



OTTO VON GUERICKE
UNIVERSITÄT
MAGDEBURG

VST

FAKULTÄT FÜR VERFAHRENS-
UND SYSTEMTECHNIK

Forschungsbericht 2015

FAKULTÄT FÜR VERFAHRENS- UND SYSTEMTECHNIK

Universitätsplatz 2, Gebäude 10, 39106 Magdeburg
Tel. +49 (0)391 67 58443, Fax +49 (0)391 67 11190

1. Leitung

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. Kooperationen

- Fraunhofer-Institut für Fabrikbetrieb und -automatisierung IFF
- Max-Planck-Institut für Dynamik komplexer technischer Systeme

5. Veröffentlichungen

Dissertationen

Baer, Stephan; Schmidt, Jürgen [Gutachter]; Specht, Eckehard [Gutachter]; Tobiska, Lutz [Gutachter]
Wärmeübergang bei der Sprühkühlung mit intermittierenden Sprays im Film- und Übergangssiedebereich.
- Magdeburg, Univ., Fak. für Verfahrens- und Systemtechnik, Diss., 2015; 148 S.: graph. Darst.;

Binev, Daniel; Seidel-Morgenstern, Andreas [Gutachter]

Continuous fluidized bed crystallization. - Magdeburg, Univ., Fak. für Verfahrens- und Systemtechnik, Diss., 2015, 2014; X, 161 S.: graph. Darst.;

Gao, Kaidi; Seidel-Morgenstern, Andreas [Gutachter]

Methane dehydro aromatization - thermodynamics, catalysts, kinetics and potential of membrane reactors. - Magdeburg, Univ., Fak. für Verfahrens- und Systemtechnik, Diss., 2015; X, 192 S.: III., graph. Darst.;

González Martínez, Isai; Sundmacher, Kai [Gutachter]

Hydrogen chloride electrolysis in a polymer-electrolyte-membrane reactor with oxygen-depolarized cathode. - Magdeburg, Univ., Fak. für Verfahrens- und Systemtechnik, Diss., 2015; 112 S.: graph. Darst.; 30 cm;

Heldt, Frank Stefan; Frensing, Timo [Gutachter]; Reichl, Udo [Gutachter]

Mathematical models of influenza A virus infection - from intracellular replication to virus growth in cell populations. - Magdeburg, Univ., Fak. für Verfahrens- und Systemtechnik, Diss., 2015, 2014; XX, 190 S.: graph. Darst.;

Hertel, Christoph; Sundmacher, Kai [Gutachter]; Mangold, Michael [Gutachter]

Experimental and theoretical analysis of the cyclic water gas shift reactor. - Magdeburg, Univ., Fak. für Verfahrens- und Systemtechnik, Diss., 2015; VIII, 117 S.: III., graph. Darst.;

Krietsch, Arne; Krause, Ulrich [Gutachter]

Untersuchung der Brand- und Explosionsgefahren von Nanostäuben. - Magdeburg, Univ., Fak. für Verfahrens- und Systemtechnik, Diss., 2015; X, 124 Bl.: III., graph. Darst.;

Löhnert, Andrea; Krause, Ulrich [Gutachter]; Thévenin, Dominique [Gutachter]

Modellierung von Brandszenarien mit CFD unter Berücksichtigung des Einflusses der Brandrauchzusammensetzung auf die Toxizität und Sichtweiten. - Magdeburg, Univ., Fak. für Verfahrens- und Systemtechnik, Diss., 2015; XII, 158 Bl.: III., graph. Darst.;

Neske, Michael; Krause, Ulrich [Gutachter]

Experimentelle Untersuchungen und theoretische Modellierung zu den Auswirkungen von Wärmeexposition auf Pressluftatmer, Vollmasken und Lungenautomaten. - Magdeburg, Univ., Fak. für Verfahrens- und Systemtechnik, Diss., 2015; Magdeburg; XXIV, 203 S.: III., graph. Darst.; 30 cm;

Peschel, Britta; Reichl, Udo [Gutachter]; Marwan, Wolfgang [Gutachter]

Infection dynamics and virus-induced apoptosis in influenza virus A infected adherent and suspension MDCK cells. - Zugl.: Magdeburg, Univ., Fak. für Verfahrens- und Systemtechnik, Diss., 2015; Aachen: Shaker; VI, 180 S.: III., graph. Darst.; 21 cm, 291 g - (Forschungsberichte aus dem Max-Planck-Institut für Dynamik komplexer technischer Systeme; 44), ISBN 978-3-8440-3738-8;

Specht, Eckehard [Gutachter]

Heat transfer analysis in metal quenching with sprays and jets. - Zugl.: Magdeburg, Univ., Fak. für Verfahrens- und Systemtechnik, Diss., 2015; Barleben: docupoint; XIII, 151 S.: graph. Darst.; 21 cm, ISBN 978-3-86912-206-9;

Sroor, Farid Mohamed Ahmed; Edelmann, Frank T. [Gutachter]; Haak, Edgar

Synthesis, structure and catalytic activity of new lanthanide alkynylamidinates. - Magdeburg, Univ., Fak. für Verfahrens- und Systemtechnik, Diss., 2015; IV, 148 S.: graph. Darst.;

Tschirschwitz, Rico; Krause, Ulrich [Gutachter]

Entwicklung von Bestimmungsverfahren für Explosionskenngrößen von Gasen und Dämpfen für nichtatmosphärische Bedingungen. - Magdeburg, Univ., Fak. für Verfahrens- und Systemtechnik, Diss., 2015; XII, 168 Bl.: III., graph. Darst.;

Wassermann, Magdalena; Tsotsas, Evangelos [Gutachter]; Peglow, Mirko [Gutachter]

Niedertemperaturgranulierung von Mikroorganismen. - Magdeburg, Univ., Fak. für Verfahrens- und Systemtechnik, Diss., 2015; XVII, 172 S.: III., graph. Darst.;

Zistl, Christiane; Krause, Ulrich [Gutachter]; Thévenin, Dominique [Gutachter]

File-based post-processing of DNS results for turbulent flames using MATLAB. - Magdeburg, Univ., Fak. für Verfahrens- und Systemtechnik, Diss., 2015; 184 S.: graph. Darst.;

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. F. Beyrau
Prof. Dr.-Ing. E. Specht

2. Hochschullehrer

Prof. Dr.-Ing. F. Beyrau (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. (i. R.) J. Schmidt
Prof. Dr.-Ing. Dr. h.c. (i. R.) H. J. Kecke
Jun.-Prof. Dr.-Ing. F. Herz

3. Forschungsprofil

Lehrstuhl für Technische Thermodynamik (Prof. Dr.-Ing. F. Beyrau).

- Experimentelle Untersuchungen von Wärme- und Stofftransportprozessen: Einlaufströmungen und Mikrokanäle; 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 mittels Infrarotthermografie und Korrelation mit den charakteristischen Sprühstrahlparametern; Mikromodell auf Basis von Einzeltropfen; PDA-Messungen zur Sprühstrahlcharakterisierung.
- Automotive: thermische Motorsimulation und Energiemanagement; Spraycharakterisierung und Gemischbildung sowie Wandfilmbildung bei der motorischen Verbrennung, Einsatz optischer Messmethoden (PDA, PIV, LIF/LIEF), Druckkammeruntersuchungen.
- Infrarotthermografie, Phasen-Doppler-Anemometrie, Thermographic Particle Image Velocimetry und Thermoanalyse: Anwendung und Weiterentwicklung von Methoden zur Bestimmung von Wärmeübergangskoeffizienten, Temperaturfeldern, Tropfengrößen- und Geschwindigkeitsverteilungen, sowie der thermischen Stoffwerte.

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

- Industrieofenprozesse: Wärmeübergangsbedingungen in Tunnelöfen, Wärmeübergangsmessungen in einem Versuchsdrehrohröfen, Simulation des Kalkbrennens in Schachtöfen, Simulation von Prozessen in Drehrohröfen. Simulation des Sinterns von Keramik in Tunnelöfen.
- 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).
- 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; Filmdickenmessung; simultane quantitative Messungen (z.B. PIV-LIF, Zweiphasen-PIV).

4. Serviceangebot

Wir bieten unter anderem:

- 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. Details hierzu finden Sie auf den jeweiligen Internetseiten der Lehrstühle.

6. Kooperationen

- Fraunhofer-Institut für Fabrikbetrieb und -automatisierung IFF, Magdeburg
- Prof. Andreas Seidel-Morgenstern, MPI Magdeburg
- Prof. Bernhard Preim, Inst. für Simulation und Grafik, FIN
- Prof. Georg Rose, Lehrstuhl für Medizinische Telematik und Medizintechnik, FEIT
- Prof. Gunther Brenner, T.U. Clausthal
- 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. Szilard Szabo, 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

Projektbearbeiter: Dipl.-Ing. Philipp Berg, Dipl.-Ing. Christoph Roloff, PD Dr.-Ing. Gábor Janiga

Kooperationen: Prof. Bernhard Preim, Inst. für Simulation und Grafik

Förderer: Industrie; 01.08.2012 - 30.10.2016

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: Land (Sachsen-Anhalt); 01.09.2015 - 30.06.2016

Direkte Numerische Simulation turbulenter Strömungen mit chemischen Reaktionen

In diesem Projekt wird das eigene Computerprogramm DINOSOARS, mit dem die Direkte Numerische Simulation (DNS) turbulenter Strömungen mit chemischen Reaktionen möglich ist, mit der Immersed Boundary Methode (IBM) hoher Ordnung gekoppelt, um damit Simulationen in Konfigurationen mit komplexer Geometrie zu ermöglichen. Damit können eine Vielzahl relevanter Anwendungen der Energie- und Prozesstechnik mit unschlagbarer Genauigkeit untersucht werden.

Projektleiter: Prof. Dr.-Ing. Dominique Thévenin

Projektbearbeiter: M.Sc. Lisa-Maria Wagner

Kooperationen: Prof. Matthias Kraume, FG Verfahrenstechnik, TU Berlin

Förderer: Deutsche Forschungsgemeinschaft (DFG); 01.01.2014 - 31.12.2018

Dispersion und Koaleszenz in gerührten miszellaren Dreiphasensystemen

Apolare Edukte können in miszellaren Lösungsmittelsystemen mit wasserlöslichen Katalysatoren umgesetzt werden. Um eine ökonomisch sinnvolle Reaktionsgeschwindigkeit und eine schnelle Abscheidung des Produkts zu erreichen, müssen die Bedingungen so eingestellt werden, dass sich ein Dreiphasensystem bildet. Die Tropfengrößenverteilungen (TGV) der durch den Rührer erzeugten bidispersen Systeme sind für beide Prozessschritte entscheidend, wurden aber bisher noch nicht charakterisiert. Diese TGV sollen durch Erweiterung experimenteller (AG Kraume) und numerischer Methoden (AG Thévenin) bestimmt werden.

Projektleiter: Prof. Dr.-Ing. Dominique Thévenin

Projektbearbeiter: Dipl.-Ing. Christoph Roloff

Förderer: Deutscher Akademischer Austauschdienst e.V. (DAAD); 01.01.2014 - 31.12.2015

Entwicklung eines innovativen Turbulenzgenerators

Two types of turbulence generators are applied in practice: passive and active generators. Compared to the passive ones, the advantage of the active generators is the higher possible turbulence level and flexibility. However, the active generators are much more expensive than the passive ones. Therefore, our aim is to develop an innovative active generator that is much cheaper than the presently applied ones but obtaining the same or even higher turbulent intensity. It will be the appropriate instrument to convert main flows with low turbulence intensity into flows with suitably adjusted turbulent properties.

Widely used laser-based measurement techniques developed in the past decades (e.g. PIV, PTV, LDV, CTA) provide the opportunity to investigate such turbulence generators and perform pointwise or planar measurements at high sampling rate for the rapidly changing flow quantities.

Projektleiter: Prof. Dr.-Ing. Dominique Thévenin

Projektbearbeiter: M.Sc. Abouelmagd Abdelsamie

Kooperationen: Prof. Ulrich Maas (KIT, Technische Thermodynamik)

Förderer: Deutsche Forschungsgemeinschaft (DFG); 01.08.2011 - 31.07.2016

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: Dr.-Ing. Thomas Hagemeier

Förderer: Industrie; 01.04.2014 - 31.01.2015

Experimentelle Untersuchung der für die Fahrzeugverschmutzung relevanten Benetzung und Filmbildung von Wasser auf unterschiedlichen Werkstoffen

Bei der Entwicklung von Fahrzeugen ist die Fahrzeugverschmutzung, insbesondere wegen Regen, von großer Bedeutung. Auch bei starkem Regen und Wind darf die Sicht des Fahrers nicht beeinträchtigt werden. Die bei diesem Vorgang auftretenden physikalischen Vorgänge sind von hoher Komplexität (Instationarität, Turbulenz, Mehrphasenströmung, Filmbildung und -zerfall). Die numerische Modellierung dieser Phänomene ist noch nicht mit hinreichender Genauigkeit erfolgt. Dies ist u. a. ein Hinweis darauf, dass zuverlässige experimentelle Messungen, die für eine Entwicklung und Validierung numerischer Modelle unentbehrlich sind, noch nicht abschließend durchgeführt wurden. Ziel dieses Projekts ist es daher, solche experimentelle Daten grundlegender Natur zu erfassen, mit denen eine für die Praxis anwendbare Simulationskette quantitativ validiert werden kann. Hierfür sollen Grundlagenversuche bezüglich der Benetzung, Film- und Rinnsalbildung für unterschiedliche Werkstoffe mit unterschiedlichen Anströmbedingungen durchgeführt werden, um eine verlässliche Datenbasis für die Validierung von

Berechnungsmodellen zu erarbeiten.

Projektleiter: Prof. Dr.-Ing. Dominique Thévenin

Projektbearbeiter: M.Sc. Amir Eshghinejadfard

Förderer: Deutsche Forschungsgemeinschaft (DFG); 01.07.2014 - 30.06.2017

Lattice-Boltzmann Simulationen partikelbeladener Strömungen

Für eine korrekte Beschreibung des makroskopischen Verhaltens von Agglomeraten in Fluiden muss die Partikelumströmung akkurat berücksichtigt werden. Dabei muss sowohl die von einem äußeren Kraftfeld erzwungene, gerichtete Partikelbewegung (verantwortlich für, z. B., Sedimentation und Trennung), sowie die chaotische Partikelbewegung wegen turbulenter Schwankungen in entsprechenden Lattice-Boltzmann (LB) Simulationen beschrieben werden. Die Rückwirkung der Partikel auf die Entwicklung der turbulenten Strömungsstrukturen ist ebenfalls für das Verhalten des Gesamtsystems von essentieller Bedeutung. Sowohl die lokalen Turbulenzeigenschaften wie auch das makroskopische Verhalten der Strömung können durch Veränderungen in der Grenzschicht unter Zugabe von Kleinstmengen an Partikeln wesentlich verändert werden, wenn diese besondere morphologische Eigenschaften aufweisen. Daher soll ebenfalls mittels LB und Experimente untersucht werden, wie nicht-sphärische Partikel die Entwicklung turbulenter Strukturen beeinflussen können.

Projektleiter: Prof. Dr.-Ing. Dominique Thévenin

Projektbearbeiter: Dipl.-Ing. Christoph Roloff

Kooperationen: Prof. Jürgen Tomas, Lehrstuhl Mechanische Verfahrenstechnik, Otto-von-Guericke-Universität

Förderer: Deutsche Forschungsgemeinschaft (DFG); 01.07.2013 - 30.06.2017

Modellierung und dynamische Simulation mehrstufiger Partikel-Querstromtrennungen in einem turbulenten Fluidstrom

Die experimentelle Untersuchung, Modellierung, dynamische Simulation und Bewertung mehrstufiger Partikel-Querstromtrennungen in einem turbulenten Fluidstrom wurde gezielt für das Schwerpunktprogramm "DynSim" ausgewählt, weil dieser typische Trennprozess für die Abtrennung einer großen Zahl von Rohstoffen, Abfällen, Zwischen- und Nebenprodukten in vielen Branchen der stoffwandelnden Wirtschaft eingesetzt wird. Trotz seiner nachweislich guten Prozessleistungen ist damit immer noch eine Reihe ungelöster verfahrenstechnischer Problemstellungen verbunden, wie z.B. fluktuierende Luftströmung und Partikelbelastungen im Trennraum, ausgeprägte stochastische Prozessdynamik sowie resultierende mangelhafte Prozessgüte (Trennschärfe) und Produktqualität (Reinheit). Die nachhaltige Lösung dieser Probleme erfordert die Bereitstellung physikalisch begründeter, multiskaliger und zur Vorhersage geeigneter Modelle für die Bewertung und Simulation der Prozessdynamik vernetzter stochastischer Querstrom-Trennungen, die sich künftig bequem in Fliessschema-Simulationen der Feststoffverfahrenstechnik einbinden lassen. Im Einzelnen werden zeitlich und örtlich aufgelöste, analytische und numerische Modelle für die Prozesskinetik und das vernetzte dynamische Querstrom-Trennverhalten der Partikel hinsichtlich ihrer Trennmerkmale Korngröße, -dichte und -form entwickelt. Parallel dazu werden effiziente numerische Simulationen des turbulenten Strömungsfeldes innerhalb des Trennapparates durchgeführt. Stationäre sowie instationäre, Reynolds-gemittelte Navier-Stokes-Gleichungen werden mit den Bewegungsgesetzen der Partikeltranslation und -rotation dank der Diskreten-Elemente-Methode, gekoppelt. Damit werden die Partikel-Bewegungsbahnen in der echten Geometrie der abgeknickten Kanalelemente berechnet. Nach ersten, einseitig gekoppelten Simulationen mit einfachen Wandmodellen werden realistischere Simulationen unter Berücksichtigung physikalischer Partikel-Wand- und Partikel-Partikel-Kollisionen durchgeführt. Die quantitative Validierung der eingesetzten Modelle erfolgt über zeitlich und dreidimensional örtlich aufgelöste Messungen im Trennapparat auf Basis der Particle Tracking Velocimetry. Bei Bedarf können für die Modellüberprüfung Direkte Numerische Simulationen der Zweiphasenströmung auf Mikro-Ebene eingesetzt werden. Die verfahrenstechnische und energetische Prozessgüte (Trennschärfe, spezifischer Energieeintrag) und Produktqualität der Trennversuche und numerischen Experimente werden modellgestützt bewertet und optimiert. Dem folgen in der zweiten Förderperiode die Berechnung und Bewertung dynamischer Veränderungen der Prozessgüte und Produktqualität bei sprungförmigen und harmonischen Schwankungen des Aufgabestromes, der Beladungen und der Trennmerkmale Korngröße, -dichte und -form. Abschließend werden in der dritten SPP-Phase diese Bewertungs- und Simulationsmodelle in ein multiskaliges, modular aufgebautes Prozess-Systemmodell eingebettet.

Projektleiter: Prof. Dr.-Ing. Dominique Thévenin

Projektbearbeiter: Dipl.-Ing. László Daróczy

Förderer: BMWi/AIF; 01.07.2013 - 31.08.2015

Multivariate Optimierung des Profils eines H-Darrieus-Rotors mit geraden Blättern auf der Grundlage genetischer und hybrider Algorithmen zur Strömungssimulation

Dieses Projekt zielt auf die gemeinsame, arbeitsteilige Entwicklung einer Kleinwindenergieanlage mit vertikalem Rotor unter Verwendung eines H-Darrieus-Rotors. Dieser ermöglicht in der geplanten Dimensionierung eine Installation ohne genehmigungsrechtliche Zulassung der Überwachungsbehörden und soll streng nach der Zulassungsfreiheit zugrundeliegenden DIN /VDE 61400-2 ausgelegt sein. Die Zielstellung erfordert technologische und materialtechnische Neuerungen bei der Produktgestaltung, um vorrangig die extrem hohen Anforderungen der auf 20 Jahre zu gewährleistenden Festigkeitseigenschaften zu erreichen. Insgesamt wird eine Ausführung der Kleinwindanlage geplant, die für die dezentrale Eigenversorgung geeignet ist, zulassungsfrei ist sowie im privaten und kleingewerblichen Betrieb mit guter Wirtschaftlichkeit zu handhaben ist.

Projektleiter: Prof. Dr.-Ing. Dominique Thévenin

Projektbearbeiter: M.Sc. Timo Oster

Kooperationen: Prof. Holger Theisel, Inst. für Simulation und Grafik

Förderer: Deutsche Forschungsgemeinschaft (DFG); 01.10.2014 - 30.09.2017

On-the-fly Postprocessing von Features aus turbulenten Flammen von Direkten Numerischen Simulationen

Direkte numerische Simulation (DNS) ist der derzeit wohl bestmögliche Ansatz zur numerischen Simulation von reaktiven, turbulenten Strömungen. DNS-Ansätze für hohe Reynolds-Zahlen benötigen allerdings Milliarden von Gitterpunkten und werden über Tausende von Zeitschritten berechnet. Werden komplexere Strömungen zusammen mit chemischen Reaktionen behandelt, muss eine Vielzahl von Variablen in Raum und Zeit analysiert und korreliert werden, um reduzierte Modelle zu erhalten und zu testen. Dies führt zu riesigen Mengen von Rohdaten (derzeit Terabytes oder sogar Petabytes), die in akzeptabler Zeit weder gespeichert noch über Netzwerk übertragen werden können. Es ist zu erwarten, dass in naher Zukunft der Aufwand zur Übertragung und Speicherung der Daten den Aufwand zu deren Erzeugung übersteigen wird, und dass die Datenspeicherung/Übertragung zum Flaschenhals der DNS wird.

Um dies zu lösen, wird ein Postprocessing der reaktiven Strömungsdaten vorgeschlagen, welches gleichzeitig und simultan zur DNS erfolgt. Dieses erfolgt in Form einer on-the-fly Feature-Extraktion: relevante Features (Temperatur- oder Konzentrationsfelder) werden parallel zur DNS extrahiert und abgespeichert, so dass die Rohdaten selbst gar nicht mehr gespeichert werden müssen. Dieser Ansatz hat das Potential, dass nur noch ein Bruchteil der ursprünglichen Datenmenge gespeichert werden muss, ohne wesentliche Information über der Flamme zu verlieren. Um dies umzusetzen, ist jedoch eine Reihe von Herausforderungen in der Datenanalyse, der Feature Extraktion, der Parallelisierung und der numerischen Simulation zu lösen.

Projektleiter: Prof. Dr.-Ing. Dominique Thévenin

Projektbearbeiter: M.Sc. Lisa-Maria Wagner, Dr.-Ing. Katharina Zähringer

Kooperationen: Prof. Kai Sundmacher, MPI Magdeburg

Förderer: Deutsche Forschungsgemeinschaft (DFG); 01.01.2014 - 31.12.2018

Optimale Reaktionsführung in flüssigen Mehrphasensystemen

In diesem Projekt erfolgen der Aufbau und die Inbetriebnahme eines segmentierten Mehrphasenreaktors mit ortsverteilter Konzentrations- und Temperaturführung im Miniplant-Maßstab, als technische Approximation der optimalen Reaktionsführung für die Hydroformylierung von 1-Dodecen in TMS. Mit Hilfe experimenteller Charakterisierung des reaktionstechnischen bzw. transportphysikalischen Reaktorverhaltens wird ein detailliertes Reaktormodell entwickelt, welches für die modellgestützte Reaktoroptimierung genutzt wird.

Projektleiter: Prof. Dr.-Ing. Dominique Thévenin

Förderer: Bund; 01.07.2015 - 28.02.2018

Optimierung von Fluidenergiemaschinen unter Berücksichtigung der Fischdurchgängigkeit

Es besteht erhebliches technisches Verbesserungspotential bei dem Einsatz tiefschmächtiger Wasserräder sowie Fischtreppen, insbesondere, wenn eine Konfiguration mit mehreren Komponenten ausgewählt wird, in welcher hydrodynamische Wechselwirkungen auftreten. In diesem Projekt werden Computermodelle entwickelt, mit denen das

Optimierungspotential solcher Konfigurationen im Sinne des Energieaustrags unter Berücksichtigung der Fischdurchgängigkeit voll ausgeschöpft wird. Da das zugrunde liegende physikalische Problem sehr komplex ist, ist es dabei unabdingbar, experimentelle Daten unter kontrollierten und reproduzierbaren Strömungsbedingungen zu erhalten, um damit die Simulationskette zu validieren. Eine eigens hierfür konzipierte Versuchsrinne wird zu diesem Zweck am Institut aufgebaut, womit die Umströmung entsprechender Modelle komplett charakterisiert wird. Mit Hilfe dieser Rinne wird auch eine autonome Sonde zur Ermittlung der relevanten Strömungseigenschaften getestet.

Projektleiter: Prof. Dr.-Ing. Dominique Thévenin
Projektbearbeiter: M.Sc. Toni Eger, PD Dr.-Ing. Gábor Janiga
Förderer: Industrie; 01.07.2014 - 30.06.2017

Simulationsbasierte Optimierung der Kühlung elektrischer Generatoren

Um elektrische Generatoren weiter zu verbessern, ist es notwendig, innovative Simulationsmethoden zu entwickeln, mit denen flexibel und effizient optimale Konfigurationen sehr früh während der Entwicklungsphase unter Berücksichtigung aller relevanten Bedingungen (Abmessungen, Fertigungsprozess, Kosten...) identifiziert werden können. Mit dem gleichen Werkzeug können auch eventuell auftretende Probleme bei einer späteren Entwicklungsstufe schnell gelöst werden.

Solche durchgreifenden Verbesserungen des im Betrieb verwendeten Simulationsmodells erfordern den Einsatz einer Optimierung auf Basis der numerischen Strömungssimulation (*Computational Fluid Dynamics*, CFD). Vorrangiges Ziel dieses Forschungsprojektes ist es daher, einen effizienten und zielführenden Simulationsprozess auf Basis relevanter Indikatoren zu entwickeln. Anschließend kann auf Basis der CFD-O eine optimale Auslegung für die Kühlung elektrischer Generatoren abgeleitet werden.

Projektleiter: Prof. Dr.-Ing. Dominique Thévenin
Projektbearbeiter: M.Sc. Nils Lichtenberg
Förderer: Industrie; 01.08.2011 - 31.12.2015

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. Frank Beyrau
Förderer: Industrie; 01.10.2014 - 30.09.2016

Untersuchung des Zerstäubungsverhaltens an 10MW Ölbrenner-Rücklaufdüsen

Die Untersuchung der Spraybildung an Ölzerstäuberdüsen mit dem Ziel einer Optimierung hinsichtlich der Partikelgrößen bei gegebenen Vorlaufdrücken ist Gegenstand dieses Projektes. Hierbei kommen Patternormessungen zur Bestimmung der Beaufschlagungsdichten, Highspeedkinematografie zur Analyse von Spraywinkel und Sprayzerfalldynamik sowie Phasen Doppler Anemometrie zur Ermittlung von Partikelgeschwindigkeiten und Durchmessern zur Anwendung. Die Untersuchungen werden mit Wasser durchgeführt, wobei ausführliche Voruntersuchungen zur Übertragbarkeit der Ergebnisse vorliegen.

Projektleiter: Prof. Dr. Frank Beyrau
Kooperationen: Robert Bosch GmbH, Stuttgart
Förderer: Industrie; 01.03.2015 - 31.12.2015

Vergleichende Untersuchung der Wandfilmbildung von Mehrlochinjektoren mittels laserinduzierter Fluoreszenz

Die Benetzung der Brennraumwände mit Kraftstoff ist eine wesentliche Ursache für die Entstehung von Rußpartikeln in Ottomotoren mit Direkteinspritzung. Um die Abhängigkeit der Spray/Wand-Interaktion und der Wandfilmbildung von der Düsengeometrie zu erfassen, wurden umfangreiche Messungen durchgeführt. Dabei kam die Methode der laserinduzierten Fluoreszenz zum Einsatz. Diese ermöglicht die Quantifizierung der Wandfilmmasse. Im Ergebnis konnten eindeutige Vor- und Nachteile verschiedener Düsengeometrien aufgezeigt werden.

Projektleiter: Jun.-Prof. Dr.-Ing. Fabian Herz

Projektbearbeiter: weitere Projektleiter: Prof. Dr.-Ing. Eckehard Specht, Prof. Dr.-Ing. Viktor Scherer

Kooperationen: Prof. Dr.-Ing. Viktor Scherer, Ruhr-Universität Bochum

Förderer: Deutsche Forschungsgemeinschaft (DFG); 01.06.2013 - 31.05.2015

Experimentelle und numerische Untersuchungen zur Herleitung eines dynamischen Schüttbettmodells für Drehrohre unter Berücksichtigung von Ver- und Entmischungsvorgängen

Es soll ein mathematisches Modell zur Beschreibung des Wärmetransportes innerhalb des Schüttbettes auf Grundlage der Analyse des Ver- und Entmischungsverhaltens entwickelt werden. Hierfür sollen an der OvGU Magdeburg experimentelle Untersuchungen an einer bereits vorhandenen Batch-Drehtrommel durchgeführt werden. Dabei werden unter verschiedenen Bedingungen Partikelfractionen unterschiedlicher Körnung und Anfangstemperatur miteinander vermischt. Mittels bereits erprobter Messtechnik wird innerhalb der Schüttung der Temperaturengleich erfasst und daraus die Vermischung analysiert. An der Universität Bochum sollen mittels DEM-Simulationen die mikrostrukturellen Vorgänge innerhalb der Schüttung sichtbar gemacht werden. Die Kenntnis des individuellen Bewegungsverhaltens der Partikel ist notwendig zur Entwicklung physikalisch begründeter Wärmetransportmodelle. Die experimentellen Untersuchungen und die auf die Experimente ausgerichteten DEM-Simulationen sollen in Abhängigkeit von Geometrie-Größen, Materialeigenschaften, Betriebsparametern und identifizierbaren Bewegungsunterschieden ausgewertet und anschließend in ein dynamisches, makroskopisches Modellierungskonzept überführt werden.

Projektleiter: Dr.-Ing. Katharina Zähringer

Projektbearbeiter: M. Sc. P. Kováts

Förderer: Deutsche Forschungsgemeinschaft (DFG); 01.05.2014 - 30.04.2017

Experimentelle Charakterisierung des gas-flüssig Stofftransfers in einer reaktiven Blasensäule am Beispiel einer Neutralisationsreaktion

Zur quantitativen Untersuchung des Stofftransfers in einer Blasensäule soll in der ersten Projektphase, als Grenzfall für eine schnelle Reaktion, der Übergang von CO₂ in leicht basisches Wasser, also eine Neutralisations-/Ansäuerungsreaktion, betrachtet werden. Dieses einfache System bietet sich an, um das komplexe experimentelle Messprotokoll zu optimieren und außerdem, um bereits vor Ende der ersten Phase erste Validierungsdaten und Vergleiche mit den numerischen Projekten im SPP zu ermöglichen. Die im Experiment erfolgende pH-Wert-Änderung wird mit Hilfe von Indikatorstoffen (z.B. Uranin) und Laser-induzierte Fluoreszenz (LIF) sowohl räumlich, als auch zeitlich aufgelöst vermessen. Mit Hilfe einer Kalibrierung und den bekannten Eingangs- und Ausgangsströmen können somit sofort quantitative Rückschlüsse auf den Stoffübergang erhalten werden. Um eine Verschattung des Messvolumens, ebenso wie Reflexionen und Brechung des Laserlichts durch die Blasen zu berücksichtigen, wird ein zweiter, pH-unabhängiger Tracer eingesetzt, der es erlaubt die eigentlichen Messbilder zu korrigieren (2-Farben-Verfahren). Das Messverfahren wird zunächst für Blasketten und dann für kleine Blaskollektive in verschiedenen Volumenströmen und Blasedurchmessern eingesetzt. Nach Optimierung des Messverfahrens wird letztendlich ein typischer Blaskenschwarm untersucht. Durch Verwendung von Hochgeschwindigkeitskameras kann der zeitliche Verlauf sowohl der Blasedurchmesser und -trajektorien, als auch des Stoffübergangs aufgelöst werden. Für die Bestimmung der Blaskengeschwindigkeiten und -bahnlinien wird die Particle Tracking Velocimetry (PTV) eingesetzt, für die viel Erfahrung in der Gruppe vorliegt. Die Geschwindigkeitsfelder der flüssigen Phase werden mit Particle Imaging Velocimetry (PIV) verfolgt. Diese kann, als stereo-PIV eingesetzt, auch die Flüssigkeitsbewegung in drei Dimensionen auflösen. Auf diese Weise können dann der Einfluss des Strömungsfeldes auf den Stoffübergang quantifiziert und auch Vergleichsdaten für numerische Projekte des SPP zur Verfügung gestellt werden.

Da die Stoffdaten der Flüssigphase ebenfalls eine sehr große Rolle für den erfolgreichen Stoffübergang spielen, sollen im Rahmen des Projekts auch die Viskosität und Oberflächenspannung verändert werden. Hierzu sollen verschiedene Glycerin/Wasser-Mischungen zum Einsatz kommen, deren Viskositäten und Oberflächenspannungen bekannt sind. Auch hierbei sollen wiederum der Stofftransport und die Hydrodynamik, soweit möglich, simultan erfasst werden. Alle experimentellen Ergebnisse werden von Beginn an in einer Datenbank den anderen Projekten und der Öffentlichkeit zugänglich gemacht. Sie können somit auch als Validierungs- und Vergleichsdaten für numerische Berechnungen herangezogen werden

8. Eigene Kongresse, wissenschaftliche Tagungen und Exponate auf Messen

Die internationale "Conference on Modelling Fluid Flow" (<http://www.cmff.hu>) hat unter Federführung von Prof. Thévenin im September 2015 in Budapest mit etwa 200 Teilnehmern stattgefunden. Herr Dr. Janiga hat dabei ein Workshop bezüglich der Optimierung von Windturbinen organisiert.

9. Veröffentlichungen

Begutachtete Zeitschriftenaufsätze

Ashraf Ali, B.; Börner, Matthias; Peglow, Mirko; Janiga, Gábor; Seidel-Morgenstern, Andreas; Thévenin, Dominique

Coupled computational fluid dynamics-discrete element method simulations of a pilot-Scale batch crystallizer

In: Crystal growth & design. - Washington, DC: ACS Publ, Bd. 15.2015, 1, S. 145-155;

[Imp.fact.: 4,558]

Berg, Philipp; Iosif, Christina; Ponsonard, Sebastien; Yardin, Catherine; Janiga, Gábor; Mounayer, Charbel

Endothelialization of over- and undersized flow-diverter stents at covered vessel side branches - an in vivo and in silico study

In: Journal of biomechanics: affiliated with the American Society of Biomechanics, the European Society of Biomechanics, the International Society of Biomechanics, the Japanese Society for Clinical Biomechanics and Related Research and the Australian and New Zealand Society of Biomechanics. - Amsterdam [u.a.]: Elsevier Science, 2015;

<http://dx.doi.org/10.1016/j.jbiomech.2015.10.047>;

[Imp.fact.: 2,751]

Berg, Philipp; Roloff, Christoph; Beuing, Oliver; VoB, Samuel; Sugiyama, Shin-Ichiro; Aristokleous, Nicolas; Anayiotos, Andreas S.; Ashton, Neil; Revell, Alistair; Bressloff, Neil W.; Brown, Alistair G.; Jae Chung, Bong; Cebal, Juan R.; Copelli, Gabriele; Fu, Wenyu; Qiao, Aike; Geers, Arjan J.; Hodis, Simona; Dragomir-Daescu, Dan; Nordahl, Emily; Bora Suzen, Yildirim; Owais Khan, Muhammad; Valen-Sendstad, Kristian; Kono, Kenichi; Menon, Prahlad G.; Albal, Priti G.; Mierka, Otto; Münster, Raphael; Morales, Hernán G.; Bonnefous, Odile; Osman, Jan; Goubergrits, Leonid; Pallares, Jordi; Cito, Salvatore; Passalacqua, Alberto; Piskin, Senol; Pekkan, Kerem; Ramalho, Susana; Marques, Nelson; Sanchi, Stéphane; Schumacher, Kristopher R.; Sturgeon, Jess; Švihlová, Helena; Hron, Jaroslav; Usera, Gabriel; Mendina, Mariana; Xiang, Jianping; Meng, Hui; Steinman, David A.; Janiga, Gábor

The computational fluid dynamics rupture challenge 2013-Phase II - variability of hemodynamic simulations in two intracranial aneurysms

In: Journal of biomechanical engineering. - New York, NY: ASME; Vol. 137.2015, 12, Art. 121008, insgesamt 13 S.;

[Imp.fact.: 1,780]

Beyrau, Frank; Hadjipanayis, M. A.; Lindstedt, R. P.

Time-resolved temperature measurements for inert and reactive particles in explosive atmospheres

In: Proceedings of the Combustion Institute. - Amsterdam [u.a.]: Elsevier, Bd. 35.2015, 2, S. 2067-2074;

[Imp.fact.: 2,262]

Boye, Gunar; Schmidt, Jürgen; Beyrau, Frank

Analysis of flow boiling heat transfer in narrow annular gaps applying the design of experiments method

In: Advances in mechanical engineering. - New York, NY: Hindawi, Bd. 7.2015, 6, insges. 14 S.;

[Imp.fact.: 0,500]

Breuninger, Tobias; Schmidt, Jürgen; Tschöke, Helmut; Hese, Martin; Kufferath, Andreas; Altenschmidt, Frank

Optical investigations of the ignition-relevant spray characteristics from a Piezo-injector for spray-guided Spark-ignited engines

In: SAE International journal of engines. - Warrendale, Pa: Soc, Bd. 8.2015, 1, S. 89-100;

Cito, S.; Geers, A. J.; Arroyo, M. P.; Palero, V. R.; Pallarés, J.; Vernet, A.; Blasco, J.; San Román, L.; Fu, W.; Qiao, A.; Janiga, Gábor; Miura, Y.; Ohta, M.; Mendina, M.; Usera, G.; Frangi, A. F.

Accuracy and reproducibility of patient-specific hemodynamic models of stented intracranial aneurysms - report on the virtual intracranial stenting challenge 2011

In: Annals of biomedical engineering: the journal of the Biomedical Engineering Society. - Dordrecht [u.a.]: Springer

Science + Business Media B.V, Bd. 43.2015, 1, S. 154-167;
[Imp.fact.: 3,195]

Daroczy, Laszlo; Janiga, Gábor; Petrasch, Klaus; Webner, Michael; Thévenin, Dominique

Comparative analysis of turbulence models for the aerodynamic simulation of H-Darrieus rotors
In: Energy: the international journal. - Amsterdam [u.a.]: Elsevier Science; Vol. 90.2015, Part 1, S. 680-690;
[Imp.fact.: 4,844]

Eshghinejadfard, Amir; Abdelsamie, Abouelmagd; Janiga, Gábor; Thévenin, Dominique

Direct-forcing immersed boundary lattice Boltzmann simulation of particle/fluid interactions for spherical and non-spherical particles
In: Particuology. - Amsterdam: Elsevier, 2015; <http://dx.doi.org/10.1016/j.partic.2015.05.004>;
[Imp.fact.: 2,110]

Fond, Benoit; Abram, Christopher; Beyrau, Frank

On the characterisation of tracer particles for thermographic particle image velocimetry
In: Applied physics / B. - Berlin: Springer, Bd. 118.2015, 3, S. 393-399;
[Imp.fact.: 1,634]

Glöckner, Hannes; Hagemeyer, Thomas; Müller, Peter; Roloff, Christoph; Thévenin, Dominique; Tomas, Jürgen

Beschleunigter Sinkprozess fester Partikel bei laminarer und turbulenter Umströmung
In: Chemie - Ingenieur - Technik: CIT. - Weinheim: Wiley-VCH Verl, Bd. 87.2015, 5, S. 644-655;
[Imp.fact.: 0,661]

González, Álvaro Yáñez; Skinner, Stephen; Beyrau, Frank; Heyes, Andrew L.

Reusable thermal history sensing via oxidation of a divalent rare earth ion-based phosphor synthesized by the solgel process
In: Heat transfer engineering: an international journal. - London [u.a.]: Taylor & Francis, Bd. 36.2015, 14/15, S. 1275-1281;
[Imp.fact.: 0,814]

Hadjipanayis, M. A.; Beyrau, Frank; Lindstedt, R. P.; Atkinson, G.; Cusco, L.

Thermal radiation from vapour cloud explosions
In: Process safety and environmental protection. - Amsterdam: Elsevier, Bd. 94.2015, S. 517-527;
[Imp.fact.: 2,551]

Hagemeyer, Thomas; Roloff, Christoph; Bück, Andreas; Tsotsas, Evangelos

Estimation of particle dynamics in 2-D fluidized beds using particle tracking velocimetry
In: Particuology. - Amsterdam: Elsevier, Bd. 22.2015, S. 39-51;
[Imp.fact.: 2,110]

Hallak, Bassem; Herz, Fabian; Specht, Eckehard; Gröpler, Robin; Warnecke, Gerald

Simulation of limestone calcination in normal shaft kilns - Part 1: mathematical model
In: Cement, lime, gypsum. - Gütersloh: Bauverl. BV, 9, S. 66-71, 2015;
[Imp.fact.: 0,071]

Hallak, Bassem; Herz, Fabian; Specht, Eckehard; Gröpler, Robin; Warnecke, Gerald

Simulation of limestone calcination in normal shaft kilns - Part 2: influence of process parameters
In: Cement, lime, gypsum. - Gütersloh: Bauverl. BV, 10, S. 46-50, 2015;
[Imp.fact.: 0,071]

Herz, Fabian; Mitov, I.; Specht, Eckehard; Stanev, R.

Influence of the motion behavior on the contact heat transfer between the covered wall and solid bed in rotary kilns
In: Experimental heat transfer. - London: Taylor & Francis, Bd. 28.2015, S. 174-188;
[Imp.fact.: 0,400]

Janiga, Gábor; Berg, Philipp; Sugiyama, S.; Kono, K.; Steinman, D. A.

The computational fluid dynamics rupture challenge 2013-phase I: prediction of rupture status in intracranial aneurysms

In: American journal of neuroradiology: AJNR. - Oak Brook, Ill: Soc, Bd. 36.2015, 3, S. 530-536;
[Imp.fact.: 3,589]

Janiga, Gábor; Daróczy, László; Berg, Philipp; Thévenin, Dominique; Skalej, Martin; Beuing, Oliver

An automatic CFD-based flow diverter optimization principle for patient-specific intracranial aneurysms

In: Journal of biomechanics: affiliated with the American Society of Biomechanics, the European Society of Biomechanics, the International Society of Biomechanics, the Japanese Society for Clinical Biomechanics and Related Research and the Australian and New Zealand Society of Biomechanics. - Amsterdam [u.a.]: Elsevier Science, Bd. 48.2015, 14, S. 3846-3852;
[Imp.fact.: 2,751]

Karali, Mohamed A.; Sunkara, Koteswara Rao; Herz, Fabian; Specht, Eckehard

Experimental analysis of a flighted rotary drum to assess the optimum loading

In: Chemical engineering science. - Amsterdam [u.a.]: Elsevier Science, Bd. 138.2015, S. 772-779;
[Imp.fact.: 2,337]

Komossa, H.; Wirtz, S.; Scherer, V.; Herz, Fabian; Specht, Eckehard

Heat transfer in indirect heated rotary drums filled with monodisperse spheres: Comparison of experiments with DEM simulations

In: Powder technology: an international journal on the science and technology of wet and dry particulate systems. - Amsterdam [u.a.]: Elsevier Science, Bd. 286.2015, S. 722-731;
[Imp.fact.: 2,349]

Mann, Hannes; Müller, Peter; Hagemeyer, Thomas; Roloff, Christoph; Thévenin, Dominique; Tomas, Jürgen

Analytical description of the unsteady settling of spherical particles in Stokes and Newton regimes

In: Granular matter. - Berlin: Springer, Bd. 17.2015, 5, S. 629-644;
[Imp.fact.: 1,775]

Oeltze-Jafra, Steffen; Cebal, Juan R.; Janiga, Gábor; Preim, Bernhard

Cluster analysis of vortical flow in simulations of cerebral aneurysm hemodynamics

In: IEEE transactions on visualization and computer graphics: TVCG. - New York, NY: IEEE, Bd. 22.2015, 1, S. 757-766;
[Imp.fact.: 2,168]

Ojo, Anthony O.; Fond, Benoit; Wachem, Berend G. M. van; Heyes, Andrew L.; Beyrau, Frank

Thermographic laser Doppler velocimetry

In: Optics letters. - Washington, DC: Soc, Bd. 40.2015, 20, S. 4759-4762;
[Imp.fact.: 3,292]

Penumakala, Pavan Kumar; Nallathambi, Ashok Kumar; Specht, Eckehard; Urlau, Ulrich; Unifantowicz, Paulina

Theoretical estimation of solidification length of continuously cast metals

In: Applied thermal engineering: design, processes, equipment, economics. - Amsterdam [u.a.]: Elsevier Science, Bd. 84.2015, S. 286-291;
[Imp.fact.: 2,739]

Rauchegger, Christian; Bayley, Susan; Schröder, Volkmar; Thévenin, Dominique

Dispersion of heavy gases - experimental results and numerical simulations

In: Process safety progress: AIChE, American Institute of Chemical Engineers. - New York, NY: Inst, Bd. 34.2015, 3, S. 280-285;
[Imp.fact.: 0,464]

Refaey, Hassanein A.; Specht, Eckehard; Salem, M. R.

Influence of fuel distribution and heat transfer on energy consumption in tunnel kilns

In: International Journal of Advances in Engineering & Technology: IJAET. - [S.I.], Bd. 8.2015, 3, S. 281-293;

[Imp.fact.: 2,350]

Schulz, Florian; Schmidt, Jürgen; Beyrau, Frank

Development of a sensitive experimental set-up for LIF fuel wall film measurements in a pressure vessel
In: Experiments in fluids: experimental methods and their applications to fluid flow; research journal. - Berlin: Springer, Bd. 56.2015, 5, insges. 16 S.;
[Imp.fact.: 1,907]

Sponfeldner, T.; Boxx, I.; Beyrau, Frank; Hardalupas, Y.; Meier, W.; aylor, A. M. K. P.

On the alignment of fluid-dynamic principal strain-rates with the 3D flamelet-normal in a premixed turbulent V-flame
In: Proceedings of the Combustion Institute. - Amsterdam [u.a.]: Elsevier, Bd. 35.2015, 2, S. 1269-1276;
[Imp.fact.: 2,262]

Sponfeldner, Thomas; Soulopoulos, Nikolaos; Beyrau, Frank; Hardalupas, Yannis; Taylor, Alex M. K. P.; Vassilicos, J. Christos

The structure of turbulent flames in fractal- and regular-grid-generated turbulence
In: Combustion and flame: the journal of the Combustion Institute. - Amsterdam [u.a.]: Elsevier Science, Bd. 162.2015, 9, S. 3379-3393;
[Imp.fact.: 3,082]

Sunkara, Koteswara Rao; Herz, Fabian; Specht, Eckeard; Mellmann, Jochen

Transverse flow at the flight surface in flighted rotary drum
In: Powder technology. - Amsterdam [u.a.]: Elsevier Science, Bd. 275.2015, S. 161-171;
[Imp.fact.: 2,269]

Yañez Gonzalez, A.; Pilgrim, C. C.; Feist, J. P.; Sollazzo, P. Y.; Beyrau, Frank; Heyes, A. L.

On-Line temperature measurement inside a thermal barrier sensor coating during engine operation
In: Journal of turbomachinery. - New York, NY: ASME; Vol. 137.2015, 10, Art. 101004, insgesamt 9 S.;
[Imp.fact.: 1,003]

Yáñez-González, Álvaro; Ruiz-Trejo, Enrique; Wachem, Berend van; Skinner, Stephen; Beyrau, Frank; Heyes, Andrew

A detailed characterization of BaMgAl 100 17:Eu phosphor as a thermal history sensor for harsh environments
In: Sensors and actuators <Lausanne> / A. - Amsterdam [u.a.]: Elsevier Science, Bd. 234.2015, S. 339-345;
[Imp.fact.: 1,903]

Yu, Hai; Janiga, Gábor; Thévenin, Dominique

Computational fluid dynamics-based design optimization method for archimedes screw blood pumps
In: Artificial organs: official journal of the International Society for Artificial Organs and the International Faculty for Artificial Organs. - Oxford [u.a.]: Wiley-Blackwell, 2015; <http://dx.doi.org/10.1111/aor.12567>;
[Imp.fact.: 2,050]

Zhang, Yu; Wang, Junfeng; Redemann, Tino; Specht, Eckeard

Thermal behavior of kiln cars while traveling through a tunnel kiln
In: Advances in mechanical engineering. - New York, NY: Hindawi, Bd. 7.2015, 5, insges. 8 S.;
[Imp.fact.: 0,500]

Nicht begutachtete Zeitschriftenaufsätze

Hallak, Bassem; Herz, Fabian; Specht, Eckeard; Gröpler, Robin; Warnecke, Gerald

Simulation of limestone calcination in normal shaft kilns - mathematical model
In: ZKG international: Bundesverband der Deutschen Zementindustrie; Bundesverband der Deutschen Kalkindustrie; Bundesverband der Gips- und Gipsbauplattenindustrie. - Walluf: Bauverl, Bd. 68.2015, 9, S. 66-71;

Redemann, Tino; Specht, Eckeard; Rimpel, Eckhard

Limitations of the use of circulation systems and their influence on the temperature and velocity profile in tunnel kilns

In: Ziegelindustrie international: ZI. - Gütersloh: Bauverl, Bd. 68.2015, 4, S. 35-41;

Specht, Eckehard; Sauerhering, Jörg; Schmidt, Jürgen

Abwärmenutzung von Industrieöfen zur Strom- und Kälteerzeugung

In: Gaswärme international: Zeitschrift für gasbeheizte Thermoprozesse; GWI; Zeitschrift für das gesamte Gebiet der Gasverwendung und der gasbeheizten Industrieöfen; Organ des Gaswärme-Instituts - GWI -, Essen, des Bereichs Feuerungstechnik des Engler-Bunte-Instituts der Universität Karlsruhe (TH), des Instituts für Industrieofenbau und Wärmetechnik im Hüttenwesen der Rhein.-Westf. Techn. Hochschule Aachen, des Instituts für Energieverfahrenstechnik des Lehrstuhls Hochtemperaturanlagen, des Institutes für Wärmetechnik und Thermodynamik der TU Bergakademie, Freiberg, und des Fachverbandes Thermoprozess- und Abfalltechnik im Verband Deutscher Maschinen- und Anlagenbau (VDMA) e.V., Frankfurt. - Essen: Vulkan-Verl, Bd. 64.2015, 4, S. 49-55;

Specht, Eckehard; Sauerhering, Jörg; Schmidt, Jürgen

Using waste heat for electricity generation and cooling

In: Heat processing: international magazine for industrial furnaces, heat treatment plants, equipment. - Essen: Vulkan-Verl., 3, S. 113-119, 2015;

Buchbeiträge

Abdelsamie, Abouelmagd; Thévenin, Dominique

Modulation of isotropic turbulence by resolved and non-resolved spherical particles

In: Fröhlich, Jochen.: Direct and Large-Eddy Simulation IX. - Cham: Springer International Publishing, S. 621-629, 2015;

Berg, Philipp; Abdelsamie, Abouelmagd; Janiga, Gábor

Possible transitional flow in a giant intracranial aneurysm: finite volume approach versus Direct Numerical Simulation

In: CMBE15: 4th International Conference on Computational & Mathematical Biomedical Engineering 29th June - 1st July, 2015, Cachan (Paris) France. - Swansea: CMBE, S. 567-570;

Buchtatj, Denis; Dragomirov, Plamen; Thévenin, Dominique; Beyrau, Frank; Bartel, Dirk

Numerische Strömungsberechnung von dieselmotorischen Vorgängen

In: Smart, effizient, mobil: 12. Magdeburger Maschinenbau-Tage; 30. September und 1. Oktober 2015. - Magdeburg: Univ.; 2015, Beitrag A8-4, insgesamt 11 S.;

Dietzsch, F.; Hasse, C.; Fru, Gordon; Thévenin, Dominique

The influence of differential diffusion in turbulent oxygen enhanced methane flames

In: Fröhlich, Jochen.: Direct and Large-Eddy Simulation IX. - Cham: Springer International Publishing, S. 511-517, 2015 - (ERCOFTAC Series; 20);

Dragomirov, Plamen; Sauerhering, Jörg; Beyrau, Frank; Schmidt, Jürgen; Rottengruber, Hermann

Investigation of the combustion of alternative diesel fuels in an optical engine

In: Internationaler Motorenkongress 2015: mit Nutzfahrzeugmotoren - Spezial. - Wiesbaden: Springer Vieweg, S. 465-466;

[Kapitel: Verbrennung Dieselmotor];

Fru, Gordon; Thévenin, Dominique; Markus, Detlev

Direct numerical simulations of turbulent H₂-air pre-mixtures and analysis towards safety-relevant ignition prediction

In: Fröhlich, Jochen.: Direct and Large-Eddy Simulation IX. - Cham: Springer International Publishing, S. 525-531, 2015 - (ERCOFTAC Series; 20);

GlaBer, Sylvia; Hoffmann, Thomas; Boese, Axel; Voß, Samuel; Kalinski, Thomas; Skalej, Martin; Preim, Bernhard

Histology-based evaluation of optical coherence tomographic characteristics of the cerebral artery wall via virtual inflating

In: VCBM 2015: Eurographics Workshop on Visual Computing for Biology and Medicine. - Eurographics Ass., insges. 10 S.;

Janiga, Gábor; Fru, Gordon; Abdelsamie, Abouelmagd; Thévenin, Dominique

Probability of hotspot ignition in turbulent hydrogen-air mixtures using Direct Numerical Simulations

In: Proceedings of the European Combustion Meeting. - Budapest; 2015, Beitrag P3-81, insgesamt 6 S.[Beitrag auf USB-Stick];

Kerst, Kristin; Medeiros de Souza, Luis; Bartz, Antje; Seidel-Morgenstern, Andreas; Janiga, Gábor

CFD-DEM simulation of a fluidized bed crystallization reactor

In: Computer aided chemical engineering. - Amsterdam [u.a.]: Elsevier, Bd. 37.2015, S. 263-268;

Kovats, Peter; Thévenin, Dominique; Zähringer, Katharina

Experimentelle Untersuchung von Strömungsfeldern in den Zwischenräumen grober Schüttungen

In: Lasermethoden in der Strömungsmesstechnik: 23. Fachtagung, 8. - 10. September 2015, Dresden. - Karlsruhe: Deutsche Gesellschaft für Laser-Anemometrie GALA e.V.; 2015, Art. 54, insgesamt 7 S.;

Specht, Eckehard; Mohammadpour, Kamyar; Al-Khalaf, Mohammed Ridha

Ermittlung der Flammenlänge von gasförmigen Brennstoffen in Schachttöfen

In: Verbrennung und Feuerung: 27. Deutscher Flammentag, Clausthal-Zellerfeld, 16. und 17. September 2015. - Düsseldorf: VDI-Verl., S. 291-299 - (VDI-Berichte; 2267);

Theile, Martin; Hassel, E.; Thévenin, Dominique; Buchholz, B.

Analyse der Gemischbildung eines saughubeinspritzenden Ottomotors mit der Grobstruktursimulation

In: Smart, effizient, mobil: 12. Magdeburger Maschinenbau-Tage; 30. September und 1. Oktober 2015. - Magdeburg: Univ.; 2015, Beitrag A8-1, insgesamt 11 S.[Beitrag auf CD-ROM];

Voß, Samuel; Glaßer, Sylvia; Hoffmann, Thomas; Janiga, Gábor

Fluid-Struktur-Simulationen von zerebralen Blutgefäßen und Aneurysmen

In: Smart, effizient, mobil: 12. Magdeburger Maschinenbau-Tage; 30. September und 1. Oktober 2015. - Magdeburg: Univ.; 2015, Betrag B-2, insgesamt 10 S.[Beitrag auf CD-ROM];

Zähringer, Katharina; Wagner, Lisa-Maria; Kovats, Peter; Thévenin, Dominique

Experimental characterization of the mass transfer from gas to liquids in a two-phase bubble column

In: 7th International Berlin Workshop - IBW7 on Transport Phenomena with Moving Boundaries and More: 30th - 31st October 2014. - Düsseldorf: VDI-Verl, S. 82-90, 2015 - (Fortschritt-Berichte VDI: Reihe 3, Verfahrenstechnik; 947);

Zeitz, Volker; Varga, Patrick; Schmidt, Jürgen; Rottengruber, Hermann

Simulation of heat transfer with variation on the operating conditions

In: Proceedings of the 2nd Conference on Engine Processes: July 2-3, 2015, Berlin, Germany. - Berlin, S. 339-355;

Zhao, Peng; Specht, Eckehard; Song, Xin Nan

Influence of jet velocities and material properties in quenching of metal with array of jets

In: Advanced materials research. - Zug: Scitec Publ, Bd. 1090.2015, S. 63-68;

Artikel in Kongressbänden

Daroczy, Laszlo; Janiga, Gábor; Thévenin, Dominique

Correlation of the power coefficients of H-Darrieurs wind turbines obtained using different turbulence models in CFD computations

In: Conference on Modelling Fluid Flow, CMFF '15. - Budapest; 2015, Beitrag CMFF15-017, insgesamt 8 S.[Beitrag auf USB-Stick];

Daroczy, Laszlo; Mohamed, M. H.; Thévenin, Dominique

Numerical aero-acoustics assessment of double-airfoil vertical axis wind turbine

In: Fortschritte der Akustik: DAGA 2015, Nürnberg; 16. - 19. März 2015; 41. Jahrestagung für Akustik; Tagungsband. - Berlin: Dt. Ges. für Akustik, S. 534-537;

Eger, Toni; Thévenin, Dominique; Janiga, Gábor; Bol, Thomas; Schroth, Rüdiger

Numerical investigations of residence time distribution of air in electric machines based on a canonical configuration
In: Conference on Modelling Fluid Flow, CMFF '15. - Budapest; 2015, Beitrag CMFF15-034, insgesamt 8 S.[Beitrag auf USB-Stick];

Eshghinejadfard, Amir; Janiga, Gábor; Thévenin, Dominique

Calculation of the permeability in porous media using the Lattice Boltzmann method
In: Conference on Modelling Fluid Flow, CMFF '15. - Budapest; 2015, Beitrag CMFF15-052, insgesamt 7 S.[Beitrag auf USB-Stick];

Herz, Fabian; Hallak, Bassem; Specht, Eckehard

Experimental study of the combustion of lump py coke and anthracite particles
In: 10th European Conference on Industrial Furnaces and Boilers: INFUB; Gaia (Porto), Hotel Holiday Inn Gaia, Portugal, 7 - 10 April 2015. - Gaia (Porto), insges. 8 S.;

Herz, Fabian; Hallak, Bassem; Specht, Eckehard; Gröpler, Robin; Warnecke, Gerald

Simulation of the limestone calcination in normal shaft kilns
In: 10th European Conference on Industrial Furnaces and Boilers: INFUB; Gaia (Porto), Hotel Holiday Inn Gaia, Portugal, 7 - 10 April 2015. - Gaia (Porto), insges. 10 S.;

Komossa, Hendrik; Wirtz, S.; Scherer, Viktor; Herz, Fabian; Specht, Eckehard

DEM investigation of transversal mixing and temperature evolution in rotary drums
In: Proceedings of the 11th International Conference on Heat Transfer, Fluid Mechanics and Thermodynamics, HEFAT 2015. - EDAS, S. 743-748;

Kovats, Peter; Thévenin, Dominique; Zähringer, Katharina

Fluidynamical characterization of a bubble column for investigation of mass-transfer
In: Conference on Modelling Fluid Flow, CMFF '15. - Budapest; 2015, Beitrag 67, insgesamt 7 S.;

Meyer, Jan; Daroczy, Laszlo; Janiga, Gábor; Thévenin, Dominique

Using 3D shape optimization to reduce turbulent mixing losses inside the rotor cavity of a Pitot-Tube-Jet-Pump for fluid-fluid separation
In: Conference on Modelling Fluid Flow, CMFF '15. - Budapest; 2015, Beitrag CMFF15-064, insgesamt 8 S.[Beitrag auf USB-Stick];

Nafsun, Aainaa; Herz, Fabian; Specht, Eckehard; Komossa, Hendrik; Wirtz, S.

Experimental investigation of thermal bed mixing in rotary drums
In: Proceedings of the 11th International Conference on Heat Transfer, Fluid Mechanics and Thermodynamics, HEFAT 2015. - EDAS, S. 643-648;

Ranga Dinesh, K. K. J.; Shalaby, H.; Luo, K. H.; Thévenin, Dominique

Influence of preferential diffusion in turbulent lean premixed hydrogen-rich syngas spherical flames at elevated pressure
In: Proceedings of the European Combustion Meeting. - Budapest; 2015, Beitrag P4-28, insgesamt 6 S.;

Ranga Dinesh, K.K.J.; Shalaby, H.; Luo, K.H.; Thévenin, Dominique

Flame structure analysis for turbulent lean premixed spherical flames at elevated pressures
In: Proceedings of the European Combustion Meeting. - Budapest; 2015, Beitrag P4-27, insgesamt 6 S.;

Schießl, R.; Bykov, V.; Maas, U.; Abdelsamie, Abouelmagd; Thévenin, Dominique

The (mis)alignment of diffusive fluxes in turbulent combustion: DNS analysis and treatment in the Reaction-Diffusion Manifold (REDIM) model
In: Proceedings of the European Combustion Meeting. - Budapest; 2015, Beitrag P4-63, insgesamt 6 S.;

Zähringer, Katharina; Pliavaka, K.; Thévenin, Dominique

Influence of oxygen excitation by a RF plasma discharge on the flow field of atmospheric partially-premixed CH₄/O₂ and

H2/O2 flames

In: Proceedings of the European Combustion Meeting. - Budapest; 2015, Beitrag P5-22, insgesamt 5 S.;

Dissertationen

Backofen, Dennis; Tschöke, Helmut [Gutachter]; Schmidt, Jürgen [Gutachter]

Höchstdruckeinspritzung alternativer Dieselmotoren. - Zugl.: Magdeburg, Univ., Fak. für Maschinenbau, Diss., 2015; Göttingen: Cuvillier Verl.; 184 S.: graph. Darst., ISBN 978-3-7369-9139-2;

Baer, Stephan; Schmidt, Jürgen [Gutachter]; Specht, Eckehard [Gutachter]; Tobiska, Lutz [Gutachter]

Wärmeübergang bei der Sprühkühlung mit intermittierenden Sprays im Film- und Übergangssiedebereich. - Magdeburg, Univ., Fak. für Verfahrens- und Systemtechnik, Diss., 2015; 148 S.: graph. Darst.;

Berg, Philipp; Specht, Eckehard [Gutachter]; Thévenin, Dominique [Gutachter]

CFD-basierte hämodynamische Untersuchung patientenspezifischer intrakranieller Aneurysmen. - Magdeburg, Univ., Fak. für Verfahrens- und Systemtechnik, Diss., 2015, 2014; XI, 206 S.: graph. Darst.;

Karali, Mohamed Ahmed Mahmoud; Specht, Eckehard [Gutachter]; Herz, Fabian [Gutachter]

Analysis study of the axial transport and heat transfer of a flighted rotary drum operated at optimum loading. - Magdeburg, Univ., Fak. für Verfahrens- und Systemtechnik, Diss., 2015; XVIII, 125 S.: graph. Darst.;

Löhnert, Andrea; Krause, Ulrich [Gutachter]; Thévenin, Dominique [Gutachter]

Modellierung von Brandszenarien mit CFD unter Berücksichtigung des Einflusses der Brandrauchzusammensetzung auf die Toxizität und Sichtweiten. - Magdeburg, Univ., Fak. für Verfahrens- und Systemtechnik, Diss., 2015; XII, 158 Bl.: III., graph. Darst.;

Specht, Eckehard [Gutachter]

Heat transfer analysis in metal quenching with sprays and jets. - Zugl.: Magdeburg, Univ., Fak. für Verfahrens- und Systemtechnik, Diss., 2015; Barleben: docupoint; XIII, 151 S.: graph. Darst.; 21 cm, ISBN 978-3-86912-206-9;

Yu, Hai; Thévenin, Dominique [Gutachter]

Flow design optimization of blood pumps considering hemolysis. - Magdeburg, Univ., Fak. für Verfahrens- und Systemtechnik, Diss., 2015; XII, 133 S.: graph. Darst.;

Zistl, Christiane; Krause, Ulrich [Gutachter]; Thévenin, Dominique [Gutachter]

File-based post-processing of DNS results for turbulent flames using MATLAB. - Magdeburg, Univ., Fak. für Verfahrens- und Systemtechnik, Diss., 2015; 184 S.: graph. Darst.;

INSTITUT FÜR VERFAHRENSTECHNIK

Universitätsplatz 2, 39106 Magdeburg
Tel. +49 (0)391 67 58784, Fax +49 (0)391 67 11160
evangelos.tsotsas@ovgu.de

1. Leitung

Prof. Dr.-Ing. habil. Andreas Seidel-Morgenstern
Prof. Dr.-Ing. Udo Reichl
Prof. Dr.-Ing. habil. Kai Sundmacher
Prof. Dr.-Ing. habil. Evangelos Tsotsas (geschäftsführender Leiter)
Prof. Dr.-Ing. habil. Jürgen Tomas
Hon.-Prof. Dr. Mirko Peglow
Jun.-Prof. Dr. Andreas Bück
Jun.-Prof. Dr. Timo Frensing
Dr.-Ing. Andreas Voigt
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
Hon.-Prof. Dr. Mirko Peglow
Jun.-Prof. Dr. Andreas Bück
Jun.-Prof. Dr. Timo Frensing

3. Forschungsprofil

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

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

2. Bioprozesstechnik (Prof. Dr.-Ing. U. Reichl, Jun.-Prof. Timo Frensing)

- Fermentationstechnik
- Säugerzellen, Hefen, Bakterien
- Aufarbeitungstechnik
- Modellierung, Simulation und Optimierung von Bioprozessen
- Prozessüberwachung und -regelung

3. Systemverfahrenstechnik (Prof. Dr.-Ing. habil. K. Sundmacher)

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

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

- Ultrafeine Partikel, Nanopartikel
- Mehrskalige Simulation der Mechanik von Schüttungen
- Partikeltrennung (Sortierung, Klassierung)
- Grundlagen der Partikelmesstechnik
- Wertstoffrecycling

5. Thermische Verfahrenstechnik (Prof. Dr.-Ing. habil. E. Tsotsas, Jun.-Prof. A. Bück, Hon.-Prof. M. Peglow)

- Trocknungstechnik
- Wirbelschichttechnik
- Partikelformulierung (Agglomeration, Granulation, Coating)
- Strukturelle Charakterisierung (u.a. X-ray micro-CT)
- Diskrete Modellierung (u.a. Porennetzwerke)

4. Kooperationen

- AVA - Anhaltinische Verfahrens- und Anlagentechnik GmbH, Magdeburg
- BASF AG, Ludwigshafen
- Department of Mechanical Engineering der Universität Delaware (USA)
- Evonik AG, Hanau
- Fraunhofer IFF, Magdeburg
- Glatt Ingenieurtechnik Weimar
- Helmholtz-Zentrum für Infektionsforschung, Braunschweig
- IDT Biologika GmbH, Dessau-Roßlau
- Instituto de Biologia Experimental e Tecnológica, Lissabon (Portugal)
- IPT Pergande, Weißandt-Gölzau
- Max-Planck-Institut für Dynamik komplexer technischer Systeme Magdeburg
- ProBioGen AG, Berlin
- Sartorius Stedim Biotech GmbH, Göttingen
- TU Dortmund
- TU Hamburg-Harburg
- Weierstraß-Institut, Berlin

5. Forschungsprojekte

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

Projektbearbeiter: Dr. Rui Wu, Dr.-Ing. Abdolreza Kharaghani

Kooperationen: University of Shanghai for Science and Technology, China

Förderer: Alexander von Humboldt-Stiftung; 01.04.2014 - 30.12.2015

Convective drying of PEM fuel cell with gas purge flow

Water management in the gas diffusion layer of a PEM fuel cell is of essential importance for performance and reliability. Since the porous layer is very thin, the use of discrete approaches is necessary for accurate simulation. To this purpose, pore network models are developed and applied, with emphasis on drying by means of a gas purge flow.

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

Projektbearbeiter: MSc. Alireza Maghaddam, Dr.-Ing. Abdolreza Kharaghani

Förderer: Deutsche Forschungsgemeinschaft (DFG); 01.10.2013 - 15.10.2016

Estimation of effective parameters from pore network drying simulations

Pore network models are unique in connecting structural features of porous media with their macroscopic properties in order to, e.g., find out how long a wet material would take to dry. On the other hand, pore network models require a much longer computational time than numerical solution of differential equations for description of transport phenomena at the macro-scale. Therefore, methods are developed for extracting effective transport coefficients from the results of pore network simulations. When successful, this approach can provide both, description of the influence of material structure and computational speed.

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 Wirbelschichtströmen

Viele industrielle Anwendungen verlangen eine gleichmäßige Verteilung der Feuchte bzw. der Beschichtungsdicke unter allen Einzelpartikeln eines partikulären Produkts. Zu diesem Zweck werden sogenannte Wirbelschichtströme 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. Reihaneh Pashminehazar, Dr.-Ing. Abdolreza Kharaghani

Förderer: Deutsche Forschungsgemeinschaft (DFG); 01.09.2013 - 31.08.2016

Micro-structure of particles produced by fluidized bed agglomeration of soft materials

The structure of agglomerates produced in spray fluidized beds out of rigid primary particles has been investigated in a pre-cursor project. It was shown, how morphological descriptors (among others, porosity, fractal properties) can be extracted from X-ray micro-tomography scans, and how such descriptors depend on operating parameters of the particle formulation process. This investigation is now being extended to soft primary particles, which are of great interest for the food and pharmaceutical industry.

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

Projektbearbeiter: MSc. Arman Rahimi, Dr.-Ing. Abdolreza Kharaghani

Förderer: Industrie; 01.05.2013 - 30.04.2016

Pore network model for simultaneous wetting and drying with salt solutions

Simultaneous wetting of porous particles with droplets of a salt solution sprayed on them and drying leads to deposition of the salt (solidified solute) in the porous material with various technical applications. Distribution of the salt depends, among others, on the drying conditions and the internal structure of the porous substrate. Such influences on the combined process of wetting and drying are investigated by means of pore network models. Validation experiments are conducted in micro-fluidic devices.

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

Projektbearbeiter: MSc. Kieu Hiep Le, Dr.-Ing. Abdolreza Kharaghani

Förderer: Weitere Stiftungen; 01.01.2014 - 31.12.2016

Pore network modeling of fluid transport in loop heat pipe

Evaporation at a hot-spot and condensation at a cold-spot can transport heat with a higher effective thermal conductivity than that of any existing material. This principle is used in so-called heat pipes. Here, a specific type of heat-pipe evaporator is considered, which involves evaporation out of a wet porous wick in contact with a hot fin into vapor transportation grooves. Pore network models are used for simulating transport phenomena and liquid distribution in the wick, aiming at the identification of optimal operating conditions and wick structures.

Projektleiter: Prof. Dr.-Ing. habil. Evangelos Tsotsas
Projektbearbeiter: Prof. Jitendra Kumar
Kooperationen: Indian Institute of Technology Kharagpur
Förderer: Alexander von Humboldt-Stiftung; 01.12.2013 - 31.07.2015

Simulation of agglomeration processes

Novel methods are developed for casting the way micro-scale processes are described in discrete models (Monte Carlo) into the formalism of macro-scale population balance equations. Such scale-transition techniques allow for both, computational efficiency and physically based modelling. Aggregation as well as breakage processes are considered, along with background numerical tools.

Projektleiter: Prof. Dr.-Ing. habil. Evangelos Tsotsas
Projektbearbeiter: M.Sc. Maciej Jaskulski; M.Sc. Thi Thu Hang Tran
Förderer: Weitere Stiftungen; 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. Udo Reichl
Projektbearbeiter: M.Sc. T. Laske
Förderer: Bund; 01.01.2013 - 31.08.2016

e:Bio - Modul II - Verbundprojekt: CellSys - Systembiologischer Ansatz zur Entwicklung einer Produktionszelllinie für Influenzavakzine - Teilprojekt A

Das Ziel des Verbundprojekts CellSys ist die Optimierung eines zellkulturbasierten Prozesses zur Herstellung von Influenzaimpfstoffen mit Hilfe eines systembiologischen Ansatzes. Dabei sollen Ergebnisse aus der Grundlagenforschung genutzt werden, um die Virusvermehrung in einer humanen Designerzelllinie durch gentechnische Eingriffe gezielt zu steigern und so eine Hochleistungs-Produktionsplattform für Grippeimpfstoffe zu entwickeln.

Projektleiter: Prof. Dr.-Ing. habil. Dr. h.c. Andreas Seidel-Morgenstern
Förderer: Deutscher Akademischer Austauschdienst e.V. (DAAD); 01.01.2015 - 31.12.2016

Dimerization of ethene combined with the metathesis of ethene and 2-butene for the production of propene

Der Propenbedarf ist in den letzten Jahrzehnten stetig gestiegen. Eine frühere Arbeit hat einen Ni-Katalysator auf aluminisiertem MCM-41 Zeolithen hervorgebracht, der sehr viel versprechend aus Ethen über die Dimerisierung zu Buten, Isomerisierung zu 2-Buten und der anschließenden Metathese von Ethen und 2-Buten Propen herstellt.

Für eine Intensivierung der Einzelschritte eine Aufspaltung in ein Zwei-Reaktor-Konzept vorteilhaft, durch die Entkopplung des Metatheseschrittes.

Dafür erfolgt Katalysatorscreening, mit typischen Metallen wie Re, W und Mo auf verschiedenen Träger. Des Weiteren sollen die Systeme kinetisch beschrieben werden.

Projektleiter: Prof. Dr.-Ing. habil. Dr. h.c. Andreas Seidel-Morgenstern
Förderer: Deutsche Forschungsgemeinschaft (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: Deutsche Forschungsgemeinschaft (DFG); 01.10.2011 - 30.09.2015

SPP 1570 "Poröse Medien mit definierter Porenstruktur in der Verfahrenstechnik - Modellierung, Anwendungen, Synthese"

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. Kai Sundmacher

Projektbearbeiter: Dr. rer.nat. Andreas Voigt

Förderer: Industrie; 01.03.2013 - 31.03.2016

Erforschung von geeigneten Fällungsbedingungen für nanoskalige Naturfarbstoffe

Die Erzeugung nanoskaliger Naturfarbstoffe als stabile Dispersionen wird durch die Variation von physikalisch-chemischen Prozessparametern untersucht und aus experimentellen Daten und theoretischen Modellüberlegungen heraus geeignete Bedingungen für eine technische Umsetzung abgeleitet.

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

Förderer: Bund; 04.06.2014 - 31.05.2017

Identifizierung neuer zellmoleküle für die klinische Therapie der akuten myeloischen Leukämie (AML)

In interdisziplinären und translationalen Forschungsansätzen werden in diesem Verbundprojekt therapeutische Zielmoleküle zur Behandlung der akuten myeloischen Leukämie (AML) identifiziert. Die selektive Inhibition von NF- κ B und die daraus folgende Induktion der Apoptose stellt eine vielversprechende Therapiestrategie bei der Behandlung der AML dar. Das Forschungsvorhaben adressiert eine detaillierte, qualitative und quantitative Untersuchung regulatorischer Schlüssel-moleküle. Die Erkenntnisse tragen zur Entwicklung therapeutischer Interventionsstrategien, insbesondere zur Individualtherapie, bei und können zudem zur Identifizierung wichtiger Biomarker bei der Diagnose der AML führen. Die Untersuchungen werden durch *high-end* Massenspektrometrie und Proteinanalytik unterstützt. Durch systemtheoretische und mathematische Methoden, die auf Boole'schen Netzwerkanalysen und Differenzialgleichungen (ODEs) beruhen, werden die relevanten Moleküle in Modellsimulationen einbezogen. Die iterative Interaktion zwischen Experiment und Modellsimulation soll zur Identifizierung und Validierung geeigneter Interventionsstrategien gegen AML führen. Anschließende Studien werden dann, in Zusammenarbeit mit pharmazeutischen Unternehmen, auf die Entdeckung von aktiven Wirkstoffen abzielen, um für präklinische und klinische Studien wirksamere Therapien zu erforschen. Das Projekt zeichnet sich durch ein hohes Maß an Interdisziplinarität aus, denn es verbindet die Forschungsgebiete der klinischen und experimentellen Onkologie mit biochemischer Systembiologie und Systemtheorie. Diese enge Zusammenarbeit stellt eine Grundlage für die Entwicklung neuer, innovativer Therapiestrategien zur Behandlung der AML dar.

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

Projektbearbeiter: Viktoria Wiedmeyer, Dr. rer. nat. Andreas Voigt

Förderer: Deutsche Forschungsgemeinschaft (DFG); 01.10.2013 - 30.09.2017

Numerische Lösungsverfahren für gekoppelte Populationsbilanzsysteme zur dynamischen Simulation multivariater Feststoffprozesse am Beispiel der formselektiven Kristallisation

Feststoffprozesse in der Verfahrenstechnik lassen sich durch Populationsbilanzsysteme beschreiben. Hierbei handelt es sich im Allgemeinen um ein gekoppeltes System von partiellen Differential-gleichungen zur Charakterisierung der kontinuierlichen Phase, und einer Populationsbilanzgleichung zur Beschreibung der Feststoffphase.

Im Rahmen dieses Projektes sollen in Kooperation mit dem WIAS-Berlin, sowie der TU Hamburg Harburg neue Verfahren zur effizienten und akkuraten Lösung solcher Populationsbilanzsysteme entwickelt werden. Dies soll am Beispiel der formselektiven Kristallisation erfolgen. Zur Simulation der formselektiven Kristallisation werden neben geeigneten Lösungsverfahren auch formspezifische Kristallisationskinetiken, wie z.B. Wachstums- oder Agglomerationsraten benötigt, welche in verschiedenen Versuchsanlagen bestimmt werden sollen. Mit Hilfe der gewonnenen Kinetiken, sowie der entwickelten numerischen Lösungsverfahren, soll abschließend ein Prozess zur kontinuierlichen formselektiven Kristallisation entworfen und optimiert werden.

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

Förderer: Deutsche Forschungsgemeinschaft (DFG); 01.01.2014 - 31.12.2017

SFB/TR 63: Integrierte chemische Prozesse in flüssigen Mehrphasensystemen - TP B1: Optimale Reaktionsführung in flüssigen Mehrphasensystemen / 2.Förderperiode

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 wichtige Funktionen innerhalb des SFB/TR. Zum Einen wird eine Methodik für die optimale Reaktionsführung und die ideale Reaktorgestaltung als generische Fragestellung entwickelt. Zum Anderen werden konkrete Reaktorkonzepte für den im SFB/TR behandelten Hydroformylierungsprozess langkettiger Alkene in temperaturgesteuerten Lösungsmittelsystemen entworfen. Diese werden apparativ realisiert und hinsichtlich ihres reaktionstechnischen und strömungstechnischen Realverhaltens charakterisiert. Danach wird der resultierende optimale Reaktor in Kooperation mit dem Teilprojekt B5 in eine Mini-plant integriert, um das Reaktorverhalten im Gesamtprozess mit geschlossen Rückführungsströmen zu untersuchen und robust auszulagen. Das Teilprojekt B1 übernimmt dabei eine wichtige Brückenfunktion für den SFB/TR, indem es alle drei Projektbereiche miteinander verknüpft.

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

Projektbearbeiter: Dr. rer.nat. Andreas Voigt

Förderer: Industrie; 01.08.2014 - 28.02.2016

Untersuchungen zur formgestalteten Aminosäurekristallisation

Die Kristallisation von Aminosäuren als Zwischenschritt eines Trennprozesses wird unter dem Aspekt der formgesteuerten Kristallbildung experimentell und modelltheoretisch untersucht um daraus optimale Bedingungen für die Abtrennung ableiten zu können.

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

Projektbearbeiter: Dipl. Ing. Holger Eisenschmidt

Förderer: Deutsche Forschungsgemeinschaft (DFG); 01.04.2013 - 31.03.2016

Zyklische Prozessführung zur Formgebung facettierter Kristalle

Die finale Form von Kristallen hat einen großen Einfluss auf die Feststoffeigenschaften von kristallinen Produkten. Gewöhnlich geschieht die Formgebung von Kristallen unter Verwendung von Additiven, die das Wachstum bestimmter Kristallflächen hemmen, oder der Verwendung spezieller Lösungsmittel. Im Rahmen dieses Projektes soll die Kristallform über die Abhängigkeiten der relativen Wachstumsraten der Kristallflächen von der Übersättigung, und damit der Temperatur beeinflusst werden.

Da nur ein bestimmter Übersättigungsbereich für die Kühlungskristallisation verwendet werden kann, kann nicht jede Kristallform mittels eines Wachstumsvorgangs erhalten werden. Dieser erreichbare Bereich kann erweitert werden, indem zusätzliche Auflösungs- und/oder Wachstumsphasen vorgesehen werden. Im Rahmen des Projektes sollen optimale Strategien zur Erzeugung eier gewünschten Kristallform gefunden, und experimentell realisiert werden.

Projektleiter: Prof. Dr. Jürgen Tomas

Projektbearbeiter: Dr.-Ing. Peter Müller, Tel. +49 (0)391 67 51886

Förderer: Haushalt; 13.01.2013 - 13.01.2018

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

Projektbearbeiter: Dr.-Ing. Andreas Schlinkert, Tel. +49 (0)391 67 54911

Förderer: Fördergeber; 01.01.2012 - 31.12.2016

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: M.Sc. Talea Hopf, +49 (0)391 67 52001

Förderer: Deutsche Forschungsgemeinschaft (DFG); 01.01.2013 - 15.04.2016

Funktionalisierung von Nanopartikeln 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

Förderer: Deutsche Forschungsgemeinschaft (DFG); 30.04.2014 - 31.03.2019

GRK 1554 "Graduiertenkolleg Mikro-Makro-Wechselwirkungen in strukturierten Medien und Partikelsystemen"

Many materials or media in nature and technology possess a microstructure, which determines their macro behaviour. Despite of possible difficulties to describe the morphology of this structure, the knowledge of the relevant mechanisms is often more comprehensive on the micro than on the macro scale. On the other hand, not all information on the micro level is relevant for the understanding of the macro behaviour. Therefore, averaging and homogenization methods are needed to select only the specific information from the micro scale, which influences the macro scale. These methods would also open the possibility to design or to influence microstructures with the objective to optimize their macro behaviour. Study and development of new methods in this interdisciplinary field of actual research will be under the supervision of professors from different engineering branches, applied mathematics, theoretical, and computational physics.

Projektleiter: Prof. Dr. Jürgen Tomas

Projektbearbeiter: Zhang Xiwei, Tel. +49 (0)391 67 52001

Förderer: Fördergeber; 01.10.2014 - 30.09.2018

Herstellung siRNA-modifizierter PBCA-Nanopartikel zur Überwindung der Blut-Hirn-Schranke

Gegenwärtig sind etwa 98 Prozent der zugelassenen Pharmazeutika nicht in der Lage, die Blut-Hirn-Schranke zu überwinden. Therapeutisch wirksame Proteine, wie Antikörper, Wachstumsfaktoren oder RNA, haben heutzutage enorm an Bedeutung gewonnen als ein innovativer Ansatz zur Behandlung von Erkrankungen des zentralen Nervensystems. Der Transport dieser Proteine durch die Blut-Hirn-Schranke mit Hilfe von oberflächenmodifizierten Nanopartikel-Systemen auf Basis von Polybutylcyanoacrylat (PBCA) bietet den Vorteil, dass die wirksamen Proteine während der Applikation geschützt sind, die Blut-Hirn-Schranke überwinden können und so das Zellgewebe und die Neuronen erreichen.

In diesem Projekt werden Nanopartikel aus Polybutylcyanoacrylat mit Hilfe des Emulsions- und Miniemulsionspolymerisationsprozesses hergestellt, wobei die PBCA-Partikeloberfläche u.a. mit Tween 80, Dextran etc. modifiziert wird. Zur Sichtbarmachung der Partikel wird ein Fluoreszenzmarker, wie Rhodamin, verwendet. Die siRNA soll an das PBCA-Nanopartikel gebunden werden, um so im Gehirn einen Hauptmittler für den Zelltod, das Caspase 3, stillzulegen.

Projektleiter: Prof. Dr. Jürgen Tomas

Projektbearbeiter: M.Sc. Muhammad Kamran Khalid, Tel. +49 (0)391 67 54952

Förderer: Haushalt; 01.01.2015 - 31.12.2016

Maßgeschneiderte superparamagnetische Nanopartikel für Anwendungen in Medizin und Pharmazie

Superparamagnetische Eisenoxid-Nanopartikel (SPIO-NP), wie Magnetit Fe₃O₄ und Maghemit -Fe₂O₃, 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-Arndt, Tel. +49 (0)391 67 51886

Förderer: Deutsche Forschungsgemeinschaft (DFG); 01.07.2014 - 30.06.2016

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: M.Sc. Zinaida Todorova, Tel.: +49 (0)391 67 54912

Förderer: Deutsche Forschungsgemeinschaft (DFG); 01.10.2012 - 31.10.2016

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: Prof. Dr. Jürgen Tomas

Förderer: Deutsche Forschungsgemeinschaft (DFG); 01.01.2015 - 31.12.2017

Statische und dynamische Beanspruchung elastischer, plastischer und viskoser Granulate

Ziel dieses Projektes ist die Modellierung der verteilten mechanischen Eigenschaften von inhomogenen Feststoffen, wie z.B. Agglomerate. Es soll ein Master-Modell für die Beschreibung der zeitunabhängigen und zeitabhängigen Deformation gefunden werden, um so die Herstellung von feuchten Granulaten zu optimieren. letztendlich werden Methoden gefunden, um Designergranulate herstellen zu können. Somit ist eine qualitative Analyse der Einflüsse von Prozess- u. Umweltbedingungen auf Agglomerate und die Produktqualität möglich.

Projektleiter: Prof. Dr. Jürgen Tomas

Projektbearbeiter: M.Sc. Zheni Radeva, Tel. +49 (0)391 6754931

Förderer: Deutsche Forschungsgemeinschaft (DFG); 01.01.2015 - 31.12.2017

Untersuchung, Modellierung und Simulation der quasistatischen Druckbeanspruchung gebundener Modellpellets

Als Gegenstand dieses Projektes werden die experimentelle Untersuchung, Modellierung und Simulation des Druck- und Bruchverhaltens von Pellets unterschiedlicher Struktur, Größe und Form ausgewählt. In dem ersten Projektschritt sollen Pellets bekannter Primärpartikelanzahl mit zufälliger Packungsstruktur experimentell untersucht werden. Die 3D-Struktur einiger ausgewählter Pellets soll mittels REM und μ -Computertomographie vor mechanischer Beanspruchung analysiert werden. Die Anzahl der Primärpartikel soll ermittelt werden. Die Koordinaten der Feststoffbrücken zwischen den Partikeln sollen aufgenommen werden. Die Pellets sollen danach bis zum Bruch belastet werden. Das quasistatische Druckverhalten der Packungsstrukturen soll ausführlich analysiert werden. Der nächste Ansatzpunkt stellt die Modellierung der Pellets mittels der DEM dar. Die mit der μ -Computertomographie abgebildeten Pellets können in 3 Dimensionen nachgebildet und modelliert werden. Die erforderlichen Stoffwerte und Parameter zur Kalibrierung der Primärpartikel werden aus vorausgegangenen Arbeiten entnommen. Das Druck- und Bruchverhalten der Pellets soll dann mit weiterführenden Simulationen modelliert werden. In diesem Schritt sollen die Kraft-Weg-Kurven der modellierten Pellets beim Druckversuch mit den experimentell ermittelten Kraft-Weg-Kurven kalibriert werden. Die Wechselwirkungen in der Mikro- und Makrostruktur der Pellets sollen bestimmt werden, der Verlauf von Spannungen und die Rissentstehung und -ausbreitung werden detailliert verfolgt. Zusätzlich sollen die Energiewerte und die verrichtete Verformungsarbeit aufgezeichnet werden. Damit werden tiefere Einblicke in die Ursachen und die komplexe Dynamik der Bruchprozesse von Granulaten erhalten. Die weiteren Forschungsziele dieses Projekts umfassen die Herstellung und Untersuchung der Modellpellets mit Primärpartikeln, deren Durchmesser im Mikrometer-Bereich liegt. Die Anwendbarkeit neuer Bindemittel wie mikrokristalline Zellulose, Polyvinylacetat, Polyurethane soll überprüft werden.

Projektleiter: Jun.-Prof. Dr.-Ing. Andreas Bück

Projektbearbeiter: Fischer, Hagemeier, Rieck, Schmidt, Sondej

Förderer: Bund; 01.04.2013 - 30.03.2018

InnoProfile-Transfer Nachwuchsforschungsgruppe Wirbelschichttechnik - NaWiTec

Das am Lehrstuhl für Thermische Verfahrenstechnik (Prof. Dr.-Ing. habil. E. Tsotsas) angesiedelte Projekt befasst sich mit der Entwicklung von Methoden und experimentellen Untersuchungen zur Führung und Gestaltung strukturierter Partikel in Wirbelschichtprozessen. Wirbelschichtprozesse finden zahlreiche Anwendung, u.a. in der pharmazeutischen Industrie, der Lebensmittel- und der Düngemittelindustrie. Zielstellung ist dabei stets aus einem flüssigen Ausgangsstoff ein staubfreies, frei fließendes Granulat oder Agglomerat herzustellen. Bereits während der Herstellung sollen den Produktpartikeln bestimmte Eigenschaften aufgeprägt werden, die in der späteren Nutzung des Produktes benötigt werden, z.B. die Partikelgröße oder die Partikelfeuchte, die wichtige Eigenschaften wie das Auflösungsverhalten oder die Transport- und Lagerfähigkeit bestimmen. Bei der Partikelbildung kommt es zur Ausbildung von Strukturen, z.B. die Schichtporosität, als auch die durch den Verbund mehrerer Partikel zu Agglomeraten entstehenden Partikelstrukturen. Da die Partikelstrukturen wesentlichen Einfluss auf die Produktcharakteristik haben, ist die genaue Kenntnis der ablaufenden strukturbildenden Prozesse von großem Interesse. Die Schwerpunkte der Forschungsarbeiten sind daher die Untersuchung und Beschreibung der strukturbildenden Prozesse, die Erprobung und Weiterentwicklung von (in-situ-)Messmethoden zur Erfassung des Strukturaufbaus sowie die Entwicklung von Regelungskonzepten zur gezielten Einstellung gewünschter Strukturen in den Produkten sein.

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. Diese 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
- + Strömungs- und DEM-Simulation

Experimentell stehen unter anderem folgende Geräte zur Verfügung:

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

Projektleiter: Jun.-Prof. Dr.-Ing. Andreas Bück
Projektbearbeiter: M. Farid
Kooperationen: Fraunhofer IFF, Magdeburg
Förderer: Weitere Stiftungen; 01.09.2014 - 31.10.2017

Energetische Nutzung nachwachsender Biomassen

Die Energieerzeugung aus nachwachsenden Biomassen ist eine wesentliche Basis einer ökologischen nicht-fossilen, jahreszeitlich unabhängigen Energieversorgung in Industrienationen und von wachsender Bedeutung in Entwicklungs- und Schwellenländern.

Ziel des Projektes ist es eine effiziente und ökologisch sinnvolle Erzeugung thermischer Energie (Wärme) aus biologischen Abfällen (z.B. Klärschlamm, Ernteabfälle) und nachwachsenden Rohstoffen auf Basis der Wirbelschichttechnologie zu entwickeln. Insbesondere ist die Brennstoffvorbereitung, u.a. die Trocknung, der jahreszeitlich schwankenden Zusammensetzung der Biomassen zu betrachten. Weiteres Ziel ist die energetische und ökonomische Auswertung dieser Prozesse in Abhängigkeit der Betriebsmittel, Anlagengrößen und im Vergleich mit fossilen Brennstoffalternativen.

Projektleiter: Jun.-Prof. Dr.-Ing. Andreas Bück
Projektbearbeiter: Hipp
Kooperationen: Dr.-Ing. Markus Henneberg, AVA GmbH; Elamont GmbH, Bitterfeld-Wolfen; Parsum GmbH, Chemnitz; Pergande GmbH
Förderer: Bund; 01.11.2013 - 31.10.2016

Entwicklung einer modellbasierten Regelungsstrategie für die Partikelgröße und Partikelfeuchte in der Wirbelschichtgranulation

Partikuläre Produkte mit definierten Gebrauchseigenschaften, z.B. Größe, Form oder Feuchte, sind in vielen Anwendungsbereichen, z.B. der Lebensmittel-, Pflanzenschutzmittel- oder Pharmaindustrie, gefragt. Auf Grund der Vielzahl an möglichen Einflussgrößen erfordert die Produktion gewünschter Partikeleigenschaften eine Prozessführung, die in der Lage ist, so in den Prozess einzugreifen, dass Abweichungen, z.B. hervorgerufen durch externe Störungen, automatisch kompensiert werden. Ziel des Projektes ist die Entwicklung und Umsetzung einer Regelungsstrategie für die industrielle Partikelformulierung durch Granulation in Wirbelschichten.

Projektleiter: Jun.-Prof. Dr.-Ing. Andreas Bück
Projektbearbeiter: Tsotsas, Hampel
Kooperationen: Pergande GmbH
Förderer: Bund; 01.11.2013 - 31.10.2016

Entwicklung einer verfahrenstechnischen Lösung zur Beschichtung von feindispersen Partikeln in Wirbelschichten

Die OvGU Magdeburg wird sich im Rahmen dieses WIGRATEC+-Teilprojektes mit der theoretischen Analyse relevanter Mikroprozesse bei dem neuen Verfahren zur Beschichtung feindisperser Partikel in der Wirbelschicht beschäftigen. Dabei sollen ein mathematisches Modell zur Beschreibung der Tropfentrocknung und eine Methode zum modellgestützten Monitoring der Agglomerationsrate in der Sprühzone entwickelt und anhand experimenteller Daten

validiert werden. Eine weitere wesentliche Zielstellung ist die strömungstechnische Auslegung der apparativen Elemente. Hier sollen Fragestellungen zur optimalen geometrischen Auslegung im Engineering-Stadium beantwortet werden.

Projektleiter: Jun.-Prof. Dr.-Ing. Andreas Bück

Projektbearbeiter: E. Tsotsas, K. Meyer

Förderer: Deutsche Forschungsgemeinschaft (DFG); 01.07.2015 - 30.06.2017

Modellierung des dynamischen Verhaltens der Sprühgranulation in kontinuierlich betriebenen Wirbelschichttrinnen

In diesem Projekt wird die Sprühgranulation in Wirbelschichttrinnen betrachtet. Hier wird auf in Schwebelage befindliche Ausgangspartikel eine feststoffhaltige Flüssigkeit versprüht, die durch parallel ablaufende Trocknungsprozesse zur Bildung neuer Feststoffschichten und einem Partikelwachstum führen. Im kontinuierlichen Betriebsmodus werden dafür in der Industrie häufig horizontal aufgebaute Wirbelschichttrinnen mit länglichen Basisquerschnitt eingesetzt, die durch eine variable Anzahl von Wehren (Trennblechen) in mehrere Kammern unterschiedlicher Funktionalität (z.B. Granulation, Trocknung) unterteilbar sind. Ziel des Projektes ist die Erstellung populationsdynamischer Modelle zur Beschreibung der Einflüsse des Apparatedesign (Anzahl und Konfiguration der Wehre) und der Prozessbedingungen auf die Produktqualität, z.B. die Größenverteilung, die Fließfähigkeit, das Auflösungsverhalten, die Freisetzungsraten oder die Lagerstabilität. Aus den ermittelten Zusammenhängen sollen dann Rückschlüsse der Art gezogen werden, dass für eine vorgegebene Produktqualität die benötigten Prozessbedingungen und das Apparatedesign abgeleitet werden können ("inverse process design").

DFG SPP 1679, 2. Förderperiode

Projektleiter: Jun.-Prof. Dr.-Ing. Andreas Bück

Projektbearbeiter: Tsotsas, Ihlow

Kooperationen: Dr.-Ing. Matthias Ihlow, MIAM GmbH; Pergande GmbH; Prof. Mirko Peglow

Förderer: Bund; 01.11.2013 - 31.10.2016

Strömungstechnische Untersuchungen und Optimierung der Hochtemperaturfiltration in Wirbelschichten

Die OvGU Magdeburg wird sich im Rahmen dieses WIGRATEC+-Teilprojektes mit der theoretischen Modellierung und der mathematischen Beschreibung des Verhaltens von Hochtemperaturfiltern in Bezug auf Strömungsführung, Druckverlust und Abscheidegrad sowie mit der Möglichkeit der Maßstabsübertragung von solchen Filtern beschäftigen. Neben diesem wissenschaftlichen Aspekt wird OvGU CFD- und FEM-Berechnungen mit dem Ziel der Bauteiloptimierung durchführen sowie die experimentelle Erprobung der Neuentwicklungen durchführen. Die gewonnenen fundierten Messergebnisse werden in Kombination mit dem entwickelten Modell für die Maßstabsübertragung eingesetzt.

Projektleiter: Jun.-Prof. Dr.-Ing. Andreas Bück

Projektbearbeiter: E. Tsotsas, K. Meyer

Kooperationen: Prof. Dr.-Ing. Achim Kienle, Otto-von-Guericke-Universität Magdeburg; Prof. Heinrich, TU Hamburg-Harburg

Förderer: Deutsche Forschungsgemeinschaft (DFG); 01.07.2013 - 30.06.2015

Modellierung des dynamischen Verhaltens der Sprühgranulation in kontinuierlich betriebenen Wirbelschichttrinnen

In diesem Projekt wird die Sprühgranulation in Wirbelschichttrinnen betrachtet. Hier wird auf in Schwebelage befindliche Ausgangspartikel eine feststoffhaltige Flüssigkeit versprüht, die durch parallel ablaufende Trocknungsprozesse zur Bildung neuer Feststoffschichten und einem Partikelwachstum führen. Im kontinuierlichen Betriebsmodus werden dafür in der Industrie häufig horizontal aufgebaute Wirbelschichttrinnen mit länglichen Basisquerschnitt eingesetzt, die durch eine variable Anzahl von Wehren (Trennblechen) in mehrere Kammern unterschiedlicher Funktionalität (z.B. Granulation, Trocknung) unterteilbar sind. Ziel des Projektes ist die Erstellung populationsdynamischer Modelle zur Beschreibung der Einflüsse des Apparatedesign (Anzahl und Konfiguration der Wehre) und der Prozessbedingungen auf die Produktqualität, z.B. die Größenverteilung, die Fließfähigkeit, das Auflösungsverhalten, die Freisetzungsraten oder die Lagerstabilität. Aus den ermittelten Zusammenhängen sollen dann Rückschlüsse der Art gezogen werden, dass für eine vorgegebene Produktqualität die benötigten Prozessbedingungen und das Apparatedesign abgeleitet werden können ("inverse process design").

Projektleiter: Jun.-Prof. Dr.-Ing. Andreas Bück

Projektbearbeiter: Tsotsas, J. Avila-Acevedo, M. Jaskulski

Förderer: EU - Forschungsrahmenprogramm; 01.11.2013 - 31.10.2016

Dryer modelling and inline monitoring for dairy products

Breite Tropfengrößen- und Geschwindigkeitsverteilungen limitieren bei der Sprühtrocknung von Milch die erreichbare Produktqualität und die Energieeffizienz des Produktes. Durch eine neue Technik zur gleichmäßigen Erzeugung von Tropfen soll im Rahmen des EU-Projektes "ENTHALPY" diese Nachteile behoben werden. Zur Bestimmung der Produktqualität, z.B. der Größen der getrockneten Milchpartikel oder die Deaktivierung von Enzymen, ist es notwendig, den Trocknungsprozess innerhalb des Sprühturmes (z.B. durch CFD-Simulationen) zu beschreiben. Im Rahmen des Teilprojektes wird der Trocknungsvorgang mathematisch beschrieben und die Ergebnisse mit experimentellen Daten auf Einzeltropfenbasis verglichen. Das validierte Modell erlaubt anschließend die energieeffiziente Auslegung von Sprühtrockner für Milchprodukte. Parallel zu diesen Arbeiten wird eine Möglichkeit zur online-Messung der sprühgetrockneten Partikel entwickelt und experimentell getestet, so dass die Grundlage für eine Prozessführung geschaffen wird.

6. Veröffentlichungen

Begutachtete Zeitschriftenaufsätze

Ashraf Ali, B.; Börner, Matthias; Peglow, Mirko; Janiga, Gábor; Seidel-Morgenstern, Andreas; Thévenin, Dominique

Coupled computational fluid dynamics-discrete element method simulations of a pilot-Scale batch crystallizer

In: Crystal growth & design. - Washington, DC: ACS Publ, Bd. 15.2015, 1, S. 145-155;

[Imp.fact.: 4,558]

Bachmann, Philipp; Tsotsas, Evangelos

Analysis of residence time distribution data in horizontal fluidized beds

In: Procedia engineering. - Amsterdam [u.a.]: Elsevier, Bd. 102.2015, S. 790-798;

Bajcinca, N.; Hofmann, S.; Bielytsov, D.; Sundmacher, Kai

Approximate ODE models for population balance systems

In: Computers & chemical engineering. - Amsterdam [u.a.]: Elsevier Science, Bd. 74.2015, S. 158-168;

[Imp.fact.: 2,452]

Bibi, Sameena; Qamar, Shamsul; Seidel-Morgenstern, Andreas

Irreversible and reversible reactive chromatography - analytical solutions and moment analysis for rectangular pulse injections

In: Journal of chromatography / A. - New York, NY [u.a.]: Science Direct, Bd. 1385.2015, S. 49-62;

[Imp.fact.: 4,258]

Binev, D.; Seidel-Morgenstern, Andreas; Lorenz, H.

Study of crystal size distributions in a fluidized bed crystallizer

In: Chemical engineering science. - Amsterdam [u.a.]: Elsevier Science, Bd. 133.2015, S. 116-124;

[Imp.fact.: 2,613]

Borne, Sabine Le; Eisenschmidt, Holger; Sundmacher, Kai

Image-based analytical crystal shape computation exemplified for potassium dihydrogen phosphate (KDP)

In: Chemical engineering science. - Amsterdam [u.a.]: Elsevier Science, Bd. 139.2016, S. 61-74;

[Imp.fact.: 2,613]

Büch, Andreas; Casciatori, Fernanda; Thoméo, João Cláudio; Tsotsas, Evangelos

Model-based control of enzyme yield in solid state fermentation

In: Procedia engineering. - Amsterdam [u.a.]: Elsevier, Bd. 102.2015, S. 362-371;

Büch, Andreas; Palis, Stefan; Tsotsas, Evangelos

Model-based control of particle properties in fluidised bed spray granulation

In: Powder technology. - Amsterdam [u.a.]: Elsevier Science; Vol. 270.2014, Part B, S. 575-583, 2015;

[Imp.fact.: 2,269]

Calin-Sánchez, Ángel; Kharaghani, Abdolreza; Lech, Krzysztof; Figiel, Adam; Carbonell-Barrachina, Ángel A.; Tsotsas, Evangelos

Drying kinetics and microstructural and sensory properties of black chokeberry (*aronia melanocarpa*) as affected by drying method

In: Food and bioprocess technology: an international journal. - New York, NY: Springer Science + Business Media, LLC, Bd. 8.2015, 1, S. 63-74;

[Imp.fact.: 3,126]

Chauhan, Garima; Stein, Matthias; Seidel-Morgenstern, Andreas; Pant, Kamal K.; Nigam, Krishna D. P.

The thermodynamics and biodegradability of chelating agents upon metal extraction

In: Chemical engineering science. - Amsterdam [u.a.]: Elsevier Science, Bd. 137.2015, S. 768-785;

[Imp.fact.: 2,613]

Do, T. Q. N.; Varni i , M.; Flassig, Robert; Vidakovi -Koch, T.; Sundmacher, Kai

Dynamic and steady state 1-D model of mediated electron transfer in a porous enzymatic electrode

In: Bioelectrochemistry: official journal of the Bioelectrochemical Society; an international journal devoted to electrochemical aspects of biology and biological aspects of electrochemistry. - Amsterdam [u.a.]: Elsevier Science; Vol. 106.2015, Part A, S. 3-13;

[Imp.fact.: 4,172]

Dreyschultze, C.; Neugebauer, Christoph; Palis, Stefan; Bück, Andreas; Tsotsas, Evangelos; Heinrich, Stefan; Kienle, Achim

Influence of zone formation on stability of continuous fluidized bed layering granulation with external product classification

In: Particuology. - Amsterdam: Elsevier, Bd. 23.2015, S. 1-7;

[Imp.fact.: 2,110]

Eisenschmidt, Holger; Voigt, Andreas; Sundmacher, Kai

Face-specific growth and dissolution kinetics of potassium dihydrogen phosphate crystals from batch crystallization experiments

In: Crystal growth & design. - Washington, DC: ACS Publ, Bd. 15.2015, S. 219-227; 10.1021/cg501251e;

[Imp.fact.: 4,558]

Flassig, Robert; Migal, Iryna; Zalm, Esther van der; Rihko-Struckmann, Liisa; Sundmacher, Kai

Rational selection of experimental readout and intervention sites for reducing uncertainties in computational model predictions

In: BMC bioinformatics. - London: BioMed Central; Vol. 16.2015, Art. 13, insgesamt 13 S.;

[Imp.fact.: 2,670]

Freising, Timo

Defective interfering viruses and their impact on vaccines and viral vectors

In: Biotechnology journal: BTJ. - Weinheim: Wiley-VCH, Bd. 10.2015, 5, S. 681-689;

[Imp.fact.: 3,708]

Fricke, Michael; Voigt, Andreas; Veit, Peter; Sundmacher, Kai

Miniemulsion-based process for controlling the size and shape of zinc oxide nanoparticles

In: Industrial & engineering chemistry research. - Columbus, Ohio: American Chemical Society, Bd. 54.2015, 42, S. 10293-10300;

[Imp.fact.: 2,587]

Galan, Kamila; Eicke, Matthias J.; Elsner, Martin P.; Lorenz, Heike; Seidel-Morgenstern, Andreas

Continuous preferential crystallization of chiral molecules in single and coupled mixed-suspension mixed-product-

removal crystallizers

In: Crystal growth & design. - Washington, DC: ACS Publ, Bd. 15.2015, 4, S. 1808-1818;

[Imp.fact.: 4,558]

Gallo-Ramírez, Lili Esmeralda; Nikolay, Alexander; Genzel, Yvonne; Reichl, Udo

Bioreactor concepts for cell culture-based viral vaccine production

In: Expert review of vaccines. - London: Informa Healthcare, Bd. 14.2015, 9, S. 1181-1195;

[Imp.fact.: 4,210]

Glöckner, Hannes; Hagemeyer, Thomas; Müller, Peter; Roloff, Christoph; Thévenin, Dominique; Tomas, Jürgen

Beschleunigter Sinkprozess fester Partikel bei laminarer und turbulenter Umströmung

In: Chemie - Ingenieur - Technik: CIT. - Weinheim: Wiley-VCH Verl, Bd. 87.2015, 5, S. 644-655;

[Imp.fact.: 0,661]

Grabherr, Reingard; Reichl, Udo

Editorial: Can modern vaccine technology pursue the success of traditional vaccine manufacturing?

In: Biotechnology journal: BTJ. - Weinheim: Wiley-VCH, Bd. 10.2015, 5, S. 657-658;

[Imp.fact.: 3,708]

Hagemeyer, Thomas; Börner, Matthias; Bück, Andreas; Tsotsas, Evangelos

A comparative study on optical techniques for the estimation of granular flow velocities

In: Chemical engineering science. - Amsterdam [u.a.]: Elsevier Science, Bd. 131.2015, S. 63-75;

[Imp.fact.: 2,613]

Hagemeyer, Thomas; Bück, Andreas; Tsotsas, Evangelos

Estimation of particle rotation in fluidized beds by means of PTV

In: Procedia engineering. - Amsterdam [u.a.]: Elsevier, Bd. 102.2015, S. 841-849;

Hagemeyer, Thomas; Roloff, Christoph; Bück, Andreas; Tsotsas, Evangelos

Estimation of particle dynamics in 2-D fluidized beds using particle tracking velocimetry

In: Particuology. - Amsterdam: Elsevier, Bd. 22.2015, S. 39-51;

[Imp.fact.: 2,110]

Heldt, Frank S.; Kupke, Sascha Y.; Dorl, Sebastian; Reichl, Udo; Frensing, Timo

Single-cell analysis and stochastic modelling unveil large cell-to-cell variability in influenza A virus infection

In: Nature Communications. - London: Nature Publishing Group; Vol. 6.2015, Art. 8938, insgesamt 12 S.;

[Imp.fact.: 11,470]

Hentschel, Benjamin; Kiedorf, Gregor; Gerlach, Martin; Hamel, Christof; Seidel-Morgenstern, Andreas; Freund, Hannsjörg; Sundmacher, Kai

Model-based identification and experimental validation of the optimal reaction route for the hydroformylation of 1-dodecene

In: Industrial & engineering chemistry research. - Columbus, Ohio: American Chemical Society, Bd. 54.2015, 6, S. 1755-1765;

[Imp.fact.: 2,235]

Heyer, Robert; Kohrs, Fabian; Reichl, Udo; Benndorf, Dirk

Metaproteomics of complex microbial communities in biogas plants

In: Microbial biotechnology. - Oxford: Wiley-Blackwell, Bd. 8.2015, 5, S. 749-763;

[Imp.fact.: 3,081]

Hoffmann, Torsten; Rieck, Christian; Bück, Andreas; Peglow, Mirko; Tsotsas, Evangelos

Influence of granule porosity during fluidized bed spray granulation

In: Procedia engineering. - Amsterdam [u.a.]: Elsevier, Bd. 102.2015, S. 458-467;

Hoffmann, Torsten; Rieck, Christian; Schmidt, Martin; Bück, Andreas; Peglow, Mirko; Tsotsas, Evangelos

Prediction of shell porosities in continuous fluidized bed spray layering

In: Drying technology: an international journal. - Philadelphia, Pa: Taylor & Francis, Bd. 33.2015, 13, S. 1662-1670;
[Imp.fact.: 1,518]

Horváth, Zoltán; Horosanskaia, Elena; Lee, Ju Weon; Lorenz, Heike; Gilmore, Kerry; Seeberger, Peter H.; Seidel-Morgenstern, Andreas

Recovery of artemisinin from a complex reaction mixture using continuous chromatography and crystallization

In: Organic process research & development: web edition. - Washington, DC: ACS Publ, Bd. 19.2015, 6, S. 624-634;
[Imp.fact.: 2,528]

Hussain, Mubashir; Kumar, Jitendra; Tsotsas, Evangelos

A new approach in population balance modeling of spray fluidized bed agglomeration

In: Procedia engineering. - Amsterdam [u.a.]: Elsevier, Bd. 102.2015, S. 1399-1407;

Hussain, Mubashir; Kumar, Jitendra; Tsotsas, Evangelos

A new framework for population balance modeling of spray fluidized bed agglomeration

In: Particuology. - Amsterdam: Elsevier, Bd. 19.2015, S. 141-154;
[Imp.fact.: 1,648]

Hussain, Mubashir; Kumar, Jitendra; Tsotsas, Evangelos

Modeling aggregation kinetics of fluidized bed spray agglomeration for porous particles

In: Powder technology. - Amsterdam [u.a.]: Elsevier Science; Vol. 270.2015, Part B, S. 584-591;
[Imp.fact.: 2,499]

Hylton, Rebecca K.; Tizzard, Graham J.; Threlfall, Terence L.; Ellis, Amy L.; Coles, Simon J.; Seaton, Colin C.; Schulze, Eric; Lorenz, Heike; Seidel-Morgenstern, Andreas; Stein, Matthias; Price, Sarah L.

Are the crystal structures of enantiopure and racemic mandelic acids determined by kinetics or thermodynamics?

In: Journal of the American Chemical Society: web edition. - Washington, DC: American Chemical Society, Bd. 137.2015, 34, S. 11095-11104;
[Imp.fact.: 12,113]

Idakiev, Vesselin; Mörl, Lothar

Methode zur Untersuchung der Partikelbewegung in diskontinuierlich und kontinuierlich arbeitenden Wirbelschichten

In: Chemie - Ingenieur - Technik: CIT. - Weinheim: Wiley-VCH Verl, Bd. 87.2015, 5, S. 626-637;
[Imp.fact.: 0,661]

Idakiev, Vesselin V.; Marx, Sebastian; Roßau, Antje; Bück, Andreas; Tsotsas, Evangelos; Mörl, Lothar

Inductive heating of fluidized beds - influence on fluidization behavior

In: Powder technology: an international journal on the science and technology of wet and dry particulate systems. - Amsterdam [u.a.]: Elsevier Science, Bd. 286.2015, S. 90-97;
[Imp.fact.: 2,349]

Imani Moqadam, Saeedeh; Mirdrikvand, Mojtaba; Roozbehani, Behrooz; Kharaghani, Abdolreza; Shishehsaz, Mohammad Reza

Polystyrene pyrolysis using silica-alumina catalyst in fluidized bed reactor

In: Clean technologies and environmental policy. - Berlin: Springer, Bd. 17.2015, 7, S. 1847-1860;
[Imp.fact.: 1,934]

Jörke, Andreas; Seidel-Morgenstern, Andreas; Hamel, Christof

Isomerization of 1-decene - estimation of thermodynamic properties, equilibrium composition calculation and experimental validation using a Rh-BIPHEPHOS catalyst

In: The chemical engineering journal. - Amsterdam: Elsevier, Bd. 260.2015, S. 513-523;
[Imp.fact.: 4,058]

Jörke, Andreas; Triemer, Susann; Seidel-Morgenstern, Andreas; Hamel, Christof

Kinetic investigation exploiting local parameter subset selection - isomerization of 1-decene using a Rh-Biphephos catalyst

In: Chemie - Ingenieur - Technik: CIT. - Weinheim: Wiley-VCH Verl, Bd. 87.2015, 6, S. 713-725;

[Imp.fact.: 0,661]

Karst, Florian; Maestri, Matteo; Freund, Hannsjörg; Sundmacher, Kai

Reduction of microkinetic reaction models for reactor optimization exemplified for hydrogen production from methane

In: The chemical engineering journal. - Amsterdam: Elsevier, Bd. 281.2015, S. 981-994;

[Imp.fact.: 4,321]

Karsten, Christina B.; Buettner, Falk F. R.; Cajic, Samanta; Nehlmeier, Inga; Neumann, Berit; Klippert, Antonina; Sauer mann, Ulrike; Reichl, Udo; Gerardy-Schahn, Rita; Rapp, Erdmann; Stahl-Hennig, Christiane; Pöhlmann, Stefan

Exclusive decoration of simian immunodeficiency virus Env with high-mannose type N-glycans is not compatible with mucosal transmission in rhesus macaques

In: Journal of virology: publ. by the American Society for Microbiology. - Baltimore, Md: Soc, Bd. 89.2015, 22, S. 11727-11733;

[Imp.fact.: 4,439]

Khalloufi, Seddik; Kharaghani, Abdolreza; Almeida-Rivera, Cristhian; Nijse, Jaap; Dalen, Gerard van; Tsotsas, Evangelos

Monitoring of initial porosity and new pores formation during drying - a scientific debate and a technical challenge

In: Trends in food science & technology. - Amsterdam [u.a.]: Elsevier Science, Bd. 45.2015, 2, S. 179-186;

[Imp.fact.: 4,651]

Kluge, Sabine; Benndorf, Dirk; Genzel, Yvonne; Scharfenberg, Klaus; Rapp, Erdmann; Reichl, Udo

Monitoring changes in proteome during stepwise adaptation of a MDCK cell line from adherence to growth in suspension

In: Vaccine. - Amsterdam: Elsevier, Bd. 33.2015, 35, S. 4269-4280;

[Imp.fact.: 3,624]

Kohrs, Fabian; Wolter, Sophie; Benndorf, Dirk; Heyer, Robert; Hoffmann, Marcus; Rapp, Erdmann; Bremges, Andreas; Sczyrba, Alexander; Schlüter, Andreas; Reichl, Udo

Fractionation of biogas plant sludge material improves metaproteomic characterization to investigate metabolic activity of microbial communities

In: Proteomics. - Weinheim: Wiley VCH, Bd. 15.2015, 20, S. 3585-3589;

[Imp.fact.: 3,807]

Kolmeder, Carolin A.; Ritari, Jarmo; Verdam, Froukje J.; Muth, Thilo; Keskitalo, Salla; Varjosalo, Markku; Fuentes, Susana; Greve, Jan Willem; Buurman, Wim A.; Reichl, Udo; Rapp, Erdmann; Martens, Lennart; Palva, Airi; Salonen, Anne; Rensen, Sander S.; Vos, Willem M. de

Colonic metaproteomic signatures of active bacteria and the host in obesity

In: Proteomics. - Weinheim: Wiley VCH, Bd. 15.2015, 20, S. 3544-3552;

[Imp.fact.: 3,807]

Kumar, Jitendra; Saha, Jitraj; Tsotsas, Evangelos

Development and convergence analysis of a finite volume scheme for solving breakage equation

In: SIAM journal on numerical analysis. - Philadelphia, Pa: SIAM, Bd. 53.2015, 4, S. 1672-1689;

[Imp.fact.: 1,788]

Langermann, Jan von; Temmel, Erik; Seidel-Morgenstern, Andreas; Lorenz, Heike

Solid phase behavior in the chiral systems of various 2-hydroxy-2-phenylacetic acid (mandelic acid) derivatives

In: Journal of chemical & engineering data. - Columbus, Ohio: American Chemical Society, Bd. 60.2015, 3, S. 721-728;

[Imp.fact.: 2,045]

Laske, Tanja; Heldt, Frank Stefan; Hoffmann, Helene; Frensing, Timo; Reichl, Udo

Modeling the intracellular replication of influenza A virus in the presence of defective interfering RNAs
In: Virus research: an international journal of molecular and cellular virology. - Amsterdam [u.a.]: Elsevier Science, Bd. 213.2015, S. 90-99;
[Imp.fact.: 2,324]

Lautenschleger, Anna; Kenig, Eugeny Y.; Voigt, Andreas; Sundmacher, Kai
Model-based analysis of a gas/vapor-liquid microchannel membrane contactor
In: AIChE journal. - Hoboken, NJ: Wiley, Bd. 61.2015, 7, S. 2240-2256;
[Imp.fact.: 2,748]

Le Borne, Sabine; Shahmuradyan, Lusine; Sundmacher, Kai
Fast evaluation of univariate aggregation integrals on equidistant grids
In: Computers & chemical engineering: an international journal of computer applications in chemical engineering. - Amsterdam [u.a.]: Elsevier Science, Bd. 74.2015, S. 115-127;
[Imp.fact.: 2,452]

Mangold, Michael; Feng, Lihong; Khlopov, Dmytro; Palis, Stefan; Benner, Peter; Binev, Daniel; Seidel-Morgenstern, Andreas
Nonlinear model reduction of a continuous fluidized bed crystallizer
In: Journal of computational and applied mathematics. - Amsterdam [u.a.]: North-Holland, Bd. 289.2015, S. 253-266;
[Imp.fact.: 1,266]

Mann, Hannes; Müller, Peter; Hagemeyer, Thomas; Roloff, Christoph; Thévenin, Dominique; Tomas, Jürgen
Analytical description of the unsteady settling of spherical particles in Stokes and Newton regimes
In: Granular matter. - Berlin: Springer, Bd. 17.2015, 5, S. 629-644;
[Imp.fact.: 1,775]

McBride, Kevin; Gaide, Tom; Vorholt, Andreas; Behr, Arno; Sundmacher, Kai
Thermomorphic solvent selection for homogeneous catalyst recovery based on COSMO-RS
In: Chemical engineering and processing. - Amsterdam [u.a.]: Elsevier, 2015; <http://dx.doi.org/10.1016/j.cep.2015.07.004>;
[Imp.fact.: 2,071]

McBride, Kevin; Sundmacher, Kai
Data driven conceptual process design for the hydroformylation of 1-dodecene in a thermomorphic solvent system
In: Industrial & engineering chemistry research. - Columbus, Ohio: American Chemical Society, Bd. 54.2015, 26, S. 6761-6771;
[Imp.fact.: 2,587]

Melnikov, Sergey M.; Höltzel, Alexandra; Seidel-Morgenstern, Andreas; Tallarek, Ulrich
Evaluation of aqueous and nonaqueous binary solvent mixtures as mobile phase alternatives to water/acetonitrile mixtures for hydrophilic interaction liquid chromatography by molecular dynamics simulations
In: The journal of physical chemistry <Washington, DC> / C. - Washington, DC: Soc, Bd. 119.2015, 1, S. 512-523;
[Imp.fact.: 4,835]

Meyer, Katja; Bück, Andreas; Tsotsas, Evangelos
Dynamic multi-zone population balance model of particle formulation in fluidized bed
In: Procedia engineering. - Amsterdam [u.a.]: Elsevier, Bd. 102.2015, S. 1456-1465;

Müller, Peter; Böttcher, Ronny; Russell, Alexander; Truee, Michael; Tomas, Jürgen
A novel approach to evaluate the elastic impact of spheres on thin plates
In: Chemical engineering science. - Amsterdam [u.a.]: Elsevier Science, Bd. 138.2015, S. 689-697;
[Imp.fact.: 2,613]

Müller, Peter; Glöckner, Hannes; Tomas, Jürgen
Numerische und analytische Beschreibung der mechanischen Eigenschaften quasi-tetraederförmiger Agglomerate

In: Chemie - Ingenieur - Technik: CIT. - Weinheim: Wiley-VCH Verl, Bd. 87.2015, 7, S. 976-985;
[Imp.fact.: 0,661]

Müller, Peter; Russell, Alexander; Seidenbecher, Jakob; Tomas, Jürgen

Mechanische Eigenschaften zyklisch be- und entfeuchteter Zeolithgranulate

In: Chemie - Ingenieur - Technik: CIT. - Weinheim: Wiley-VCH Verl, Bd. 87.2015, 10, S. 1402-1411;
[Imp.fact.: 0,661]

Müller, Peter; Russell, Alexander; Seidenbrecher, Jakob; Tomas, Jürgen

progressive weakening of zeolite granules due to cyclic moisture loading and unloading

In: Microporous and mesoporous materials: the official journal of the International Zeolite Association. - Amsterdam [u.a.]: Elsevier, Bd. 211.2015, S. 88-96;
[Imp.fact.: 3,450]

Müller, Peter; Russell, Alexander; Tomas, Jürgen

Einfluss des Bindemittels und der Feuchtebelastung auf die Festigkeit von Zeolith 4A-Granulaten

In: Chemie - Ingenieur - Technik: CIT. - Weinheim: Wiley-VCH Verl, Bd. 87.2015, 5, S. 549-558;
[Imp.fact.: 0,661]

Müller, Peter; Russell, Alexander; Tomas, Jürgen

Influence of binder and moisture content on the strength of zeolite 4A granules

In: Chemical engineering science. - Amsterdam [u.a.]: Elsevier Science, Bd. 126.2015, S. 204-215;
[Imp.fact.: 2,613]

Müller, Peter; Thomas, Jürgen

Untersuchung des Druckverhaltens tetraederförmiger Agglomerate

In: Chemie - Ingenieur - Technik: CIT. - Weinheim: Wiley-VCH Verl, Bd. 87.2015, 7, S. 1-11;
[Imp.fact.: 0,661]

Müller, Peter; Trüe, Michael; Böttcher, Ronny; Tomas, Jürgen

Acoustic evaluation of the impact of moist spherical granules and glass beads

In: Powder technology: an international journal on the science and technology of wet and dry particulate systems. - Amsterdam [u.a.]: Elsevier Science, Bd. 278.2015, S. 138-149;
[Imp.fact.: 2,269]

Muth, Thilo; Behne, Alexander; Heyer, Robert; Kohrs, Fabian; Benndorf, Dirk; Hoffmann, Marcus; Lehtevä, Miro; Reichl, Udo; Martens, Lennart; Rapp, Erdmann

The MetaProteomeAnalyzer - a powerful open-source software suite for metaproteomics data analysis and interpretation

In: Journal of proteome research. - Washington, DC: ACS Publications, Bd. 14.2015, 3, S. 1557-1565;
[Imp.fact.: 5,001]

Muth, Thilo; Kolmeder, Carolin A.; Salojärvi, Jarkko; Keskitalo, Salla; Varjosalo, Markku; Verdam, Froukje J.; Rensen, Sander S.; Reichl, Udo; Vos, Willem M. de; Rapp, Erdmann; Martens, Lennart

Navigating through metaproteomics data - a logbook of database searching

In: Proteomics. - Weinheim: Wiley VCH, Bd. 15.2015, 20, S. 3439-3453;
[Imp.fact.: 3,807]

Nikoli, Daliborka; Seidel-Morgenstern, Andreas; Petkovska, Menka

Nonlinear frequency response analysis of forced periodic operation of non-isothermal CSTR with simultaneous modulation of inlet concentration and inlet temperature

In: Chemical engineering science. - Amsterdam [u.a.]: Elsevier Science, Bd. 133.2015, S. 40-58;
[Imp.fact.: 2,613]

Parveen, Sadia; Qamar, Shamsul; Seidel-Morgenstern, Andreas

Two-dimensional non-equilibrium model of liquid chromatography: Analytical solutions and moment analysis
In: Chemical engineering science. - Amsterdam [u.a.]: Elsevier Science, Bd. 122.2015, S. 64-77;
[Imp.fact.: 2,613]

Pirwitz, Kristin; Flassig, Robert J.; Rihko-Struckmann, Liisa K.; Sundmacher, Kai

Energy and operating cost assessment of competing harvesting methods for *D. salina* in a β -carotene production process
In: Algal Research: Biology, Biomass and Biofuels. - Amsterdam [u.a.]: Elsevier, Bd. 12.2015, S. 161-169;
[Imp.fact.: 5,014]

Pirwitz, Kristin; Rihko-Struckmann, Liisa; undmacher, Kai

Comparison of flocculation methods for harvesting *Dunaliella*
In: Bioresource technology. - Amsterdam [u.a.]: Elsevier Science, Bd. 196.2015, S. 145-152;
[Imp.fact.: 4,494]

Pisarevskiy, Alexander; Aman, Sergej; Tatmyshevskiy, K.; Hirsch, S.; Tomas, Jürgen

Light emission during impact stressing of a particle layer
In: Measurement science and technology: devoted to the theory, practice and application of measurement in physics, chemistry, engineering and the environmental and life sciences from inception to commercial exploitation. - Bristol: IOP Publ; Vol. 26.2015, 4, Art. 045103; <http://dx.doi.org/10.1088/0957-0233/26/4/045103>;
[Imp.fact.: 1,352]

Püttker, Sebastian; Kohrs, Fabian; Benndorf, Dirk; Heyer, Robert; Rapp, Erdmann; Reichl, Udo

Metaproteomics of activated sludge from a wastewater treatment plant - a pilot study
In: Proteomics. - Weinheim: Wiley VCH, Bd. 15.2015, 20, S. 3596-3601;
[Imp.fact.: 3,807]

Rieck, Christian; Bück, Andreas; Tsotsas, Evangelos

Stochastic modelling of particle coating in fluidized beds
In: Procedia engineering. - Amsterdam [u.a.]: Elsevier, Bd. 102.2015, S. 996-1005;

Rieck, Christian; Hoffmann, Torsten; Bück, Andreas; Peglow, Mirko; Tsotsas, Evangelos

Influence of drying conditions on layer porosity in fluidized bed spray granulation
In: Powder technology. - Amsterdam [u.a.]: Elsevier Science, Bd. 272.2015, S. 120-131;
[Imp.fact.: 2,269]

Rihko-Struckmann, Liisa K.; Datta, Pradyot; Wenzel, Marcus; Sundmacher, Kai; Dharanipragada, N. V. R. A.; Poelman, Hilde; Galvita, Vladimir V.; Marin, Guy B.

Hydrogen and carbon monoxide production by chemical looping over iron-aluminium oxides
In: Energy technology: generation, conversion, storage, distribution. - Weinheim [u.a.]: Wiley-VCH, 2015; <http://dx.doi.org/10.1002/ente.201500231>;
[Imp.fact.: 2,824]

Russell, Alexander; Aman, Sergej; Tomas, Jürgen

Breakage probability of granules during repeated loading
In: Powder technology. - Amsterdam [u.a.]: Elsevier Science, Bd. 269.2015, S. 541-547, 2014;
[Imp.fact.: 2,269]

Russell, Alexander; Schmelzer, Janett; Müller, Peter; Krüger, Manja; Tomas, Jürgen

Mechanical properties and failure probability of compact agglomerates
In: Powder technology: an international journal on the science and technology of wet and dry particulate systems. - Amsterdam [u.a.]: Elsevier Science, Bd. 286.2015, S. 546-556;
[Imp.fact.: 2,349]

Schmidt, Martin; Bück, Andreas; Tsotsas, Evangelos

Experimental investigation of process stability of continuous spray fluidized bed layering with internal separation

In: Chemical engineering science. - Amsterdam [u.a.]: Elsevier Science, Bd. 126.2015, S. 55-66;
[Imp.fact.: 2,613]

Schmidt, Martin; Hoffmann, Torsten; Bück, Andreas; Tsotsas, Evangelos

Experimental investigation of the continuous fluidized bed spray granulation with internal classification
In: Procedia engineering. - Amsterdam [u.a.]: Elsevier, Bd. 102.2015, S. 565-574;

Schmidt, Martin; Rieck, Christian; Bück, Andreas; Tsotsas, Evangelos

Experimental investigation of process stability of continuous spray fluidized bed layering with external product separation

In: Chemical engineering science. - Amsterdam [u.a.]: Elsevier Science, Bd. 137.2015, S. 466-475;
[Imp.fact.: 2,613]

Schneider, Romy; Hosy, Eric; Kohl, Johannes; Klueva, Julia; Choquet, Daniel; Thomas, Ulrich; Voigt, Andreas; Heine, Martin

Mobility of calcium channels in the presynaptic membrane

In: Neuron. - [Cambridge, Mass.]: Cell Press, Bd. 86.2015, 3, S. 672-679;
[Imp.fact.: 15,054]

Serve, Anja; Pieler, Michael Martin; Benndorf, Dirk; Rapp, Erdmann; Wolff, Michael Werner; Reichl, Udo

Comparison of influenza virus particle purification using magnetic sulfated cellulose particles with an established centrifugation method for analytics

In: Analytical chemistry: the authoritative voice of the analytical community. - Columbus, Ohio: American Chemical Society, Bd. 87.2015, 21, S. 10708-10711;
[Imp.fact.: 5,636]

Sitonen, Jani; Mänttari, Mika; Seidel-Morgenstern, Andreas; Sainio, Tuomo

Robustness of steady state recycling chromatography with an integrated solvent removal unit

In: Journal of chromatography / A. - New York, NY [u.a.]: Science Direct, Bd. 1391.2015, S. 31-39;
[Imp.fact.: 4,258]

Sondej, Franziska; Bück, Andreas; Koslowsky, Katharina; Bachmann, Philipp; Jacob, Michael; Tsotsas, Evangelos

Investigation of coating layer morphology by micro-computed X-ray tomography

In: Powder technology. - Amsterdam [u.a.]: Elsevier Science, Bd. 273.2015, S. 165-175;
[Imp.fact.: 2,499]

Sondej, Franziska; Bück, Andreas; Tsotsas, Evangelos

Comparative analysis of the coating thickness on single particles using X-ray micro-computed tomography and confocal laser-scanning microscopy

In: Powder technology: an international journal on the science and technology of wet and dry particulate systems. - Amsterdam [u.a.]: Elsevier Science, Bd. 287.2015, S. 330-340;
[Imp.fact.: 2,349]

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

Lotion distribution in wet wipes investigated by pore network simulation and X-ray micro tomography

In: Transport in porous media: TIPM. - Dordrecht [u.a.]: Springer Science + Business Media B.V., Bd. 107.2015, 2, S. 449-468;
[Imp.fact.: 1,460]

Taratin, Nikolay; Lorenz, Heike; Binev, Daniel; Seidel-Morgenstern, Andreas; Kotelnikova, Elena

Solubility equilibria and crystallographic characterization of the L-threonine/l-allo-threonine system, Part 2: crystallographic characterization of solid solutions in the threonine diastereomeric system

In: Crystal growth & design: integrating the fields of crystal engineering and crystal growth for the synthesis and applications of new materials. - Washington, DC: American Chemical Society, Bd. 15.2015, 1, S. 137-144;
[Imp.fact.: 4,558]

Theuerl, Susanne; Kohrs, Fabian; Benndorf, Dirk; Maus, Irena; Wibberg, Daniel; Schlüter, Andres; Kausmann, Robert; Heiermann, Monika; Rapp, Erdmann; Reichl, Udo; Pühler, Alfred; Klocke, Michael

Community shifts in a well-operating agricultural biogas plant - how process variations are handled by the microbiome

In: Applied microbiology and biotechnology. - Berlin: Springer, Bd. 99.2015, 18, S. 7791-7803;

[Imp.fact.: 3,337]

Tsotsas, Evangelos

Multiscale approaches to processes that combine drying with particle formation

In: Drying technology: an international journal. - Philadelphia, Pa: Taylor & Francis, Bd. 33.2015, 15/16, S. 1859-1871;

[Imp.fact.: 1,518]

Varni i , M.; Vidakovi -Koch, T.; Sundmacher, Kai

Erratum: Gluconic acid synthesis in an electroenzymatic reactor [Electrochimica Acta (2015) 174 (480-487)]

In: Electrochimica acta: the journal of the International Society of Electrochemistry (ISE). - New York, NY [u.a.]: Elsevier, Bd. 176.2015, S. 1523;

[Imp.fact.: 4,504]

Varni i , M.; Vidakovi -Koch, T.; Sundmacher, Kai

Gluconic acid synthesis in an electroenzymatic reactor

In: Electrochimica acta: the journal of the International Society of Electrochemistry (ISE). - New York, NY [u.a.]: Elsevier, Bd. 174.2015, S. 480-487;

[Imp.fact.: 4,504]

Vorhauer, Nicole; Wang, Yujing; Kharaghani, Abdolreza; Tsotsas, Evangelos; Prat, Marc

Drying with formation of capillary rings in a model porous medium

In: Transport in porous media: TIPM. - Dordrecht [u.a.]: Springer Science + Business Media B.V, Bd. 110.2015, 2, S. 197-223;

[Imp.fact.: 1,460]

Wu, Rui; Kharaghani, Abdolreza; Tsotsas, Evangelos

Two-phase flow with capillary valve effect in porous media

In: Chemical engineering science. - Amsterdam [u.a.]: Elsevier Science, Bd. 139.2016, S. 241-248;

[Imp.fact.: 2,613]

Zarekar, Sayali; Bück, Andreas; Jacob, Michael; Tsotsas, Evangelos

Reconsideration of the hydrodynamic behavior of fluidized beds operated under reduced pressure

In: Powder technology: an international journal on the science and technology of wet and dry particulate systems. - Amsterdam [u.a.]: Elsevier Science, Bd. 287.2015, S. 169-176;

[Imp.fact.: 2,349]

Zhou, Teng; Lyu, Zhaoxian; Qi, Zhiwen; Sundmacher, Kai

Robust design of optimal solvents for chemical reactions-A combined experimental and computational strategy

In: Chemical engineering science. - Amsterdam [u.a.]: Elsevier Science, Bd. 137.2015, S. 613-625;

[Imp.fact.: 2,337]

Zhou, Teng; McBride, Kevin; Zhang, Xiang; Qi, Zhiwen; Sundmacher, Kai

Integrated solvent and process design exemplified for a Diels-Alder reaction

In: AIChE journal. - Hoboken, NJ: Wiley, Bd. 61.2015, 1, S. 147-158;

[Imp.fact.: 2,581]

Buchbeiträge

Eisenschmidt, Holger; Bajcinca, Naim; Sundmacher, Kai

Model-based observation and design of crystal shapes via controlled growth-dissolution cycles

In: 12th International Symposium on Process Systems Engineering and 25th European Symposium on Computer Aided Process Engineering. - Amsterdam [u.a.]: Elsevier, S. 1673-1678, 2015 - (Computer-aided chemical engineering; 37);

El Sibai, Ali; Rihko-Struckmann, Liisa; Sundmacher, Kai

Synthetic methane from CO₂ - dynamic optimization of the sabatier process for power-to-gas applications

In: Computer aided chemical engineering. - Amsterdam [u.a.]: Elsevier, Bd. 37.2015, S. 1157-1162;

Flassig, Robert J.; Fachet, Melanie; Rihko-Struckmann, Liisa; Sundmacher, Kai

Robust process design for the bioproduction of β -carotene in green microalgae

In: 12th International Symposium on Process Systems Engineering and 25th European Symposium on Computer Aided Process Engineering. - Amsterdam [u.a.]: Elsevier, S. 2117-2122, 2015 - (Computer-aided chemical engineering; 37);

Hopf, Talea; Kockentiedt, Sarah; Henrich-Noack, Petra; Tomas, Jürgen; Sabel, Bernhard

Entwicklung Oberflächenmodifizierter Nanopartikel-Formulierungen zwecks Überwindung der Blut-Hirn-Schranke

In: Teipel, Ulrich.: Produktgestaltung in der Partikeltechnologie, Band 7: 7. Symposium Partikeltechnologie, 23. - 24. April 2015, Fraunhofer-Forum, Berlin. - Stuttgart: Fraunhofer Verl., S. 345-367

Kongress: Symposium Partikeltechnologie; 7 (Berlin): 2015.04.23-24;

Jaskulski, Maciej; Tran, Thi Thu Hang; Avila-Acevedo, Juan Gabriel; Tsotsas, Evangelos

Experimental determination of drying kinetics of skim-milk suspended droplet

In: First Nordic Baltic Drying Conference: 17-19 Juni 2015, Gdańsk, Poland; proceedings. - Gdańsk, insges. 8 S.[Beitrag auf USB-Stick];

Jaskulski, Marciej; Tran, Hang Tran Thi; Avila-Acevedo, Juan; Tsotsas, Evangelos

An advanced modeling and experimental validation of single droplet drying process

In: Food science research and innovation: delivering sustainable solutions to the global economy and society: 29th EFFost International Conference. - Elsevier, S. 58-63, 2015;

Kerst, Kristin; Medeiros de Souza, Luis; Bartz, Antje; Seidel-Morgenstern, Andreas; Janiga, Gábor

CFD-DEM simulation of a fluidized bed crystallization reactor

In: Computer aided chemical engineering. - Amsterdam [u.a.]: Elsevier, Bd. 37.2015, S. 263-268;

Kharaghani, Abdolreza; Kirsch, Christoph; Metzger, Thomas; Tsotsas, Evangelos

Liquid distribution and structural changes during convective drying of gels

In: Colloid process engineering. - Cham [u.a.]: Springer International Publishing, S. 93-112, 2015;

Le Kieu, Hiep; Kharaghani, Abdolreza; Tsotsas, Evangelos

Pore network simulation of heat and mass transfer in superheated steam drying

In: EuroDrying'2015: 5th European Drying Conference, October 21-23, 2015, Budapest, Hungary; proceedings. - Szent István University, S. 211-219;

Mader-Arndt, Katja; Kutelova, Zinaida; Tomas, Jürgen

Microscopic particle contact adhesion models and macroscopic behavior of surface modified particles

In: Particle adhesion and removal. - Hoboken [u.a.]: John Wiley [u.a.], S. 105-155, 2015;

McBride, Kevin; Sundmacher, Kai

Computer-aided design of solvents for the recovery of a homogeneous catalyst used for alkene hydroformylation

In: 12th International Symposium on Process Systems Engineering and 25th European Symposium on Computer Aided Process Engineering. - Amsterdam [u.a.]: Elsevier, S. 2075-2080, 2015 - (Computer-aided chemical engineering; 37);

Mehakpreet, Singh; Kumar, Jitendra; Bück, Andreas

A volume conserving discrete formulation of aggregation population balance equations on non-uniform meshes

In: MATHMOD 2015: 8th Vienna Conference on Mathematical Modelling, February 18 - 20, 2015, Vienna University of Technology, Austria; abstract volume. - Vienna: ARGESIM, S. 192-197

Kongress: MATHMOD; 8 (Vienna): 2015.02.18-20;

Müller, Peter; Böttcher, Ronny; Trüe, Michael; Tomas, Jürgen

Einfluss elastischer Wellen beim elastischen Stossvorgang

In: Teipel, Ulrich.: Produktgestaltung in der Partikeltechnologie, Band 7: 7. Symposium Partikeltechnologie, 23. - 24.

April 2015, Fraunhofer-Forum, Berlin. - Stuttgart: Fraunhofer Verl., S. 47-66

Kongress: Symposium Partikeltechnologie; 7 (Berlin): 2015.04.23-24;

Radeva, Zheni; Müller, Peter; Tomas, Jürgen

Untersuchungen des Einflusses der Prozessparameter auf die Bruchfestigkeit von Zeolith 4A Pellets

In: Teipel, Ulrich.: Produktgestaltung in der Partikeltechnologie, Band 7: 7. Symposium Partikeltechnologie, 23. - 24.

April 2015, Fraunhofer-Forum, Berlin. - Stuttgart: Fraunhofer Verl., S. 299-311

Kongress: Symposium Partikeltechnologie; 7 (Berlin): 2015.04.23-24;

Rahimi, Arman; Kharaghani, Abdolreza; Metzger, Thomas; Tsotsas, Evangelos

Pore network model for drying of salt solutions - solute migration and crystallization

In: First Nordic Baltic Drying Conference: 17-19 Juni 2015, Gda sk, Poland; proceedings. - Gda sk, insges. 15 S.[Beitrag auf USB-Stick];

Rahimi, Arman; Kharaghani, Abdolreza; Metzger, Thomas; Tsotsas, Evangelos

Pore network simulation of salt crystallization in drying porous media

In: EuroDrying'2015: 5th European Drying Conference, October 21-23, 2015, Budapest, Hungary; proceedings. - Szent István University, S. 345-352;

Rieck, Christian; Bück, Andreas; Tsotsas, Evangelos

Modeling of layering growth processes using a Monte Carlo approach

In: MATHMOD 2015: 8th Vienna Conference on Mathematical Modelling, February 18 - 20, 2015, Vienna University of Technology, Austria; abstract volume. - Vienna: ARGESIM, S. 99-104

Kongress: MATHMOD; 8 (Vienna): 2015.02.18-20;

Sundmacher, Kai

Multi-level design of process systems for efficient chemicals production and energy conversion

In: 12th International Symposium on Process Systems Engineering and 25th European Symposium on Computer Aided Process Engineering. - Amsterdam [u.a.]: Elsevier, S. 25-34, 2015 - (Computer-aided chemical engineering; 37);

Tran, Thi Thu Hang; Jaskulski, Maciej; Peglow, Mirko; Avila-Acevedo, Juan Gabriel; Tsotsas, Evangelos

A new validated model for single droplet drying process

In: First Nordic Baltic Drying Conference: 17-19 Juni 2015, Gda sk, Poland; proceedings. - Gda sk, insges. 10 S.[Beitrag auf USB-Stick];

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

A dynamic method for computing thermodynamic equilibria in process simulation

In: Computer aided chemical engineering. - Amsterdam [u.a.]: Elsevier, Bd. 37.2015, S. 299-304;

Artikel in Kongressbänden

Bück, Andreas; Neugebauer, Christoph; Meyer, Katja; Palis, Stefan; Diez, E.; Kienle, Achim; Heinrich, Stefan; Tsotsas, Evangelos

Influence of operation parameters on process stability in continuous fluidised bed layering with external classification

In: 7th International Granulation Workshop: Sheffield, UK, 2015. - Sheffield, insges. 11 S.[Beitrag auf USB-Stick];

Hagemeier, Thomas; Jiang, Zhaochen; Bück, Andreas; Tsotsas, Evangelos

Discrete analysis of particle collision behavior in fluidized beds

In: 7th International Granulation Workshop: Sheffield, UK, 2015. - Sheffield, insges. 11 S.[Beitrag auf USB-Stick];

Mielke, Lisa; Hoffmann, Torsten; Peglow, Mirko; Henneberg, Markus; Bück, Andreas; Tsotsas, Evangelos

Reduction of energy consumption in batch fluidized bed layering granulation processes by temporal separation
In: 7th International Granulation Workshop: Sheffield, UK, 2015. - Sheffield, insges. 14 S.[Beitrag auf USB-Stick];

Pashminehazar, Reihaneh; Kharaghani, Abdolreza; Tsotsas, Evangelos

Micro-structure of maltodextrin agglomerates produced by fluidized bed
In: 7th International Granulation Workshop: Sheffield, UK, 2015. - Sheffield, insges. 16 S.[Beitrag auf USB-Stick];

Rieck, Christian; Bück, Andreas; Tsotsas, Evangelos

Stochastic modeling of layering growth processes in fluidized beds
In: 7th International Granulation Workshop: Sheffield, UK, 2015. - Sheffield, insges. 15 S.[Beitrag auf USB-Stick];

Saha, Jitraj; Kumar, Jitendra; Bück, Andreas; Tsotsas, Evangelos

Finite volume approximations of population balance equations
In: 7th International Granulation Workshop: Sheffield, UK, 2015. - Sheffield, insges. 12 S.[Beitrag auf USB-Stick];

Sondej, Franziska; Bück, Andreas; Tsotsas, Evangelos

Experimental analysis of the microstructure of single particles
In: 7th International Granulation Workshop: Sheffield, UK, 2015. - Sheffield, insges. 20 S.[Beitrag auf USB-Stick];

Andere Materialien

Hopf, Talea; Kockentiedt, Sarah; Hintz, Werner; Henrich-Noack, Petra; Tomas, Jürgen; Sabel, Bernhard

Development and characterization of surface modified nanoparticle formulations in terms of size and surface properties
In: 8th International Conference on Conveying and Handling of Particulate Solids (CHOPS 2015). - Tel-Aviv; 2015, Art. 082, insgesamt 13 S.[Beitrag auf USB-Stick];

Dissertationen

Binev, Daniel; Seidel-Morgenstern, Andreas [Gutachter]

Continuous fluidized bed crystallization. - Magdeburg, Univ., Fak. für Verfahrens- und Systemtechnik, Diss., 2015, 2014; X, 161 S.: graph. Darst.;

Gao, Kaidi; Seidel-Morgenstern, Andreas [Gutachter]

Methane dehydro aromatization - thermodynamics, catalysts, kinetics and potential of membrane reactors.
- Magdeburg, Univ., Fak. für Verfahrens- und Systemtechnik, Diss., 2015; X, 192 S.: III., graph. Darst.;

González Martínez, Isaí; Sundmacher, Kai [Gutachter]

Hydrogen chloride electrolysis in a polymer-electrolyte-membrane reactor with oxygen-depolarized cathode.
- Magdeburg, Univ., Fak. für Verfahrens- und Systemtechnik, Diss., 2015; 112 S.: graph. Darst.; 30 cm;

Hampel, Neli Atanasova; Tsotsas, Evangelos [Gutachter]

Diskontinuierliches und kontinuierliches Pelletcoating im Wurster-Wirbelschichtprozess. - Magdeburg, Univ., Fak. für Verfahrens- und Systemtechnik, Diss., 2015; XV, 203 Bl.: graph. Darst.;

Heldt, Frank Stefan; Frensing, Timo [Gutachter]; Reichl, Udo [Gutachter]

Mathematical models of influenza A virus infection - from intracellular replication to virus growth in cell populations.
- Magdeburg, Univ., Fak. für Verfahrens- und Systemtechnik, Diss., 2015, 2014; XX, 190 S.: graph. Darst.;

Hertel, Christoph; Sundmacher, Kai [Gutachter]; Mangold, Michael [Gutachter]

Experimental and theoretical analysis of the cyclic water gas shift reactor. - Magdeburg, Univ., Fak. für Verfahrens- und Systemtechnik, Diss., 2015; VIII, 117 S.: III., graph. Darst.;

Müller, Thomas; Kienle, Achim [Gutachter]; Reichl, Udo [Gutachter]

Population balance modeling of influenza A virus replication in MDCK cells during vaccine production. - Magdeburg,

Univ., Fak. für Elektrotechnik und Informationstechnik, Diss., 2015; X, 127 S.: graph. Darst.;

Peschel, Britta; Reichl, Udo [Gutachter]; Marwan, Wolfgang [Gutachter]

Infection dynamics and virus-induced apoptosis in influenza virus A infected adherent and suspension MDCK cells.
- Zugl.: Magdeburg, Univ., Fak. für Verfahrens- und Systemtechnik, Diss., 2015; Aachen: Shaker; VI, 180 S.: III., graph. Darst.; 21 cm, 291 g - (Forschungsberichte aus dem Max-Planck-Institut für Dynamik komplexer technischer Systeme; 44), ISBN 978-3-8440-3738-8;

Wassermann, Magdalena; Tsotsas, Evangelos [Gutachter]; Peglow, Mirko [Gutachter]

Niedertemperaturgranulierung von Mikroorganismen. - Magdeburg, Univ., Fak. für Verfahrens- und Systemtechnik, Diss., 2015; XVII, 172 S.: III., graph. Darst.;

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
Dr.-Ing. Dieter Gabel
Dipl.-Ing. (FH) Michael Schmidt
Christine Liebich (beratend)

2. Hochschullehrer

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

3. Forschungsprofil

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

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

Instrumentelle Schadstoffanalytik und Emissionsmesstechnik

- Quecksilberminderung in Rauchgasen
- Abwasserreinigung
- Luftreinhaltung

Anlagensicherheit

- Unsicherheiten bei Ingenieurberechnungen
- Probabilistische Methoden der Sicherheitsanalyse
- Bestimmung sicherheitstechnischer Kenngrößen
- Modellierung von Explosionen
- Theoretische und experimentelle Arbeiten zur passiven Sicherheit
- Experimentelle Untersuchung durchgehender Reaktionen
- Modellierung und Simulation von Bränden
- Weiterentwicklung von Methoden der quantitativen Risikoanalyse
- Modellierung störfallbedingter Stoff-Freisetzungen

4. Serviceangebot

Brand- und Explosionsschutz

- Auftragsarbeiten zur Bestimmung von Brand- und Explosionseigenschaften von Stoffen
- Unterstützung bei der Erstellung von Brandschutz- und Explosionsschutzgutachten

Probabilistische Sicherheits- und Risikoanalysen

- Unterstützung bei der Erstellung von Sicherheitsberichten
- Probabilistische Sicherheitsanalysen
- Quantitative Risikoanalysen

Sicherheitstechnische Bewertung von Stoffen

- Simultane thermische Analyse von thermisch instabilen Stoffen
- Analyse gasförmiger Reaktionsprodukte

5. Methoden und Ausrüstung

- Bestimmung der Mindestzündtemperatur aufgewirbelter Stäube
- Bestimmung der Explosionskenngrößen von Gasen, Dämpfen und aufgewirbelten Stäuben in geschlossenen Apparaturen
- Bestimmung der Explosionskenngrößen aufgewirbelter Stäube in offenen Apparaturen
- Bestimmung der Mindestzündenergie aufgewirbelter Stäube
- Bestimmung des Flammpunktes brennbarer Flüssigkeiten
- Bestimmung der Mindestzündtemperatur abgelagerter Stäube (Glimmtemperatur)
- adiabate und isoperibole Warmlagerungsversuche
- Zündtemperatur brennbarer Flüssigkeiten und Gase
- Simultan thermische Analyse (TGA+DSC) mit Gasanalyse (MS und FTIR)
- Elementaranalyse für die Elemente C, H, N und Elementaranalyse für die Elemente C und S
- Bestimmung der Bruchwerte und Kraft-Deformationsverläufe im uniaxialen Bruchversuch
- Thermogravimetrische Analyse (TG)
- Partikelgrößenanalyse mit digitaler Bildverarbeitung
- Bestimmung des Brennwertes einer Probe

6. Kooperationen

- Bergische Universität Wuppertal
- Berliner Feuerwehr
- Bundesanstalt für Materialforschung und -prüfung
- Dräger Safety AG & Co. KGaA
- Feuerwehr der Stadt Frankfurt am Main
- Glatt Ingenieurtechnik Weimar GmbH
- Solvay Werk Bernburg
- Vereinigung zur Förderung des deutschen Brandschutzes e.V.
- ZVEI - Zentralverband Elektrotechnik- und Elektronikindustrie e.V.

7. Forschungsprojekte

Projektleiter: Prof. Dr.-Ing. habil. Ulrich Krause

Projektbearbeiter: Stefanie Schubert, M.Sc., Dr.-Ing. Heike Krause

Kooperationen: BAM; Berliner Feuerwehr; Vereinigung zur Förderung des deutschen Brandschutzes e.V.

Förderer: Bund; 01.08.2015 - 31.07.2018

AERIUS - Alternatives Löschmittel Druckluftschaum - komplexe Großschadenslagen vermeiden

Obwohl mit komprimierter Luft aufgeladener Löschschaum bereits in den 30er Jahren des vergangenen Jahrhunderts entwickelt wurde, sind die genauen Wirkmechanismen weitgehend unbekannt geblieben. Trotz Reduzierung der spezifischen Wärmekapazität auf etwa ein Drittel derer von Wasser zeigt die empirische Beobachtung für viele Brände einen besseren Löscherfolg. Einige Brände, in die z.B. große Mengen Kunststoffe oder brennbare Flüssigkeiten involviert sind, lassen sich offensichtlich mit Druckluftschaum wesentlich effizienter löschen als mit herkömmlicher Schaumausbringung. Zudem darf erwartet werden, dass die größeren Wurfweiten der Druckluftschäume die Sicherheit der Einsatzkräfte verbessern.

Die Gesamtziele des Vorhabens AERIUS bestehen in der Aufklärung der bisher unzureichend bekannten Wirkmechanismen von Druckluftschäumen im Zusammenspiel von Reaktandentrennung und Wärmeentzug, in der wissens- (statt bisher rein erfahrungs-)basierten Applikation von Druckluftschaum auf Großbrände, in der besseren Beherrschung komplexer Großschadenslagen durch die Feuerwehren mittels des Einsatzes von Druckluftschäumen (Compressed Air Foam Systems - CAFS) bei gleichzeitiger Erhöhung des Sicherheitsniveaus für die Einsatzkräfte.

Dies wird erreicht durch die im Antrag beschriebenen Forschungsaktivitäten zu den wissenschaftlichen Grundlagen, die Validierung dieser Grundlagen an Realbrandszenarien, die Ableitung einsatztaktischer Grundsätze und die Übertragung dieser in die Ausbildung sowie in Handlungsempfehlungen für die Feuerwehren bis zur Erstellung pränormativer Dokumentationen.

BMBF-FKZ. 13N13630 13N13633

Projektleiter: Prof. Dr.-Ing. habil. Ulrich Krause

Kooperationen: BAM; ZVEI - Zentralverband Elektrotechnik- und Elektronikindustrie e.V.

Förderer: Industrie; 01.05.2015 - 31.05.2016

Brandfrühsterkennung

Methoden der Branddetektion beruhen entweder auf der Freisetzung von Rauch oder Wärme. Bis zu einer detektierbaren Signalstärke vergehen mehrere Minuten, die für eine frühzeitige Alarmierung der Feuerwehr bzw. für die Selbstrettung von Personen fehlen. Mit Hilfe innovativer Detektionsmethoden soll die Entwicklung von Wärme und von Reaktionsprodukten in einem Temperaturbereich (etwa 150 °C bis 400 °C) erfasst werden, in dem man nach bisheriger Auffassung noch nicht von einem Brand spricht.

In diesem Temperaturbereich muss jedoch zunächst herausgefunden werden, welche Brandstoffe welche Reaktionsprodukte in welcher Stoffmengenkonzentration freisetzen, um für diese Reaktionsprodukte sensitive Detektionstechniken entwickeln zu können.

Das Verbundvorhaben zwischen Bundesanstalt für Materialforschung und -prüfung, Otto-von-Guericke-Universität und dem Zentralverband der elektrotechnischen Industrie e.V. widmet sich der chemisch-analytischen Untersuchung von Zersetzungs- und Oxidationsvorgängen in dieser frühesten Brandphase für "repräsentative" Brandstoffe und Stoffgemische aus dem Industrie- und Gebäudebereich, z.B. Schaum- und Dämmstoffe, Kabelisolierungen, elektronische und elektrotechnische Bauteile.

Im Ergebnis soll das Design einer neuen Generation von Branddetektoren möglich werden, um die Alarmierungszeiten für die Brandbekämpfung zu verkürzen.

Projektleiter: Prof. Dr.-Ing. habil. Ulrich Krause

Projektbearbeiter: N.N.

Förderer: Fördergeber; 01.01.2015 - 31.12.2017

EMRIS - Emerging risks of smouldering fires

EMRIS - Emerging risks of smouldering fires - is a project that addresses the problem of hazardous low-temperature reactions in porous solids like biomass, fossile fuels, waste materials, foams etc. At circumstances, heat produced in low-temperature chemical reactions cannot entirely be dissipated. This leads to a temperature increase inside the porous material which further accelerates the ongoing reactions. Eventually, this positive feedback loop ends in a fire. In the project the conditions for such incidents will be studied. The prevailing physical parameters like reaction front velocity, heat release and concentrations of reaction products will be studied under boundary conditions which reflect practical applications.

The project is a cooperation between Stord-Haugesund University College in Norway, University of Lund in Sweden and Otto von Guericke University Magdeburg, Germany. Funding is provided by the Research Council of Norway.

Projektleiter: Prof. Dr.-Ing. habil. Ulrich Krause

Förderer: Europäischen Kommission (EU); 01.01.2013 - 31.12.2017

ENISFER - European Network of Industrial Systems and Facilities for Exploration of Emerging Risks

ENISFER is the **European Network of Industrial Systems and Facilities for Exploration of Emerging Risks** within the EU-VRi organization and tools. This network is in operation since the beginning of 2012, with large industrial companies and renown research organizations among its elite pool of partners.

Projektleiter: Prof. Dr.-Ing. habil. Ulrich Krause

Förderer: Bund; 19.07.2013 - 31.12.2017

HYPOS_Hydrogen Power and Storage Solutions

Von Ostdeutschland soll eine Revolution in der Wasserstoffwirtschaft ausgehen. Sie kann die Energiewende entscheidend beflügeln und nachhaltige Chemie im mitteldeutschen Chemiedreieck ermöglichen. Das Projekt "HYPOS Hydrogen Power Storage & Solutions East Germany" weist den Weg, wie der in Abhängigkeit vom Wetter unterschiedlich stark anfallende Strom aus Wind- und Solarkraftanlagen in den speicherfähigen chemischen Energieträger Wasserstoff gewandelt wird. Abnehmern sollen dadurch stets die erforderlichen Energie- und Stoffmengen bedarfsgerecht verfügbar gemacht werden. Um das zu erreichen soll er durch spezielle chemische Verfahren in Wasserstoff umgewandelt, gespeichert, transportiert und kontinuierlich genutzt werden.

Das überregionale und interdisziplinäre HYPOS-Konsortium verfolgt zur Verwirklichung seiner Vision einen fachübergreifenden Konzept- und Projektansatz: Die vorgesehenen Forschungs- und Entwicklungsleistungen werden auf die optimale Umwandlung und Speicherung von Strommengen aus erneuerbaren Quellen in den chemischen Energieträger Wasserstoff ausgerichtet. Gleichzeitig wird die wirtschaftliche und gesellschaftlich akzeptierte Integration dieser erneuerbaren Energieträger in die Versorgungsinfrastruktur vorangetrieben.

Die Abteilung Anlagentechnik und Anlagensicherheit am IAUT steht innerhalb des Projektkonsortiums für das Querschnittsthema "Sicherheit".

Projektleiter: Prof. Dr.-Ing. habil. Ulrich Krause

Projektbearbeiter: Stefanie Schubert, Alexander Saupe

Kooperationen: Bergische Universität Wuppertal; Bundesanstalt für Materialforschung und -prüfung; Feuerwehr der Stadt Frankfurt am Main; Vereinigung zur Förderung des deutschen Brandschutzes e.V.

Förderer: Fördergeber; 01.04.2012 - 31.03.2015

TIBRO - Innovative Sicherheitsarchitektur der nicht-polizeilichen Gefahrenabwehr

Eine qualitativ hochwertige Planung der nichtpolizeilichen Gefahrenabwehr unter Berücksichtigung aktueller Schutzziele erfordert zwingend eine kritische, objektive Evaluierung wesentlicher Parameter des Systems "Feuerwehren". Ein zukunftsfähiges Feuerwehrsysteem erfordert gegenüber der statischen Planungsgrundlage der O.R.B.I.T.-Studie eine moderne dynamische Planungsgrundlage. Diese wiederum muss in hinreichender Weise sicherheitlichen Prämissen genügen, weshalb diese evaluiert werden müssen. Das Ergebnis dieser Evaluierung eröffnet eine aktualisierte und erneuerte Grundlage für Handlungsalternativen bzw. Entscheidungsmöglichkeiten zum Zweck einer allfälligen Ertüchtigung und demzufolge Zukunftsfähigkeit des Feuerwehrsysteem. Nutznießer der Ergebnisse des darauf ausgerichteten Forschungsvorhabens TIBRO sind vorrangig die Endanwender, das heißt unmittelbar die für Feuerwehren zuständige Führungskräfte, Verwaltungsinstanzen und politisch Verantwortlichen. Des Weiteren partizipieren alle auf das Feuerwehrwesen ausgerichtete Herstellerfirmen, Ausbildungsanbieter und die Forschungs- und Entwicklungseinrichtungen von den Forschungsergebnissen. Das Forschungsgesamtziel ist der wissenschaftlich fundierte Unterbau eines zukunftsfähigen Feuerwehrsysteem im Rahmen einer leistungs- und anpassungsfähigen Sicherheitsarchitektur.

Projektleiter: Prof. Dr. Heinz Köser

Förderer: Bund; 01.11.2014 - 28.10.2017

Quecksilber Emissionen durch festen Hausbrand - Bewertung und Minderung.

Quecksilber und seine Verbindungen sind neurotoxische Umweltschadstoffe. Die Minamata Konvention der Vereinten Nationen (UNEP) strebt eine Minderung der anthropogenen Quecksilberemissionen an.

Der Quecksilbergehalt von Brennstoffen wird in der Feuerungen weitgehend mit den Rohabgasen verflüchtigt. Ein Teil der Quecksilberemissionen aus der Verbrennung ist durch den Hausbrand bedingt. Hier wird das Quecksilber ohne nennenswerte Abscheidung erdnah emittiert.

Ziel des Vorhabens ist es zunächst eine Datenbasis für die in Deutschland durch den Hausbrand bedingten Quecksilberemissionen zu entwickeln. In einem zweiten Schritt sollen dann Kriterien für einen quecksilberarmen Hausbrand entwickelt werden.

8. Eigene Kongresse, wissenschaftliche Tagungen und Exponate auf Messen

9. Veröffentlichungen

Begutachtete Zeitschriftenaufsätze

Addai, Emmanuel Kwasi; Gabel, Dieter; Krause, Ulrich

Experimental investigation on the minimum ignition temperature of hybrid mixtures of dusts and gases or solvents
In: Journal of hazardous materials: environmental control, risk assessment, impact and management. - New York, NY [u.a.]: Science Direct, 2015; <http://dx.doi.org/10.1016/j.jhazmat.2015.09.006>;
[Imp.fact.: 4,529]

Addai, Emmanuel Kwasi; Gabel, Dieter; Krause, Ulrich

Explosion characteristics of three component hybrid mixtures
In: Process safety and environmental protection. - Amsterdam: Elsevier, 2015; <http://dx.doi.org/10.1016/j.psep.2015.06.013>;
[Imp.fact.: 2,551]

Addai, Emmanuel Kwasi; Gabel, Dieter; Krause, Ulrich

Lower explosion limit of hybrid mixtures of burnable gas and dust
In: Journal of loss prevention in the process industries. - Amsterdam [u.a.]: Elsevier Science, 2015; <http://dx.doi.org/10.1016/j.jlp.2015.02.014>;
[Imp.fact.: 1,347]

Addai, Emmanuel Kwasi; Gabel, Dieter; Krause, Ulrich

Models to estimate the minimum ignition temperature of dusts and hybrid mixtures
In: Journal of hazardous materials: environmental control, risk assessment, impact and management. - New York, NY [u.a.]: Science Direct, 2015; <http://dx.doi.org/10.1016/j.jhazmat.2015.10.015>;
[Imp.fact.: 4,529]

Annan, Joe-Steve; Addai, Emmanuel Kwasi; Tulashie, Samuel K.

A call for action to improve occupational health and safety in Ghana and a critical look at the existing legal requirement and legislation
In: Safety and health at work. - Incheon: Occupational Safety and Health Research Inst, 2015; <http://dx.doi.org/10.1016/j.shaw.2014.12.002>;

Chen, Zhongbing; Kusch, Peter; Paschke, Heidrun; Kästner, Matthias; Köser, Heinz

The dynamics of low-chlorinated benzenes in a pilot-scale constructed wetland and a hydroponic plant root mat treating sulfate-rich groundwater
In: Environmental science and pollution research. - Berlin: Springer, Bd. 22.2015, 5, S. 3886-3894;
[Imp.fact.: 2,757]

Dranga, Beatrice-Andreea; Köser, Heinz

Increased co-oxidation activity for mercury under hot and cold site coal power plant conditions - preparation and evaluation of Au/TiO₂-coated SCR-DeNO_x catalysts
In: Applied catalysis. - Amsterdam: Elsevier Applied catalysis / B, Bd. 166/167.2015, S. 302-312;

Götze, Oliver; Richter, Johannes; Zinke, Ronald; Farnell, D. J. J.

Ground-state properties of the triangular-lattice Heisenberg antiferromagnet with arbitrary spin quantum number s
In: Journal of magnetism and magnetic materials: MMM. - Amsterdam: North-Holland Publ. Co, Bd. 397.2015, S. 333-341;
[Imp.fact.: 1,970]

Hecht, Kristin; Bey, Oliver; Etmüller, Jürgen; Graefen, Patrick; Friehmelt, Rainer; Nilles, Michael

Effect of gas density on gas holdup in bubble columns
In: Chemie - Ingenieur - Technik: CIT. - Weinheim: Wiley-VCH Verl, Bd. 87.2015, 6, S. 762-772;

Idakiev, Vesselin; Mörl, Lothar

Methode zur Untersuchung der Partikelbewegung in diskontinuierlich und kontinuierlich arbeitenden Wirbelschichten

In: Chemie - Ingenieur - Technik: CIT. - Weinheim: Wiley-VCH Verl, Bd. 87.2015, 5, S. 626-637;
[Imp.fact.: 0,661]

Idakiev, Vesselin V.; Marx, Sebastian; Roßau, Antje; Bück, Andreas; Tsotsas, Evangelos; Mörl, Lothar

Inductive heating of fluidized beds - influence on fluidization behavior

In: Powder technology: an international journal on the science and technology of wet and dry particulate systems.
- Amsterdam [u.a.]: Elsevier Science, Bd. 286.2015, S. 90-97;

[Imp.fact.: 2,349]

Kaudelka, Sven; Hofmann-Böllinghaus, Anja; Hauswaldt, Sebastian; Krause, Ulrich

Auswirkung von Zündquellen und Systembeschaffenheit auf das Brandverhalten EPS-basierter Wärmedämm-
Verbundsysteme

In: Bauphysik: Wärme, Feuchte, Schall, Brand, Licht, Energie, Klima. - Berlin: Ernst, Bd. 37.2015, 4, S. 205-212;

Klippel, Alexander; Schmidt, Martin; Krause, Ulrich

Dustiness in workplace safety and explosion protection - review and outlook

In: Journal of loss prevention in the process industries. - Amsterdam [u.a.]: Elsevier Science, Bd. 34.2015, S. 22-29;

[Imp.fact.: 1,347]

Krietsch, Arne; Scheid, Marc; Schmidt, Martin; Krause, Ulrich

Explosion behaviour of metallic nano powders

In: Journal of loss prevention in the process industries. - Amsterdam [u.a.]: Elsevier Science, 2015; <http://dx.doi.org/10.1016/j.jlp.2015.03.016>;

[Imp.fact.: 1,347]

Kusche, Christian; Knaust, Christian; Hahn, Sarah-Katharina; Krause, Ulrich

Experimental investigations of the combustion efficiency for fire load calculations

In: Materials testing: Materialprüfung; materials and components, technology and application. - München: Hanser, Bd. 57.2015, 10, S. 843-849; 10.3139/120.110795;

Lepik, Petr; Gabel, Dieter; Adamus, Wojciech; Mokos, Ladislav; Mynarz, Miroslav; Serafin, Jiri

Determination of the Minimum Ignition Energy of different devices

In: Sborník v deckých prací Vysoké Školy Bá ské - Technické Univerzity Ostrava / ada bezpe nostního inženýrství.
- Ostrava: VŠB - TU, Bd. 10.2015, 1, S. 8-14;

Löhnert, Andrea; Monreal, Nils; Knaust, Christian; Hofmann, Anja; Krause, Ulrich

CFD modeling approach of smoke toxicity and opacity for flaming and non-flaming combustion processes

In: Fire and materials: an international journal. - New York, NY [u.a.]: Wiley, 2015; <http://dx.doi.org/10.1002/fam.2340>;

[Imp.fact.: 1,323]

Meyer, Lennart; Beyer, Michael; Krause, Ulrich

Hot surfaces generated by sliding metal contacts and their effectiveness as an ignition source

In: Journal of loss prevention in the process industries. - Amsterdam [u.a.]: Elsevier Science, 2015; <http://dx.doi.org/10.1016/j.jlp.2015.02.013>;

[Imp.fact.: 1,347]

Richter, Johannes; Zinke, Ronald; Farnell, Damian J. J.

The spin-1/2 square-lattice J 1-J 2 mode I: the spin-gap issue

In: The European physical journal. - Berlin: SpringerThe European physical journal / B, Bd. 88.2015, 2, insges. 6 S.;

[Imp.fact.: 1,463]

Rousochatzakis, Ioannis; Richter, Johannes; Zinke, Ronald; Tsirlin, Alexander A.

Frustration and Dzyaloshinsky-Moriya anisotropy in the kagome francisites $\text{Cu}_3\text{Bi}(\text{SeO}_3)_2\text{O}_2\text{X}$ (X

In: Physical review. - College Park, Md: APSPhysical review / B; Vol. 91.2015, 2, Art. 024416, insgesamt 15 S.;

[Imp.fact.: 3,664]

Tschirschwitz, Rico; Schröder, Volkmar; Brandes, Elisabeth; Krause, Ulrich

Determination of explosion limits - criterion for ignition under non-atmospheric conditions

In: Journal of loss prevention in the process industries. - Amsterdam [u.a.]: Elsevier Science, 2015; <http://dx.doi.org/10.1016/j.jlp.2015.01.012>;

[Imp.fact.: 1,347]

Buchbeiträge

Addai, Emmanuel Kwasi; Gabel, Dieter; Krause, Ulrich

Ignition and explosion behaviour of hybrid mixtures of two and three components

In: 4. Magdeburger Brand- und Explosionsschutztag: am 26. und 27. März 2015. - Magdeburg, insges. 11 S.

Kongress: Magdeburger Brand- und Explosionsschutztag; 4 (Magdeburg): 2015.03.26-27;

Gabel, Dieter; Addai, Emmanuel Kwasi; Krause, Ulrich

Explosionscharakteristiken von aerosolen hybriden Lösemittel/Staub-Gemischen

In: 12. Fachtagung Anlagen-, Arbeits- und Umweltsicherheit: Köthen, 5./6. November 2015; Tagungsunterlagen.

- Köthen: Hochschule Anhalt, insges. 2 S.;

Gabel, Dieter; Schmidt, Michael; Schlüsselburg, Sabine

Simultanthermische Analyse mit gekoppelter FTIR- und MS-Analyse - Verfahren, Möglichkeiten und Grenzen

In: 4. Magdeburger Brand- und Explosionsschutztag: am 26. und 27. März 2015. - Magdeburg, insges. 8 S.

Kongress: Magdeburger Brand- und Explosionsschutztag; 4 (Magdeburg): 2015.03.26-27;

Melcher, Thomas; Thiele, Paul

Brandversuche im Realmaßstab-Statistische Analyse eines Zufallsexperimentes

In: 4. Magdeburger Brand- und Explosionsschutztag: am 26. und 27. März 2015. - Magdeburg

Kongress: Magdeburger Brand- und Explosionsschutztag; 4 (Magdeburg): 2015.03.26-27;

Richter, Elizabeth; Krause, Ulrich

Feststoffgasgeneratoren für die Brandbekämpfung in der zivilen Luftfahrt am Beispiel von Frachträumen

In: 4. Magdeburger Brand- und Explosionsschutztag: am 26. und 27. März 2015. - Magdeburg, insges. 11 S.

Kongress: Magdeburger Brand- und Explosionsschutztag; 4 (Magdeburg): 2015.03.26-27;

Thiele, Paul; Melcher, Thomas

Brandschutzlösungen von Schutzhütten in Extremlage

In: 4. Magdeburger Brand- und Explosionsschutztag: am 26. und 27. März 2015. - Magdeburg, insges. 8 S.

Kongress: Magdeburger Brand- und Explosionsschutztag; 4 (Magdeburg): 2015.03.26-27;

Wissenschaftliche Monografien

Addai, Emmanuel Kwasi

Flame and explosion suppression using pyrobubbles

LAP LAMBERT Acad. Publ., 2015; 68 S., ISBN 978-3-659-76630-5;

Artikel in Kongressbänden

Addai, Kwasi Emmanuel; Gabel, Dieter; Krause, Ulrich

Minimum ignition temperature of hybrid mixtures of burnable dusts and gases

In: Proceedings of the 25th International Colloquium on the Dynamics of Explosions and Reactive Systems: 2-7 August 2015, Leeds, UK. - ICDERS, insges. 6 S.;

Dissertationen

Krietsch, Arne; Krause, Ulrich [Gutachter]

Untersuchung der Brand- und Explosionsgefahren von Nanostäuben. - Magdeburg, Univ., Fak. für Verfahrens- und Systemtechnik, Diss., 2015; X, 124 Bl.: III., graph. Darst.;

Löhnert, Andrea; Krause, Ulrich [Gutachter]; Thévenin, Dominique [Gutachter]

Modellierung von Brandszenarien mit CFD unter Berücksichtigung des Einflusses der Brandrauchzusammensetzung auf die Toxizität und Sichtweiten. - Magdeburg, Univ., Fak. für Verfahrens- und Systemtechnik, Diss., 2015; XII, 158 Bl.: III., graph. Darst.;

Neske, Michael; Krause, Ulrich [Gutachter]

Experimentelle Untersuchungen und theoretische Modellierung zu den Auswirkungen von Wärmeexposition auf Pressluftatmer, Vollmasken und Lungenautomaten. - Magdeburg, Univ., Fak. für Verfahrens- und Systemtechnik, Diss., 2015; Magdeburg; XXIV, 203 S.: III., graph. Darst.; 30 cm;

Tschirschwitz, Rico; Krause, Ulrich [Gutachter]

Entwicklung von Bestimmungsverfahren für Explosionskenngrößen von Gasen und Dämpfen für nichtatmosphärische Bedingungen. - Magdeburg, Univ., Fak. für Verfahrens- und Systemtechnik, Diss., 2015; XII, 168 Bl.: III., graph. Darst.;

Zistl, Christiane; Krause, Ulrich [Gutachter]; Thévenin, Dominique [Gutachter]

File-based post-processing of DNS results for turbulent flames using MATLAB. - Magdeburg, Univ., Fak. für Verfahrens- und Systemtechnik, Diss., 2015; 184 S.: graph. Darst.;

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. Dieter Schinzer (Institutsleiter)

Prof. Dr. rer. nat. Franziska Scheffler

Prof. Dr. rer. nat. habil. Helmut Weiß

PD Dr. Edgar Haak

Dr. Volker Lorenz

Frau Uta Jeutes

Prof. Dr. rer. nat. habil. Frank T. Edelmann

2. Hochschullehrer

Prof. Dr. rer. nat. habil. Frank T. Edelmann

Hon.-Prof. Dr. Ernst R.F. Gesing

PD 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
- Metallorganische Gerüstverbindungen (MOFs)
- 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

Sorptionsmessungen mit CO₂, Wasser etc.

Quecksilberporosimetrie

Rheologische Messungen

Katalysortestung

5. Kooperationen

- Bayerisches Zentrum für Angewandte Energieforschung e.V. Würzburg
- CeramTec GmbH, Plochingen
- Deutsches Zentrum für Luft- und Raumfahrt e.V. (DLR)
- Dr. Wolf von Tümpling, Helmholtz-Zentrum für Umweltforschung (UFZ), Magdeburg
- Evonik GmbH & Co KG, Stuttgart
- Karlsruher Institut für Technologie (KIT)

- Leoni Bordnetze-Systeme GmbH, Kitzingen
- Prof. Dr. Norbert Stock, Christian-Albrechts-Universität zu Kiel
- Prof. Dr. Wolfgang Grünert, Ruhr-Universität Bochum
- Stiebel Eltron GmbH & Co KG, Holzminden

6. Forschungsprojekte

Projektleiter: Prof. Dr. Helmut Weiß

Förderer: Haushalt; 01.10.2014 - 30.09.2018

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. Mittlerweile konnten erste Messungen mittels Photoelektronenspektroskopie an diesem Adsorptionssystem durchgeführt werden. Sie werden jetzt weitergeführt mit dem Ziel der Absolutbestimmung der Belegung der ersten Wasserlage auf NaCl(100)-Einkristallflächen. und der Aufdeckung des Mechanismus der elektroneninduzierten Strukturumwandlung.

Projektleiter: Prof. Dr. Frank T. Edelmann

Projektbearbeiter: Ronny Syre

Förderer: Deutsche Forschungsgemeinschaft (DFG); 01.11.2012 - 31.10.2016

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: Nicole Harmgarth, Philipp Hillebrand, Peter Dröse

Förderer: Land (Sachsen-Anhalt); 01.07.2013 - 30.06.2018

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. Volker Lorenz, Janek Rausch

Förderer: Deutsche Forschungsgemeinschaft (DFG); 01.05.2011 - 30.04.2016

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 neuartiger 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, Sida Wang, John W. Gilje (James Madison University)

Förderer: Haushalt; 01.04.2012 - 31.03.2016

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, sowie das Benzotriazolylpropanamid. Aktuell werden auch ring-substituierte Derivate wie das t-Butylpyrazolylpropanamid verwendet.

Projektleiter: Prof. Dr. Frank T. Edelmann

Projektbearbeiter: Dr. Volker Lorenz

Kooperationen: Lapua GmbH, Schönebeck

Förderer: Deutsche Forschungsgemeinschaft (DFG); 01.01.2013 - 31.12.2017

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 (C₆H₁₁)₇Si₈O₁₂(OH)₃ (3) und (C₆H₁₁)₇Si₈O₁₂(OLi)₄ (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 Flamm- und Schutzeigenschaften. 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. Volker Lorenz, Janek Rausch

Förderer: Deutsche Forschungsgemeinschaft (DFG); 01.06.2013 - 31.05.2018

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, Nicole Harmgath, Janek Rausch

Förderer: Deutsche Forschungsgemeinschaft (DFG); 01.10.2011 - 30.09.2016

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 [(Me₃Si)₂N]₃CeCl sowie das neuartige Cer(IV)amidinat 3CeCl konnten unter Verwendung von PhICl₂ 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 -Alkyl-Liganden zu synthetisieren. Dieses Ziel könnte durch Verwendung nicht-reduzierender Alkylierungsmittel wie ZnMe₂ oder SnMe₄ 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; 01.01.2013 - 31.12.2017

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: PD Dr. Edgar Haak

Förderer: Deutsche Forschungsgemeinschaft (DFG); 01.12.2014 - 30.11.2017

Kaskadentransformationen ungesättigter Alkohole mit bifunktionellen Rutheniumkatalysatoren

Der Entwicklung neuer katalytischer Methoden zur atomökonomischen Darstellung komplexer Verbindungsklassen aus strukturell einfachen, ungesättigten Alkoholen ist das wesentliche Projektziel. Die Schwerpunkte liegen auf dem rationalen Katalysatordesign unter gezielter Nutzung kooperativer Effekte sowie auf sequentiell katalysierten Reaktionskaskaden. Die hinsichtlich ihrer katalytischen Eigenschaften besonders vielseitigen Übergangsmetallkomplexe redoxaktiver Cyclopentadienon-Liganden stehen im Zentrum der Untersuchungen. Sie katalysieren unterschiedlichste chemo- und regioselektive Transformationen bifunktioneller Substrate und bieten vielfältige Manipulationsmöglichkeiten. Die Basis der zu entwickelnden Kaskadentransformationen bilden rutheniumkatalysierte Allylierungs-Cycloisomerisierungs-Reaktionen tertiärer 1-Vinylpropargylalkohole. Die Anwendung der Verfahren erfolgt im Rahmen der Synthese diverser polycyclischer Grundkörper und Alkaloide. Im Hinblick auf zukünftige Anwendungen im Bereich der Natur- und Wirkstoffsynthese werden Optionen zur asymmetrisch-katalytischen Reaktionsführung unter Verwendung axial-chiraler Vertreter der Komplexserien und sequentiell katalysierte Dominoprozesse überprüft. Neben der produktorientierten Katalyseforschung erfolgen metallorganische Studien zur Aufklärung der Reaktionsmechanismen. Dabei liegt der Schwerpunkt auf der Isolierung und Charakterisierung zentraler metallorganischer Intermediate der Katalysezyklen sowie auf Markierungsexperimenten. Letztendlich sollen die Verfahren maximale Diversität, Flexibilität, Selektivität, Atom- und Stufenökonomie ermöglichen und mechanistisch zweifelsfrei verstanden werden um einen nachhaltigen Beitrag zur weiteren Entwicklung der präparativen Organischen Chemie leisten zu können.

Projektleiter: Dr. Alexandra Lieb

Projektbearbeiter: Dr. Ulf Betke

Förderer: Bund; 01.06.2013 - 31.05.2016

Neuartige Kompositwerkstoffe für die thermochemische Energiespeicherung, BMBF-Nachwuchsforschergruppe NEOTHERM

In der interdisziplinären Nachwuchsforschergruppe Neuartige Kompositwerkstoffe für die thermochemische Energiespeicherung (NEOTHERM) mikro-makro-poröse Kompositmaterialien für die thermochemische Energiespeicherung entwickelt, charakterisiert und bewertet. Ziel ist es, Sorptionsmaterialien für das Sorbat Wasser mit hoher Speicherdichte, effektivem Wärmeübergang und applikationsangepasster Sorptionstemperatur ($\approx 20-500$ °C) und geeignetem Temperaturhub sowohl für die Speicherung solarer Wärme als auch für die Energierückgewinnung aus technischen Prozessen bereitzustellen. Dazu sollen zelluläre Werkstoffe als Trägermaterialien entwickelt und bezüglich ihrer chemischen, morphologischen und thermischen Eigenschaften optimiert werden. Parallel dazu sollen als Aktivkomponente der Wärmespeicherung mikroporöse kristalline Verbindungen (*metal organic frameworks* = MOFs und Zeolithe) entwickelt und/oder modifiziert und auf dem Träger fixiert werden, z.B. mittels *in-situ*-Kristallisation oder Träger-Linker-Reaktion. Innerhalb der Nachwuchsgruppe sollen folgende Aspekte der neuen Werkstoffverbünde bearbeitet werden: (1) Synthese neuer bzw. modifizierter mikroporöser Materialien (Aktivkomponente), (2) Entwicklung von Herstellungsverfahren für makroporöse monolithische Materialien mit variierbaren oberflächenchemischen und thermischen Eigenschaften und gezielt eingestellter, offener Porosität (Träger), (3) Beschichtung/Oberflächenmodifizierung von offenzelligen Schäumen zur Einstellung der Sorptionseigenschaften des Verbundmaterials, (4) Steuerung von Ad- und Desorptionsvorgängen in porösen Festkörpern durch Steuerung der Porengröße und -form, (5) Evaluierung des Langzeitverhaltens der Wärmespeichermaterialien. Die Entwicklung der neuartigen Materialien erfolgt von Beginn an mit Blick auf den technischen Einsatz bezüglich der Arbeitstemperatur, des Lade-/Entladeverhaltens, der Langzeitstabilität, der Speicherdichte, und der Kosten und Sicherheit.

Projektleiter: Dr. habil. Jochen Vogt

Förderer: Haushalt; 04.03.2013 - 03.03.2016

Numerische Analyse molekularer Strukturen auf Oberflächen

Die Kenntnis der Wechselwirkungsmechanismen molekularer Strukturen auf Oberflächen ist im Zusammenhang mit einer Vielzahl von Fragestellungen von fundamentalem Interesse.

Ziel des Projekts ist die Fortführung der 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. Ziel des Projekts ist einerseits die Durchführung von Oberflächenstrukturanalysen mit existierenden Computercodes. Darüberhinaus wird die begonnene Erforschung und der Test neuer numerischer Methoden zur Strukturanalyse auf Grundlage von LEED-Experimenten fortgeführt.

Projektleiter: Dr. habil. Jochen Vogt

Förderer: Haushalt; 01.07.2014 - 28.06.2016

LEED it! Image tool zur quantitativen Auswertung von Beugungsbildern

Beugung langsamer Elektronen (LEED) gehört zu den Schlüsselexperimenten der *Surface Science*. LEED ermöglicht die Bestimmung der Struktur von Oberflächen auf der atomaren Größenskala. Der erste Schritt hierzu ist die quantitative Auswertung von Beugungsbildern. Vorhandene Programme sind nur kommerziell erhältlich und/oder die genauen Analysealgorithmen sind nicht hinreichend genau beschrieben. Im Rahmen des Projekts wird basierend auf der Programmiersprache C/C++ ein Software-Werkzeug entwickelt, mit dessen Hilfe Beugungsbilder in vielen gängigen Bildformaten analysiert werden können. Weitere spezielle Eigenschaften sind die Verfügbarkeit auf mehreren verbreiteten Betriebssystemen, verschiedene Methoden zur Reflexintegration inklusive Untergrundkorrektur, sowie die automatisierte Erstellung von I(V)-Kurven.

7. Eigene Kongresse, wissenschaftliche Tagungen und Exponate auf Messen

8. Veröffentlichungen

Begutachtete Zeitschriftenaufsätze

Ali, Asim; Langer, Mirko; Lorenz, Volker; Hrib, Cristian G.; Hilfert, Liane; Edelmann, Frank T.

Synthesis and structure of hexaphenyltrisiloxanediolates of sodium, titanium, and iron

In: Journal of organometallic chemistry. - New York, NY [u.a.]: Elsevier, Bd. 776.2014, S. 163-169, 2015;

[Imp.fact.: 2,302]

Bauer, Carolin; Scheffler, Franziska; Schwidder, Michael

Direct crystallization of silicoaluminophosphates onto the surface of open-celled SiC foam

In: Advanced engineering materials. - Weinheim: Wiley-VCH Verl, Bd. 17.2015, 5, S. 656-662;

[Imp.fact.: 1,508]

DAmico, David J.; McDougal, Michael A.; Amenta, Donna S.; Gilje, John W.; Wang, Sida; Hrib, Cristian G.; Edelmann, Frank T.

Synthesis and supramolecular structures of manganese complexes with N-pyrazolylpropanamide-derived ligands

In: Polyhedron. - Amsterdam [u.a.]: Elsevier Science, Bd. 88.2015, S. 19-28;

[Imp.fact.: 2,047]

Deblitz, Raik; Hrib, Cristian G.; Edelmann, Frank T.

Structures and energetic properties of two new salts comprising the 5,5 -azotetrazolate dianion

In: Crystals: open access journal. - Basel: MDPI, Bd. 5.2015, 3, S. 405-417;

Edelmann, Frank T.

Lanthanides and actinides - annual survey of their organometallic chemistry covering the year 2013

In: Coordination chemistry reviews. - Amsterdam [u.a.]: Elsevier Science, Bd. 261.2015, S. 124-205;

[Imp.fact.: 12,098]

Edelmann, Frank T.; Junk, Peter

Frontiers of organo-f-element chemistry

In: New journal of chemistry. - London: RSC, Bd. 39.2015, 10, S. 7539;

[Imp.fact.: 3,086]

Kühling, Marcel; Wickleder, Claudia; Ferguson, Michael J.; Hrib, Cristian G.; McDonald, Robert; Suta, Markus; Hilfert, Liane; Takats, Josef; Edelmann, Frank T.

Investigation of the bent sandwich-like divalent lanthanide hydro-tris(pyrazolyl)borates Ln(Tp iPr₂)₂ (Ln

In: New journal of chemistry. - London: RSC, 2015; <http://dx.doi.org/10.1039/C5NJ00568J>;

[Imp.fact.: 3,159]

Lammert, Martin; Wharmby, Michael T.; Smolders, Simon; Bueken, Bart; Lieb, Alexandra; Lomachenko, Kirill A.; De Vos, Dirk; Stock, Norbert

Cerium-based metal organic frameworks with UiO-66 architecture - synthesis, properties and redox catalytic activity

In: Chemical communications: ChemComm. - Cambridge: Soc, Bd. 51.2015, 63, S. 12578-12581;

[Imp.fact.: 6,834]

Mainka, Hendrik; Hilfert, Liane; Busse, Sabine; Edelmann, Frank; Haak, Edgar; Herrmann, Axel S.

Characterization of the major reactions during conversion of lignin to carbon fiber

In: Journal of materials research and technology: jmr official publication of the Brazilian Metallurgical, Materials and Mining Association. - Rio de Janeiro: Elsevier, 2015; <http://dx.doi.org/10.1016/j.jmrt.2015.04.005>;

Mainka, Hendrik; Täger, Olaf; Körner, Enrico; Hilfert, Liane; Busse, Sabine; Edelmann, Frank T.; Herrmann, Axel S.

Lignin - an alternative precursor for sustainable and cost-effective automotive carbon fiber

In: Journal of materials research and technology: jmr official publication of the Brazilian Metallurgical, Materials and Mining Association. - Rio de Janeiro: Elsevier, 2015; <http://dx.doi.org/10.1016/j.jmrt.2015.03.004>;

Rausch, Janek; Apostolidis, Christos; Walter, Olaf; Lorenz, Volker; Hrib, Cristian G.; Hilfert, Liane; Kühling, Marcel; Busse, Sabine; Edelmann, Frank T.

One ligand fits all: lanthanide and actinide sandwich complexes comprising the 1,4-bis(trimethylsilyl)cyclooctatetraenyl

(=COT) ligand

In: New journal of chemistry. - London: RSC, 2015; <http://dx.doi.org/10.1039/C5NJ00991J>;
[Imp.fact.: 3,159]

Reinsch, Helge; Stassen, Ivo; Bueken, Bart; Lieb, Alexandra; Ameloot, Rob; Vos, Dirk de

First examples of aliphatic zirconium MOFs and the influence of inorganic anions on their crystal structures
In: CrystEngComm. - London: RSC, Bd. 17.2015, 2, S. 331-337;
[Imp.fact.: 3,858]

Schmielau, Andrea; Hrib, Cristian G.; Lorenz, Volker; Hilfert, Liane; Zörner, Florian; Busse, Sabine; Edelmann, Frank T.

Surprising reactivity of the unsymmetrically substituted amidinate anion [MeC(NEt)(N tBu)]
In: Journal of organometallic chemistry. - New York, NY [u.a.]: Elsevier, Bd. 791.2015, S. 252-257;
[Imp.fact.: 2,173]

Sroor, Farid M.; Hrib, Cristian G.; Hilfert, Liane; Busse, Sabine; Edelmann, Frank T.

Synthesis and catalytic activity of homoleptic lanthanide-tris(cyclopropylethynyl)amidinates
In: New journal of chemistry. - London: RSC, 2015; <http://dx.doi.org/10.1039/C5NJ00555H>;
[Imp.fact.: 3,159]

Sroor, Farid M.; Hrib, Cristian G.; Hilfert, Liane; Edelmann, Frank T.

Synthesis and structural characterization of an unusual heterometallic europium(III) amidinate complex
In: Zeitschrift für anorganische und allgemeine Chemie: ZAAC. - Weinheim: Wiley-VCH, 2015; <http://dx.doi.org/10.1002/zaac.201500200>;
[Imp.fact.: 1,160]

Sroor, Farid M.; Hrib, Cristian G.; Hilfert, Liane; Jones, Peter G.; Edelmann, Frank T.

Lanthanide(III)-bis(cyclopropylethynylamidinates) - synthesis, structure, and catalytic activity
In: Journal of organometallic chemistry. - New York, NY [u.a.]: Elsevier, Bd. 785.2015, S. 1-10;
[Imp.fact.: 2,302]

Sroor, F.M.; Hrib, Cristian G.; Hilfert, Liane; Hartenstein, Larissa; Roesky, Peter W.; Edelmann, Frank T.

Synthesis and structural characterization of new bis(alkynylamidinato)lanthanide(III)-amides
In: Journal of organometallic chemistry. - New York, NY [u.a.]: Elsevier, Bd. 799/800.2015, S. 160-165;
[Imp.fact.: 2,173]

Thies, Nora; Haak, Edgar

Ruthenium-catalyzed synthesis of 2,3-cyclo[3]dendralenes and complex polycycles from propargyl alcohols
In: Angewandte Chemie. - Weinheim: Wiley-VCH Angewandte Chemie / International edition, 2015; <http://dx.doi.org/10.1002/anie.201412207>;
[Imp.fact.: 11,336]

Thies, Nora; Haak, Edgar

Rutheniumkatalysierte Synthese von 2,3-cyclo[3]dendralenen und komplexer Polycyclen aus Propargylalkoholen
In: Angewandte Chemie. - Weinheim: Wiley-VCH, 2015; <http://dx.doi.org/10.1002/ange.201412207>;

Wanninger, Simon; Lorenz, Volker; Subhan, Abdus; Edelmann, Frank T.

Metal complexes of curcumin - synthetic strategies, structures and medicinal applications
In: Chemical Society reviews: CSR. - London: Soc, 2015; <http://dx.doi.org/10.1039/C5CS00088B>;
[Imp.fact.: 30,452]

Wrobel, Rafal J.; Becker, Stefan; Weiss, Helmut

Influence of subsurface oxygen in the catalytic CO oxidation on Pd(111)
In: The journal of physical chemistry <Washington, DC> / C. - Washington, DC: Soc, Bd. 119.2015, 10, S. 5386-5394;
[Imp.fact.: 4,835]

Dissertationen

Sroor, Farid Mohamed Ahmed; Edelmann, Frank T. [Gutachter]; Haak, Edgar

Synthesis, structure and catalytic activity of new lanthanide alkynylamidates. - Magdeburg, Univ., Fak. für Verfahrens- und Systemtechnik, Diss., 2015; IV, 148 S.: graph. Darst.;