ., Fak. für Verfahrens- und Systemtechnik, Diss., 2012; Berlin: Pro Business; XVIII, 123 S.: graph. Darst., ISBN 978-3-86386-961-8; 2012

Lorenz, Nadine; Krause, Ulrich [Gutachter]; Specht, Eckehard [Gutachter]

Vereinfachtes eindimensionales Modell zur Simulation der Erderwärmung durch anthropogenes Kohlenstoffdioxid. - Magdeburg, Univ., Fak. für Verfahrens- und Systemtechnik, Diss., 2012; XVI, 130, S.: graph. Darst.; 2012

INSTITUT FÜR CHEMIE

Universitätsplatz 2, 39106 Magdeburg
Tel. +49 (0)391 67 58672, Fax +49 (0)391 67 52223
ich@uni-magdeburg.de

1. Leitung

Prof. Dr. rer. nat. habil. Frank T. Edelmann
Jun.-Prof. Dr. Edgar Haak
Prof. Dr. rer. nat. Franziska Scheffler (Institutsleiterin)
Prof. Dr. rer. nat. habil. Dieter Schinzer
Prof. Dr. rer. nat. habil. Helmut Weiß
Dr. Volker Lorenz
Frau Ines Sauer

2. Hochschullehrer

Prof. Dr. rer. nat. habil. Frank T. Edelmann
Hon.-Prof. Dr. Ernst R.F. Gesing
Jun.-Prof. Dr. Edgar Haak
Prof. Dr. rer. nat. Franziska Scheffler
Prof. Dr. rer. nat. habil. Dieter Schinzer
Prof. Dr. rer. nat. habil. Helmut Weiß
PD Dr. rer. nat. habil. Jochen Vogt

3. Forschungsprofil

AG Anorganische Chemie

- Siliciumchemie: Silsesquioxane, Metallasilsesquioxane
- Präparative und Strukturuntersuchungen an Organometallkomplexen der Lanthanoide
- Koordinationschemie der f-Elemente
- Metallorganische Chemie der frühen Übergangsmetalle
- NMR-Untersuchungen an paramagnetischen Lanthanoidkomplexen
- Röntgenstrukturanalysen an Organolanthanoidkomplexen
- Untersuchungen zur Homogenkatalyse mit Lanthanoidmetallocenen
- Entwicklung neuer Metallocenkatalysatoren für die Olefinpolymerisation
- Entwicklung von Modellverbindungen für lanthanoiddotierte Zeolith-Katalysatoren
- Koordinationschemie von Fulvenen und Azulenen
- Synthese von molekularen Vorstufen für MOCVD-Verfahren (III/V- und II/VI-Halbleiter, Metallnitride, Metallboride, Strontium-Bismut-Tantalat (SBT), Blei-Zirconat-Titanat (PZT))
- Untersuchungen zur bioanorganischen Chemie der Lanthanoide
- Spezielle Aspekte der Hauptgruppenchemie (Stannylene, Plumbylene, nichtklassische Mehrfachbindungen)
- Präparative Fluorchemie
- Ferrocenchemie

- Supramolekulare Strukturchemie von Organozinnverbindungen
- Koordinationschemie von Oxo- und Cyanokohlenstoffanionen

AG Organische Chemie

- Entwicklung moderner Synthesemethoden: Diastereo- und enantioselektive C-C-Verknüpfungen
- Metallorganische Chemie: Synthese und Reaktionen von Chrom-, Mangan-, Silicium- und Zinn-Verbindungen
- Synthese von Heterocyclen durch Tandemreaktionen
- Wirkstoffsynthese: Stereoselektive Synthese von biologisch aktiven Substanzen
- Struktur-Wirkungs-Beziehungen
- Naturstoffchemie: Synthese von Terpenen, Alkaloiden und Macroliden
- Computeranwendungen in der Chemie: Reaktionsdatenbanken und Molecular Modelling

AG Physikalische Chemie

- "Membranunterstützte Reaktionsführung": Adsorption, Reaktion und Desorption an anorganischen, katalytisch aktivierten Membranmaterialien
- Charakterisierung vanadium- und eisenhaltiger Katalysatoren mit Photoelektronenspektroskopie und Infrarotspektroskopie
- Ceroxid-basierte Abgaskatalysatoren: Einfluß von Dotierung, Temperatur, Reduktionsgrad und Leerstellenkonzentration auf katalytische Aktivität, Oberflächenstruktur und -dynamik
- "Inverse Katalysatoren": Beeinflussung der katalytischen CO-Oxidation auf Edelmetallen durch Ceroxid
- Katalytische Reaktionen auf atomarer Skala
- Struktur, Thermodynamik und Dynamik reiner und adsorbatbedeckter Isolator-Einkristallflächen

AG Technische Chemie

- Katalysatorentwicklung: Zeolithe und zeolithartige Materialien, Optimierung der Struktur, Oberflächenchemie, Morphologie
- Beschichtungen: Trägergestützte (Reaktiv-)Kristallisation von katalytisch aktiven Systemen
- Zelluläre Kompositmaterialien: katalytisch aktive Keramik- und Glasformkörper durch neue Prozessierungsverfahren
- Thermische Energiespeicherung: Support für Wärmespeichermaterialien, neuartige (keramische und hybride) Wärmespeichermaterialien
- Thermoelektrika: Prozessierung von thermoelektrischen Pulvern mittels Techniken aus der keramischen Fertigung
- Photokatalyse: Entwicklung und Testung monolithisch getragener Katalysatoren auf Titanoxidbasis

4. Serviceangebot

NMR-Messungen verschiedener Kerne an Feststoffen und Flüssigkeiten

Röntgenpulverdiffraktometrie (XRD) in Reflexion, Transmission und Kapillare, auch temperaturabhängig

Stickstoff-Tieftemperaturadsorption

Katalysatorrestung

5. Forschungsprojekte

Projektleiter: Prof. Dr. Franziska Scheffler

Projektbearbeiter: Dr. Alexandra Lieb

Förderer: Haushalt; 01.07.2009 - 31.12.2012

Darstellung und Charakterisierung neuer Boroarsenate

Boroarsenate ähneln strukturell den Silicaten, da beide Verbindungsklassen als Grundbaueinheiten TO₄-Einheiten (T = B, As, Si) aufweisen. Durch die nahezu unbegrenzten Möglichkeiten durch Eckenverknüpfung aus diesen Tetraederbausteinen verschiedene strukturelle Baueinheiten zu erhalten ist eine unendlich große Variabilität dieser Verbindungsklassen denkbar. Solche Gerüstverbindungen unterschiedlicher chemischer Natur werden in vielerlei Hinsicht zur Anwendung gebracht. Man unterscheidet dabei nicht-poröse und poröse Systeme, wobei die porösen Systeme z. B. zur Gasreinigung- und -speicherung oder zur heterogenen Katalyse eingesetzt werden. Nicht-poröse Systeme können z. B. als Grundstrukturen für Lumineszenzkonversionsfarbstoffe dienen. Der Einbau von unterschiedlichen Tetraederzentren in Tetraedernetzwerkstrukturen bedingt oft die Ausbildung von Gerüsten mit modifizierten Eigenschaften, die somit besser an potentielle Anwendungen angepasst sein können. Auf dem Gebiet der Boroarsenate (T = B, As) sind erst relativ wenige Verbindungen ausreichend charakterisiert. Durch die Untersuchung der Boroarsenate soll das strukturelle Potential der Verbindungsklasse ausgelotet werden. Hierbei werden die neuen Strukturen sowohl mit Röntgen- als auch mit Neutronenbeugung untersucht, wobei gekoppelte Verfeinerungen zur genaueren Lokalisierung von Wasserstoffatomen angewendet werden. Wasserstoffatome liegen als Gerüst-OH-Gruppen oder in eingelagerten Wassermolekülen vor und können die Eigenschaften der Verbindungen einschneidend beeinflussen.

Projektleiter: Prof. Dr. Franziska Scheffler

Projektbearbeiter: Susan Muschalle

Förderer: BMWi/AIF; 01.04.2010 - 28.02.2013

Energieeffiziente Thermoelektrische Generatoren durch Material- und Fertigungsoptimierung

Basierend auf dem prinzipiellen Funktionsnachweis der Herstellung thermoelektrisch aktiver Schichten aus Suspensionen, werden thermoelektrische Tapes mittels Tape casting und weiteren Druck- und Beschichtungsverfahren erzeugt. Ziel ist es eine kostengünstige Technologie für die großflächige Verarbeitung von TE-Materialien zu entwickeln.

Projektleiter: Prof. Dr. Franziska Scheffler

Projektbearbeiter: Dr. Alexandra Lieb

Förderer: Haushalt; 01.07.2010 - 30.06.2013

Silangestützte MOF-Schichten

Die Substanzklasse der metall-organischen Koordinationspolymere steht momentan im Fokus vieler weltweiter Forschungsaktivitäten, hauptsächlich im Hinblick auf die Anwendbarkeit solcher Systeme bei Gasspeicherung und -separation, der Katalyse oder der Wirkstofffreisetzung (drug delivery). MOFs bestehen aus einem organischen Teil (Linker/Ligand) und Metall-Ionen oder Metalloxid-Clustern (Knoten), welche sich zu dreidimensionalen Netzwerken verbinden. Sie können sehr große (innere) Oberflächen aufweisen, die genutzt werden können. Hierbei ist besonders interessant, dass durch den modularen, hybriden Aufbau der MOFs eine einfache post-synthetische Modifizierung ermöglicht wird. Da MOFs bei der Synthese stets als feine Pulver anfallen, sind sie zumeist in ihrer as-synthesised-Form für eine industrielle Anwendung nicht geeignet. Es ist deshalb nötig die Materialien durch Trägerung oder Formgebung in eine besser verwendbare Form zu bringen. Eine Möglichkeit der Trägerung stellt die silangestützte Beschichtung von Gläsern dar, bei der das MOF-Material durch geeignete Zwischenschichten chemisch auf dem Untergrund verankert wird. Hierbei können speziell geformte Substrate zum Einsatz kommen, die nach der Beschichtung den Einsatz der MOF-Materialien in verschiedenen Reaktortypen ermöglichen.

Projektleiter: Prof. Dr. Franziska Scheffler

Projektbearbeiter: Susann Holze

Förderer: Haushalt; 01.10.2008 - 31.12.2012

TiO₂-beschichtete Glasschäume für die Abwasserreinigung

TiO₂-Nanopartikel stellen effiziente photoaktive Katalysatoren für die Zersetzung von organischen Schadstoffen dar. Die Fixierung der Partikel auf einem zellularen (porösen), lichtdurchlässigen Festkörper könnte den technischen Einsatz dieser Materialien wesentlich vereinfachen und die Effizienz erheblich steigern. Hierzu werden polymerabgeleitete

keramische Schäume entwickelt, denen Glas als Füllstoff zugesetzt wird. Über die Variation der Ausgangsstoffe und der Prozessbedingungen können Struktur und Eigenschaften der Schaumkomposite in weiten Bereichen beeinflusst werden.

Projektleiter: Prof. Dr. Frank T. Edelmann

Projektbearbeiter: Ronny Syre

Förderer: DFG; 01.11.2011 - 31.10.2015

Atomlagenabscheidung von Germanium-Antimon-Tellurid

Germanium-Antimon-Tellurid-Schichten zeigen eine hohe, mehrere Größenordnungen betragende Änderung des Schichtwiderstands bei Übergang von der kristallinen in die amorphe Phase und umgekehrt. Diese Eigenschaft lässt sich zur nicht-flüchtigen Speicherung von Informationen benutzen. Eine mögliche bedeutende Anwendung dieser Schichten ist in den sogenannten PCRAMs (Phase Change Random Access Memory) gegeben. Im Rahmen des beantragten Vorhabens sollen dünne Schichten aus Germanium- Antimon-Tellurid ($\text{Ge}_2\text{Sb}_2\text{Te}_5$, abgekürzt: GST) mittels Atomlagenabscheidung unter Verwendung von neu für diesen Prozess zu entwickelnder Germanium-, Antimon- und Tellur- Precursoren auf Amidinat- und Guanidinatbasis niedergeschlagen und charakterisiert werden. Die Charakterisierung der hergestellten Materialien erfolgt hinsichtlich ihrer Zusammensetzung, ihrer Struktur, ihrer Morphologie und ihrer elektrischen Eigenschaften. Zur Charakterisierung des Übergangs von der amorphen zur kristallinen bzw. von der kristallinen zur amorphen Phase und des Speichereffekts sollen fein strukturierte Testbauelemente bestehend aus Metall/GST-Schicht/Metall-Widerstandsstrukturen untersucht werden.

Projektleiter: Prof. Dr. Frank T. Edelmann

Projektbearbeiter: Peter Dröse, Nicole Harmgarth

Förderer: Land (Sachsen-Anhalt); 01.07.2010 - 30.06.2015

Carboranylamidinate

Die in unserem Arbeitskreis entwickelten Carboranylamidinat-Anionen stellen ein völlig neuartiges multifunktionelles Ligandensystem dar. Im Rahmen des Projekts sollen die Ligandeneigenschaften dieser Anionen untersucht und Komplexverbindungen mit Hauptgruppenelementen, Übergangsmetallen und f-Elementen hergestellt und charakterisiert werden.

Projektleiter: Prof. Dr. Frank T. Edelmann

Projektbearbeiter: Dr. Anja Edelmann, Dr. Volker Lorenz

Förderer: DFG; 01.05.2010 - 30.04.2015

Heterobimetallische Disiloxandiolate und Metallasilsesquioxane der Lanthanoide - Neuartige Metallakronen und Clustermoleküle

Für den zweiten Antragszeitraum des laufenden Forschungsvorhabens ist geplant, die mit Hilfe von anionischen Lithiumdisiloxandiolat-Liganden und Silsesquioxanderivaten erschlossene Klasse neu-artiger Organolanthanoidkatalysatoren auszuweiten. Hauptziel dieser Untersuchungen ist, diese Verbindungen, die als "anorganische Lanthanoidmetallocene" bezeichnet werden können, als Ausgangspunkt für die Synthese und strukturelle Charakterisierung hochreaktiver Metallalkyle und -hydride auf der Basis von Lithiumdisiloxandiolat- und Silsesquioxanliganden zu nutzen. Ein weiterer Schwerpunkt ist die Untersuchung der Reaktivität (Katalyse) und des Synthesepotentials der dargestellten Disiloxandiolat- und Silsesquioxan-komplexe. Weitere Teilziele umfassen die Synthese neuartiger heterobimetallischer Lanthanoidkomplexe mit Si-O-Liganden sowie die Darstellung von Disiloxandiolat- und Silsesquioxan-Komplexen zweiwertiger Lanthanoide.

Projektleiter: Prof. Dr. Frank T. Edelmann

Projektbearbeiter: Girma Kibatu Berihie, Thomas Wagner, John W. Gilje (James Madison University)

Förderer: Haushalt; 01.04.2010 - 31.03.2014

Koordinationschemie des Acrylamids und N-Pyrazolylpropanamids

Acrylamid ist aufgrund seines Vorkommens in frittierten Lebensmitteln unter Umweltgesichtspunkten in das öffentliche Blickfeld gerückt. Dieses Projekt, angesiedelt im Bereich der bioanorganischen Chemie, soll mithelfen, die Wechselwirkung zwischen Acrylamid und biologisch relevanten Übergangsmetall-Ionen besser zu verstehen. Eine aktuelle Weiterentwicklung beinhaltet die Untersuchung der Koordinationschemie von neuartigen Liganden, die sich vom Acrylamid ableiten. Dazu gehören insbesondere das N-Pyrazolylpropanamid und das N-Triazolylpropanamid.

Projektleiter: Prof. Dr. Frank T. Edelmann
Projektbearbeiter: Dr. Volker Lorenz
Kooperationen: Astrium GmbH; Dow Olefinverbund GmbH; Dracosa AG Bitterfeld-Wolfen; Lapua GmbH, Schönebeck
Förderer: DFG; 01.01.2012 - 31.12.2015

Metallasilsesquioxane

Funktionalisierte Disiloxane und Silsesquioxane als Bausteine für neuartige komplexe Moleküle, Katalysatoren und Polymermaterialien auf Si-O-Basis. Im Rahmen des geplanten Forschungsvorhabens sollen monofunktionalisierte bzw. monoanionische Disiloxane und Silsesquioxane zum Aufbau komplexer Moleküle, Katalysatoren und Polymermaterialien auf Si-O-Basis verwendet werden. In einem ersten Schwerpunkt des Vorhabens soll mit Hilfe von anionischen Lithiumdisiloxandiolat-Liganden eine Klasse neuartiger f-Elementkomplexe etabliert werden, die als "anorganische Lanthanoidmetallocene" bezeichnet werden kann. Ziel dieser Untersuchungen ist die Synthese hochreaktiver Metallalkyle und -hydride auf der Basis von Siloxandiolat-Liganden. Im Zweiten Schwerpunkt spielen die monofunktionalisierten Silsesquioxanderivate (c-C 6 H 11) 7 Si 8 O 12 (OH) (3) und (C6H11)7Si8O12(OLi) (4) eine zentrale Rolle- Mit ihrer Hilfe sollen neuartige, zwei- und dreidimensionale komplexe Moleküle wie z.B. Silsesquioxan-substituierte anorganische Ringe, Käfige und Dendrimere sowie Polymermaterialien aufgebaut werden. Durch Plasmabehandlung sollen Metallasilsesquioxane in neuartige poröse Materialien mit interessanten Adsorptions- und Katalysatoreigenschaften umgewandelt werden. Silsesquioxane und Metallasilsesquioxane sind technisch in vielerlei Hinsicht bedeutsam. Silsesquioxane (auch als POSS bezeichnet) dienen als Additive für neuartige Hochleistungspolymere ("nanostructured polymers"), die u.a. als hitzebeständige Polymere in der Raumfahrttechnik eingesetzt werden können. Weiterhin haben Silsesquioxane interessante Flammgeschutzeigenschaften. Metallasilsesquioxane sind interessante Homogenkatalysatoren, z.B. für Oxidationsreaktionen. Durch Pyrolyse, aber auch durch Plasmabehandlung, lassen sie sich in neuartige Heterogenkatalysatoren umwandeln.

Projektleiter: Prof. Dr. Frank T. Edelmann
Projektbearbeiter: Dr. Anja Edelmann, Dr. Volker Lorenz
Förderer: DFG; 01.06.2008 - 31.05.2013

Multidecker-Sandwich-Komplexe der Lanthanoide

Im Rahmen des geplanten Forschungsvorhabens soll die bislang kaum bekannte Chemie des Cerocens und seiner Derivate erforscht werden. Hauptziel dieser Untersuchungen ist die Synthese und strukturelle Charakterisierung neuartiger Organolanthanoidverbindungen, wie beispielsweise Tetradecker-Sandwichkomplexe. Weitere Aspekte des Forschungsvorhabens beinhalten Versuche zur Synthese von Cerocenanalogen anderer Lanthanoidelemente sowie der ersten Halbsandwich-Komplexe mit formal vierwertigem Cer.

Projektleiter: Prof. Dr. Frank T. Edelmann
Projektbearbeiter: Peter Dröse, Farid Sroor
Förderer: Land (Sachsen-Anhalt); 01.07.2010 - 30.06.2014

Organometall- und Koordinationsverbindungen Cers und Europiums

Das Projekt beinhaltet die Synthese und Strukturaufklärung neuartiger Organometall- und Koordinationsverbindungen des Cers. Ein weiteres wichtiges Ziel des Projekts ist die Weiterentwicklung der Koordinationschemie von Cer(IV) im Hinblick auf mögliche katalytische Anwendungen. Weiterhin sollen neuartige Komplexverbindungen des Europiums synthetisiert und auf ihre Lumineszenzeigenschaften hin untersucht werden.

Projektleiter: Prof. Dr. Frank T. Edelmann
Projektbearbeiter: Peter Dröse
Förderer: Land (Sachsen-Anhalt); 01.10.2009 - 30.09.2014

Phenyljodchlorid - Ein innovatives Reagens zur Synthese von Cer(IV)-Verbindungen

Im Rahmen eigener Vorarbeiten konnte kürzlich gezeigt werden, dass das leicht zugängliche Phenyljodchlorid, PhICl₂, ein innovatives Reagens in der Lanthanoidchemie darstellt und insbesondere für die Synthese von funktionalisierbaren Komplexverbindungen der vierwertigen Cers geeignet ist. Das bekannte Cer(IV)amid Im Rahmen eigener Vorarbeiten konnte kürzlich gezeigt werden, dass das leicht zugängliche Phenyljodchlorid, PhICl₂, ein innovatives Reagens in der

Lanthanoidchemie darstellt und insbesondere für die Synthese von funktionalisierbaren Komplexverbindungen der vierwertigen Cers geeignet ist. Das bekannte Cer(IV)amid $[(\text{Me}_3\text{Si})_2\text{N}]_3\text{CeCl}$ sowie das neuartige Cer(IV)amidinat 3CeCl konnten unter Verwendung von PhICl_2 leicht und mit guten Ausbeuten synthetisiert werden. Im Rahmen des geplanten Forschungsvorhabens soll zunächst die neuartige Substanzklasse der Cer(IV)amidinate eingehend erforscht und strukturell charakterisiert werden. Gegebenenfalls sollen auch ringsubstituierte Derivate des Phenyljodchlorids zum Einsatz kommen. Ausgehend von den Cl-funktionalisierten Cer(IV)amidinen soll versucht werden, erstmals Organocer(IV)-Verbindungen mit π -Alkyl-Liganden zu synthetisieren. Dieses Ziel könnte durch Verwendung nicht-reduzierender Alkylierungsmittel wie ZnMe_2 oder SnMe_4 erreicht werden. Im weiteren Verlauf des geplanten Forschungsvorhabens soll versucht werden, mit Hilfe des Phenyljodchlorids neuartige Organocer(IV)-Komplexe mit Cyclopentadienyl- oder Cyclooctatetraenyl-Liganden zu erschließen.

Projektleiter: Prof. Dr. Frank T. Edelmann

Projektbearbeiter: Raik Deblitz, Gesine Stock

Förderer: Haushalt; 01.01.2010 - 31.12.2014

Stickstoffreiche energetische Verbindungen

Das Projekt beinhaltet die Entwicklung und Erprobung stickstoffreicher energetischer Verbindungen für die Pyrotechnik sowie für Zündsätze in Kleinkalibermunition. Von besonderem Interesse sind dabei neuartige umweltfreundliche (weil schwermetallfreie) stickstoffreiche Verbindungen.

Projektleiter: Prof. Dr. Frank T. Edelmann

Projektbearbeiter: Farid Sroor

Förderer: DAAD; 01.04.2011 - 31.10.2014

Synthese von Cerdioxid-Nanopartikeln in Ionischen Flüssigkeiten

Ziele des Projekts ist die Synthese und Charakterisierung von Cerdioxid-Nanopartikeln in ionischen Flüssigkeiten als Reaktionsmedium. Als Ausgangsmaterialien sollen neuartige Cer(IV)-Komplexes mit Amidinat- und Disiloxandiolat-Liganden verwendet werden.

Projektleiter: Prof. Dr. Helmut Weiß

Förderer: DFG; 01.07.2009 - 31.12.2013

Aufklärung der Struktur und Absolutbedeckung des Adsorbates Wasser auf definierten NaCl(100)-Einkristallflächen

Das Adsorptionssystem Wasser auf definierten NaCl(100)-Einkristallflächen ist aufgrund seiner Relevanz für verschiedenste Bereiche experimentell wie auch theoretisch wiederholt untersucht worden. Für die gesättigte erste Lage wurden zwei verschiedene Strukturen beobachtet – eine (1x1)- und eine c(4x2)-Struktur. Es konnte gezeigt werden, dass erstgenannte erst durch Elektro-neneinfluss (z.B. bei Beugung langsamer Elektronen, LEED) irreversibel in die c(4x2)-Struktur umgewandelt wird. Der Mechanismus ist nicht verstanden, kann aber von großer Bedeutung auch für andere Systeme sein, da LEED eine elementare Untersuchungsmethode zur Strukturauflösung ist. Unklarheit herrscht auch über den Bedeckungsgrad; hier wurden für die erste Lage Wasser zwischen 0,5 und 3 Moleküle je NaCl(100)-Elementarzelle vorgeschlagen. Theoretische Untersuchungen trugen bislang wenig zur Klärung bei. Das vorliegende Projekt soll jetzt, durch Bündelung von LEED (mit I(V)-Analyse) u.a. mit Helium-Atomstrahlstreuung, Infrarot-spektroskopie und Röntgen-Photoelektronenspektroskopie, einen unter vergleichbaren Bedingungen gewonnenen, konsistenten Datensatz für die erste Wasserlage auf NaCl(100)-Einkristallflächen liefern, die Absolutbedeckung und Struktur klären, sowie den Mechanismus der elektroneninduzierten Strukturumwandlung aufdecken.

Projektleiter: Prof. Dr. Helmut Weiß

Projektbearbeiter: Dr. Jochen Vogt, Dipl.-Phys. Stephan Härtel

Förderer: Haushalt; 01.03.2008 - 28.02.2012

Fourier-Transform-Infrarotspektroskopie an Physisorbaten auf wohldefinierten Isolator-Einkristalloberflächen

Im Rahmen des Projektes wird auch weiterhin die Adsorption verschiedener kleiner Moleküle wie CO , CO_2 , H_2O und anderen an definierten, gespaltenen Isolator-Einkristallflächen untersucht. Diese Systeme sind einerseits für das grundlegende Verständnis der Physisorption, darüber hinaus aber auch für Bereiche wie Atmosphärenchemie oder Geochemie bis hin zur Astrophysik interessant. Infrarotspektren werden hierbei mit polarisiertem Licht als Funktion von

Belegung, Druck und Temperatur gemessen; hieraus ergeben sich Informationen z.B. über die "Störung" der Moleküle durch die Wechselwirkung mit dem Substrat, die Zahl der Moleküle pro Elementarzelle in geordneten Systemen, die Homogenität der Adsorbate, Adsorptionsgeometrien, die Ausbildung zweidimensionaler Strukturen, Adsorptionsisothermen und Adsorptionswärmen, und anderes mehr. Die Messungen werden teilweise komplementiert durch LEED-Untersuchungen.

Projektleiter: Prof. Dr. Helmut Weiß

Projektbearbeiter: Dr. Jochen Vogt, Dipl.-Phys. Stephan Härtel

Förderer: Haushalt; 01.01.2010 - 31.12.2014

Strukturen und Phasenumwandlungen molekularer Adsorbate an Isolatoren mittels höchstempfindlicher Beugung langsamer Elektronen

Ziel des Projektes, das jetzt bereits seit mehreren Jahren (weiter)geführt wird, sind Beiträge zum Verständnis der Adsorption kleiner Moleküle an definierten, gespaltenen Isolator-Einkristallflächen mit Hauptgewichten auf einer allgemeinen Untersuchung der Ausbildung geordneter zweidimensionaler Strukturen in diesen Adsorbaten, der Charakterisierung von Phasenumwandlungen und der Bestimmung lokaler Absolutgeometrien der untersuchten Oberflächen. Von Bedeutung ist in diesem Zusammenhang natürlich auch die umfängliche Charakterisierung der unbedeckten Isolator-Einkristallsubstrate selbst. Als Untersuchungsmethode kommt in erster Linie die Beugung langsamer Elektronen (LEED) mit einem LEED-System mit bildverstärkenden Vielkanalplatten zum Einsatz. Die Messungen werden teilweise durch die Fourier-Transform-infrarotspektroskopische (FTIRS) Charakterisierung der Adsorbate, teilweise auch durch die Kombination von LEED mit Helium-Atomstrahlstreuung (HAS) ergänzt.

Projektleiter: Prof. Dr. Helmut Weiß

Projektbearbeiter: Dipl.-Phys. Birgit Vogt

Förderer: Haushalt; 01.03.2010 - 28.02.2013

Raster-Tunnel- und Raster-Kraftmikroskopie an wohldefinierten Oberflächen

Im Rahmen des haushaltsfinanzierten Projektes werden Untersuchungen an wohldefinierten Einkristalloberflächen mittels eines VT STM/AFM durchgeführt. Zunächst ist hierfür die Inbetriebnahme des Gerätes und die routinemäßige Erlangung atomarer Auflösung erforderlich. Abhängig vom Fortschritt sind dann Untersuchungen an anderen für den Haupt-Forschungsgebiet des Arbeitskreises (Adsorption insbesondere an definierten Isolatoroberflächen) geplant.

Projektleiter: Jun. Prof. Dr. Edgar Haak

Förderer: Sonstige; 01.04.2011 - 31.03.2014

Organometallkatalyse mit redox-gekoppelten Ligandensystemen

Flexible Methoden zur Darstellung komplexer Strukturen aus einfachen und leicht zugänglichen Edukten sind von großem Interesse. Unser Forschungsschwerpunkt liegt auf der Entwicklung neuer Übergangsmetall-katalysierter Transformationen, die atomökonomische Zugänge zu komplexen biologisch relevanten Substanzklassen eröffnen. Ein auf mechanistischen Untersuchungen basierendes rationales Katalysator- und Verfahrens-Design sowie sequentiell katalysierte Domino-Prozesse sind dabei von wesentlicher Bedeutung. Die Demonstration des Potentials der entwickelten katalytischen Verfahren erfolgt im Rahmen der Naturstoffsynthese und der flexiblen Darstellung diverser Naturstoffanaloga. Als Katalysatoren dienen Übergangsmetall-Komplexe redox-gekoppelter Ligandensysteme, vorrangig funktionalisierte Ruthenium-Cyclopentadienon-Derivate. Aufgrund der elektronischen Kopplung des Dienon-Liganden und seiner basischen Koordinationsstelle bieten solche Komplexe außergewöhnliche Optionen hinsichtlich katalytischer Transformationen bifunktionaler Substrate wie den einfach sowie in großer Breite zugänglichen Propargyl- und Allylalkoholen. Zudem können elektronische, sterische und stereochemische Aspekte über die Substituenten des Dienon-Ligandensystems gesteuert werden.

Projektleiter: Dr. habil. Jochen Vogt

Förderer: Haushalt; 03.03.2009 - 03.03.2013

Numerische Analyse molekularer Strukturen auf Isolatoreinkristalloberflächen

Die Kenntnis der Wechselwirkungsmechanismen molekularer Strukturen auf Isolaturoberflächen ist im Zusammenhang mit Fragestellungen z. B. in der Geologie oder in der Klimaforschung von erheblichem Interesse. Als Beispiel sei hier das System Wasser/NaCl genannt. Die

technologische Bedeutung von Isolatoroberflächen als Trägermaterialien für Schichten funktionaler Moleküle wird darüberhinaus zunehmend erkannt.

Ziel des Projekts ist einerseits die Simulation solcher Strukturen mit Hilfe von quantenchemischen und molekuldynamischen Methoden. Darüberhinaus erfordert die experimentelle Untersuchung von Filmstrukturen mit Hilfe der Beugung langsamer Elektronen (LEED, DLEED) eine nachgeschaltete numerische Auswertung, deren Aufwand z. B. im Falle von Defektstrukturen erheblich ist. Vorhandene Computerprogramme der sogenannten I(V)-Analyse sollen hierzu für den Einsatz auf Großrechnern parallelisiert werden.

6. Eigene Kongresse, wissenschaftliche Tagungen und Exponate auf Messen

Die 24. Deutsche Zeolith-Tagung fand gemeinsam mit dem Jahrestreffen der Fachgruppe Adsorption in der Zeit vom 7. bis 9. März 2012 an der Otto-von-Guericke-Universität in Magdeburg statt. Sie wurde vom Chemischen Institut unter Mitwirkung der beiden ProcessNet-Fachgruppen Zeolithe und Adsorption ausgerichtet. An der Tagung nahmen mehr 300 Wissenschaftler aus dem In- und Ausland teil.

Organisation: Prof. Dr. Franziska Scheffler, Lehrstuhl für Technische Chemie, Otto-von-Guericke-Universität, Magdeburg und Prof. Dr. Dieter Bathen, Lehrstuhl für Thermische Verfahrenstechnik, Universität Duisburg-Essen

7. Veröffentlichungen

Begutachtete Zeitschriftenaufsätze

Deblitz, Raik; Hrib, Cristian G.; Plenikowski, Georg; Edlmann, Frank T.

Synthesis and supramolecular structure of $[Me_3Sn([my]-C_{2N}10)SnMe_3(H_2O)]_n$, the first metal-organic azotetrazolate
In: Inorganic chemistry communications. - Amsterdam: Elsevier, Bd. 18.2012, S. 57-60; ... [weitere Infos](#); 2012
[Imp.fact.: 1,972]

Deblitz, Raik; Hrib, Cristian; Plenikowski, Georg; Edlmann, Frank T.

Molecular and crystal structure of a new high energy density material - Aminoguanidinium-styphnate, $[H_2NNHC(NH_2)_2][C_6H_2(NO_2)_3]$
In: Crystals. - Basel: MDPI, Bd. 2.2012, 1, insges. 8 S.; ... [weitere Infos](#); 2012

Edlmann, Frank T.

Lanthanide amidinates and guanidates in catalysis and materials science - a continuing success story
In: Chemical Society reviews. - London: Soc, Bd. 41.2012, 23, S. 7657-7672; ... [weitere Infos](#); 2012
[Imp.fact.: 28,760]

Edlmann, Frank T.

Lanthanides and actinides - annual survey of their organometallic chemistry covering the year 2009
In: Coordination chemistry reviews. - Amsterdam [u.a.]: Elsevier Science, Bd. 256.2012, 11/12, S. 1151-1228;
... [weitere Infos](#); 2012
[Imp.fact.: 12,744]

Edlmann, Frank T.

Lanthanides and actinides - annual survey of their organometallic chemistry covering the year 2010
In: Coordination chemistry reviews. - Amsterdam [u.a.]: Elsevier Science, Bd. 256.2012, 23/24, S. 2641-2740;
... [weitere Infos](#); 2012
[Imp.fact.: 12,110]

Jonek, Anita; Berger, Stefanie; Haak, Edgar

Ruthenium-catalyzed allylation-cyclization reactions of cyclic 1,3-dicarbonyl compounds with 1-vinyl propargyl alcohols
In: Chemistry. - Weinheim: Wiley-VCH, Bd. 18.2012, 42, insges. 44 S.; ... [weitere Infos](#); 2012
[Imp.fact.: 5,925]

Kostenko, Nataliya; Goodfriedsen, Jochen; Hilfert, Liane; Edlmann, Frank T.

A synthetic route to quaternary pyridinium salt-functionalized silsesquioxanes
In: International journal of polymer science. - New York, NY: Hindawi, Bd. 2012.2012, insges. 9 S.; ... [weitere Infos](#); 2012

Leutritz, Tobias; Hilfert, Liane; Smalla, Karl-Heinz; Speck, Oliver; Zhong, Kai

Accurate quantification of water-macromolecule exchange induced frequency shift - effects of reference substance

In: Magnetic resonance in medicine. - New York, NY [u.a.]: Wiley-Liss, 2012; ... [weitere Infos](#); 2012

[Imp.fact.: 2,964]

Prinz, Jan; Gaspari, Roberto; Pignedoli, Carlo A.; Vogt, Jochen; Gille, Peter; Armbrüster, Marc; Brune, Harald; Gröning, Oliver; Passerone, Daniele; Widmer, Roland

Isolated Pd sites on the intermetallic PdGa(111) and PdGa(-1-1-1) model catalyst surfaces

In: Angewandte Chemie. - Weinheim: Wiley-VCH/Angewandte Chemie / International edition, Bd. 51.2012, 37, S. 9339-9343; ... [weitere Infos](#); 2012

[Imp.fact.: 13,455]

Thies, Nora; Hrib, Cristian G.; Haak, Edgar

Ruthenium-catalyzed functionalization of pyrroles and indoles with propargyl alcohols

In: Chemistry. - Weinheim: Wiley-VCH, Bd. 18.2012, 20, S. 6302-6308; ... [weitere Infos](#); 2012

[Imp.fact.: 5,476]

Vogt, Jochen

The structure of N₂ adsorbed on the rumpled NaCl(100) surface: a combined LEED and DFT-D study

In: The journal of chemical physics. - Melville, NY: American Institute of Physics, Bd. 137.2012, 17, insges. 8 S.;

... [weitere Infos](#); 2012

[Imp.fact.: 3,333]

Wagner, Thomas; Hrib, Cristian G.; Lorenz, Volker; Edelmann, Frank T.; Amenta, Donna S.; Burnside, Christopher J.; Gilje, John W.

N-Pyrazolylpropanamide - a versatile ligand for the construction of supramolecular hydrogen-bonded frameworks

In: Zeitschrift für anorganische und allgemeine Chemie. - Weinheim: Wiley-VCH, Bd. 638.2012, 12/13, S. 2129-2137;

... [weitere Infos](#); 2012

[Imp.fact.: 1,249]

Wagner, Thomas; Hrib, Cristian G.; Lorenz, Volker; Edelmann, Frank T.; Gilje, John W.

Bromidobis[3-(1H-pyrazol-1-yl-[kappa]N₂)propionamide-[kappa]O]copper(II) bromide methanol monosolvate

In: Acta crystallographica. - Copenhagen: Munksgaard/Acta crystallographica / E, Bd. 68.2012, 10, S. 1253-1254;

... [weitere Infos](#); 2012

[Imp.fact.: 0,347]

Wagner, Thomas; Hrib, Cristian G.; Lorenz, Volker; Edelmann, Frank T.; Zhang, Jianfeng; Yi, Qiaohua

N-triazolylpropanamide - an acrylamide-derived multifunctional ligand for the construction of supramolecular hydrogen-bonded networks

In: Zeitschrift für anorganische und allgemeine Chemie. - Weinheim: Wiley-VCH, Bd. 638.2012, 14, S. 2185-2188;

... [weitere Infos](#); 2012

[Imp.fact.: 1,249]

Dissertationen

Belayneh, Kumeneger Debalike; Schinzer, Dieter [Gutachter]; Haak, Edgar [Gutachter]

Progress towards the total synthesis of sorangicin. - Magdeburg, Univ., Fak. für Verfahrens- und Systemtechnik, Diss., 2012; IX, 144 S.: graph. Darst.; 2012

Ivanov, Ivan; Schinzer, Dieter [Gutachter]; Sundmacher, Kai [Gutachter]

Development of a glucose-oxygen enzymatic fuel cell. - Magdeburg, Univ., Fak. für Verfahrens- und Systemtechnik, Diss., 2012; IX, 118 S.: graph. Darst.; 2012

Seebach, Axel; Seidel-Morgenstern, Andreas [Gutachter]; Scheffler, Franziska [Gutachter]

Enantiomertrennung mit molekular geprägten, monolithischen Polymerphasen. - Zugl.: Magdeburg, Univ., Fak. für Verfahrens- und Systemtechnik, Diss., 2011; Barleben: docupoint Verl., 2012; XII, 183 S.: graph. Darst.; 21 cm, ISBN 978-3-86912-069-0; 2012