



OTTO VON GUERICKE
UNIVERSITÄT
MAGDEBURG

VST

FAKULTÄT FÜR VERFAHRENS-
UND SYSTEMTECHNIK

Forschungsbericht 2025

Institut für Verfahrenstechnik

INSTITUT FÜR VERFAHRENSTECHNIK

Universitätsplatz 2, 39106 Magdeburg
Tel. 49 (0)391 67 58783, Fax 49 (0)391 67 42762
berend.vanwachem@ovgu.de

1. LEITUNG

Prof. Dr.-Ing. habil. Christof Hamel
Prof. Dr.-Ing. Udo Reichl
Prof. Dr.-Ing. habil. Martin Sommerfeld
Prof. Dr.-Ing. habil. Kai Sundmacher
Prof. Dr.-Ing. habil. Evangelos Tsotsas
Prof. Dr. Ir. Berend van Wachem (geschäftsführender Leiter)

2. HOCHSCHULLEHRER/INNEN

Prof. Dr.-Ing. Udo Reichl
Prof. Dr.-Ing. habil. Martin Sommerfeld
Prof. Dr.-Ing. habil. Kai Sundmacher
Prof. Dr.-Ing. habil. Evangelos Tsotsas
Prof. Dr. Ir. Berend van Wachem
Prof. Dr.-Ing. habil. Christof Hamel
Jun.-Prof. Dr.-Ing. Fabian Denner
apl. Prof. Dr. rer. nat. habil. Heike Lorenz
Hon.-Prof. Dr.-Ing. Mirko Peglow
PD Dr. rer. nat. habil. Yvonne Genzel
PD Dr.-Ing. habil. Abdolreza Kharaghani

3. FORSCHUNGSPROFIL

1. Chemische Verfahrenstechnik (Prof. Dr.-Ing. habil. C. Hamel)
 - Untersuchung heterogen katalysierter Reaktionen
 - Kopplung von Reaktion und Stofftrennung
 - Membranreaktoren
 - Chromatographische Trennverfahren
 - Enantiomerentrennung
2. Bioprozesstechnik (Prof. Dr.-Ing. U. Reichl)
 - Fermentationstechnik
 - Säugerzellen, Hefen, Bakterien
 - Aufarbeitungstechnik
 - Modellierung, Simulation und Optimierung von Bioprozessen
 - Prozessüberwachung und -regelung

- Metaproteomics mikrobieller Gemeinschaften
3. Mechanische Verfahrenstechnik (Prof. Dr. Ir. B. van Wachem)
- Partikeltechnologie
 - Mehrphasenströmungen
 - Numerische Mechanik
4. Mehrphasenströmungen (Prof. Dr.-Ing. habil. M. Sommerfeld)
- Mehrphasenströmungen
 - Partikeltechnologie
 - Numerische Mechanik
5. Systemverfahrenstechnik (Prof. Dr.-Ing. habil. K. Sundmacher)
- Modellgestützte Analyse, Synthese und Optimierung komplexer verfahrenstechnischer Prozesssysteme
 - Neue Methoden für die Prozesssynthese
 - Nachhaltige chemische Produktionsverfahren
 - Prozesse der chemischen Energiewandlung
 - Elektrochemische Prozesse
 - Algen-Biotechnologie
 - Synthetische Biosysteme
6. Thermische Verfahrenstechnik (Prof. Dr.-Ing. habil. E. Tsotsas)
- Trocknungstechnik
 - Wirbelschichttechnik
 - Partikelformulierung (Agglomeration, Granulation, Coating)
 - Strukturelle Charakterisierung (u.a. X-ray micro-CT)
 - Diskrete Modellierung (u.a. Porennetzwerke)

4. KOOPERATIONEN

- AstraZeneca GmbH, Wedel
- 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 Biología Experimental e Tecnológica, Lisboa (Portugal)
- IPT Pergande, Weißbandt-Gölkau
- Max-Planck-Institut für Dynamik komplexer technischer Systeme Magdeburg
- Petrobras, Rio de Janeiro (Brasilien)
- Politecnico di Milano, Italien
- ProBioGen AG, Berlin
- Sartorius Stedim Biotech GmbH, Göttingen
- Shell, Den Haag (Niederlande)
- TU Berlin

- TU Dortmund
- TU Hamburg-Harburg
- Weierstraß-Institut, Berlin

5. FORSCHUNGSPROJEKTE

Projektleitung:	Prof. Dr.-Ing. Andreas Bück
Kooperationen:	Friedrich-Alexander Universität Erlangen-Nürnberg, Deutschland; Prof. Dr.-Ing. Achim Kienle, Otto-von-Guericke-Universität Magdeburg; KIT Karlsruhe; Universität Ulm; TU Berlin, Prof.in S. Knorn; Dr. Torsten Hoffmann; Max-Planck-Institut für Dynamik komplexer technischer Systeme Magdeburg; Prof. Heinrich, TU Hamburg-Harburg
Förderer:	Deutsche Forschungsgemeinschaft (DFG) - 01.07.2022 - 30.06.2029

Autonome Strukturbildungsprozesse in der Sprühwirbelschichtagglomeration (SPP 2364)

Dieses Verbundprojekt soll Modelle, Methoden und Implementierungen für die Realisierung von autonomen Strukturbildungsprozessen in Sprühwirbelschichten liefern. Dies wird durch eine Kombination neuartiger Multiraten-Soft-Sensoren zur Online-Beurteilung der Entwicklung der Agglomeratstruktur und fortschrittlicher Prozesssteuerungsschemata erreicht, die eine Anpassung der definierten Agglomeratstrukturen ermöglichen. Strukturelle und morphologische Modelle sind ein Schlüsselement auf dem Weg zu diesem Ziel, da sie die erforderlichen Verbindungen zwischen Prozessinputs, messbaren Größen und Agglomeratstruktur herstellen. In der ersten Projektphase (drei Jahre) liegt der Schwerpunkt auf der Strukturbildung von Homo-Agglomeraten, d.h. Agglomeraten, die aus einstofflichen Primärpartikeln bestehen. Die Hauptziele in der ersten Projektphase sind: 1) Entwicklung neuartiger Modelle zur Beschreibung der zeitlichen Entwicklung von Struktur und Morphologie von Homo-Agglomeraten in der kontinuierlich betriebenen Wirbelschicht-Sprühagglomeration (mit und ohne Rückführung); 2) Untersuchung der Dynamik der Strukturbildung, experimentell und in Prozesssimulationen; 3) Aufklärung der Prozess-Struktur- und Material-Struktur-Beziehungen durch umfassende Charakterisierung der Agglomeratstruktur; 4) Entwicklung und Implementierung eines neuartigen modellbasierten Soft-Sensors zur Bewertung der Strukturentwicklung bei der EBS-Agglomeration; 5) Entwicklung echtzeitfähiger und regelungsorientierter Prozessmodelle unter Anwendung von Hybrid- und Surrogatmodellen; 6) Entwicklung, Implementierung und Evaluierung verschiedener Prozesssteuerungsschemata zur autonomen Strukturbildung von Homo-Agglomeraten in EBS-Agglomerationsprozessen. Die Zusammenarbeit der Partner des Schwerpunktprogramms wird insbesondere in den Bereichen Prozessmodellierung, Online-Messmethoden, Modellordnungsreduktion, Optimierung und Prozesssteuerung angestrebt. In der zweiten Projektphase sollen Modelle, Methoden und ...

[Mehr hier](#)

Projektleitung:	Prof. Dr.-Ing. Andreas Bück
Kooperationen:	Friedrich-Alexander Universität Erlangen-Nürnberg, Deutschland; Dr. Torsten Hoffmann
Förderer:	Deutsche Forschungsgemeinschaft (DFG) - 01.07.2021 - 30.06.2028

Formulierung von Hetero-Aggregaten in kontinuierlich betriebenen Gegenstrahl-Wirbelschichten (SPP 2289 "Hetero-Aggregate")

Ziel des Projekts ist die Entwicklung eines kontinuierlichen Verfahrens zur Formulierung ternärer Heteroaggregate aus trockenen Primärpartikeln. Die Funktionalität der Heteroaggregate beruht auf der Zusammensetzung und der Verteilung der Heterokontakte zwischen den Bestandteilen, die durch Mischen auf der Skala der Primärpartikel ($\sim 25 \text{ nm}$) erreicht werden. Die Prozessmodellierung ist ein integraler Bestandteil des Projekts: Erstens, um die Prozessfunktion des Formulierungsprozesses (im Rumpfschen Sinne) zu ermitteln. Zweitens, um Werkzeuge für die modellbasierte Sensorfusion, Prozessoptimierung und -steuerung zu entwickeln. Eine umfassende Charakterisierung der Eigenschaften von Heteroaggregaten verknüpft Experimente und Simulationsstudien und ermöglicht eine iterative Validierung und Verbesserung von Prozessmodellen und Versuchsplanung sowie die Aufdeckung der Materialfunktionen der Heteroaggregatformulierung in Gegenstrahl-Wirbelschichten. Nach der Etablierung der Prozessstrategie, der Charakterisierungsmethoden, der grundlegenden Modelle für

die Vermischung von binären nanoskaligen Primärpartikeln zu Aggregaten und der Verbindung zwischen Prozessparametern und Strukturparametern der Aggregate wird in der zweiten Förderperiode der Fokus auf die Funktionalität der Heteroaggregate fortgesetzt und erweitert. Die geplante Hauptfunktionalität der Heteroaggregate ist die photokatalytische Aktivität durch die Gestaltung von Heteroaggregatstrukturen aus TiO₂- und ZrO₂-Primärpartikeln über die Zusammensetzung und Bildung von Heteroübergängen. Darüber hinaus wird eine dritte Komponente, Bismutvanadat (BiVO₄), hinzugefügt, um ternäre Heteroaggregate zu bilden, die den zugänglichen Bereich des elektromagnetischen Spektrums für das "Ernten" von Elektronen, die in der Photokatalyse benötigt werden, erweitern und die Effizienz der Trennung der erzeugten Elektronen-Loch-Paare erhöhen, was die Entwicklung eines verbesserten Photokatalysators ermöglicht. Die Ziele des Projekts ...

[Mehr hier](#)

Projektleitung: Prof. Dr.-Ing. Andreas Bück
Förderer: Haushalt - 01.06.2025 - 31.03.2028

Mehrphasensimulation für das Produktdesign in thermischen Partikelprozessen

Dieses Projekt befasst sich mit der Untersuchung des Produktdesign in thermischen Partikelprozessen, d.h., Prozessen zur Herstellung partikulärer Produkte durch Wärme- und Stoffübergang auf mehreren Zeit- und Längenskalen. Dazu werden Mehrphasensimulationen eingesetzt um insbesondere die Partikelinteraktion mit fluiden Phasen (Gase, Flüssigkeiten) realistisch abzubilden. Gekoppelt an experimentelle Daten gelingt so ein tiefgreifendes Verständnis der Partikelbildung und Möglichkeiten zur Sicherstellung gewünschter Produkteigenschaften werden eröffnet.

Projektleitung: Prof. Dr.-Ing. Andreas Bück
Projektbearbeitung: Maximilian Bork
Förderer: Haushalt - 01.03.2025 - 29.02.2028

Thermische Aufbereitung von Kunststoffmischungen der Abfallwirtschaft

Dieses Projekt befasst sich mit Prozessketten zur selektiven Rückgewinnung von Kunststofffraktionen aus Materialströmen der Abfallwirtschaft (u.a. "Gelber Sack"). Von besonderem Interesse sind Flüssigphasen-Prozesse unter Einsatz moderater Lösungsmittel.

Projektleitung: Prof. Dr.-Ing. Andreas Bück, Prof. Dr.-Ing. habil. Evangelos Tsotsas, Prof. Dr. Achim Kienle
Förderer: EU - ESF Sachsen-Anhalt - 01.06.2025 - 31.12.2027

Kontinuierliche Wirbelschichtsprühagglomeration ohne Binder bzw. ohne Spray

Zentrale Zielsetzung des Projektes ist die Entwicklung und Verifikationen von Methoden und Verfahren zur Herstellung maßgeschneiderter Partikel durch modellgestützte Prozessführung für die kontinuierliche Wirbelschichtsprühagglomeration ohne Binder sowie zur Vermeidung thermisch bedingter, unerwünschter Agglomeration in Wirbelschichten ohne Spray.

Projektleitung: Prof. Dr.-Ing. Andreas Bück
Kooperationen: Friedrich-Alexander Universität Erlangen-Nürnberg, Deutschland; FAU Erlangen-Nürnberg, Prof. K. Mandel; FAU Erlangen-Nürnberg, Prof. M. Thommes
Förderer: Deutsche Forschungsgemeinschaft (DFG) - 01.01.2020 - 31.12.2027

Herstellung von funktionalen Partikeln und porösen Strukturen durch Sprühdrucken (SFB 1411)

Ziel ist der Entwurf optimierter poröser stationärer Phasensäulen für die Nanopartikelchromatographie, wobei die einzelnen Bausteine kontrolliert durch Sprühdruck zusammengesetzt werden. Nachdem wir eine skalierbare Technik für die schichtweise Ablagerung einzelner Tröpfchen mit dem Material der stationären Phase entwickelt haben, streben wir den Übergang zu Packungen im Säulenmaßstab mit vorgegebener, komplexer Struktur an. Das Projekt wird die Strukturbildung über mehrere Schichten hinweg vorantreiben, wobei Defekte und Ungleichmäßigkeiten, die bei herkömmlichen Packungsmethoden vorherrschen, beseitigt und Oberflächenfunktionalitäten einbezogen werden. Auf der Grundlage experimentell ermittelter Diffusionskoeffizienten werden optimierte poröse Netzwerke durch Simulationen unter unsicheren Bedingungen vorhergesagt und experimentell realisiert.

Dieser Text wurde mit DeepL übersetzt

Projektleitung: Prof. Dr.-Ing. Andreas Bück
Projektbearbeitung: Dr. Raul Favaro Nascimento
Förderer: Haushalt - 01.06.2025 - 31.05.2027

Formulation of food-relevant systems by fluidised bed spray agglomeration

This project considers novel strategies to formulate structured food powders and emulsions using fluidised bed technologies. Main focus is on flowability, solubility (rehydration) and intra-agglomerate composition.

Projektleitung: Prof. Dr.-Ing. Andreas Bück
Projektbearbeitung: Rajashree Swain
Kooperationen: Friedrich-Alexander-Universität Erlangen-Nürnberg, PD Dr. rer. nat. Jochen Schmidt
Förderer: Haushalt - 01.01.2025 - 31.12.2026

Thermo-mechanische Aufbereitung von Leguminosen

Ziel dieses Projektes ist die Untersuchung von Prozessketten zur Freilegung von Stärke- und Proteinfraktionen aus Leguminosen (z.B. Erbsen, Soja). Besonderes Augenmerk liegt auf der Kapazität und Effizienz der einzelnen Trennschritte (Zerkleinerung, Sichtung).

Projektleitung: Prof. Dr. habil. Christof Hamel
Projektbearbeitung: M.Sc. Ingrid Joselin Gonzalez Rios, Christof Hamel
Förderer: EU - EFRE Sachsen-Anhalt - 08.08.2025 - 30.06.2028

Projekt 1 im Rahmen Center for Dynamic Systems (CDS) ZS/2023/12/182075: Transforming Waste into High-Value Products: Harnessing Lignin, Lignocellulose, and Black Liquor for Sustainable Chemicals and Polymer Innovations - Catalytic chemicalvalorization of lignin, lignin modelsyszems and black liquor (Projektbereich 1, Teilprojekt 1.4)

Schwarzlauge, ein Abfallprodukt der Zellstoff- und Papierindustrie (ca. 50 Millionen Tonnen pro Jahr), stellt eine erhebliche Herausforderung für die Umwelt dar. Derzeit werden Lignin-Nebenprodukte und Schwarzlauge überwiegend durch energieintensive Verdampfung und anschließende Verbrennung verwertet. Lignin ist jedoch die reichhaltigste natürliche Quelle für aromatische Verbindungen und bietet daher eine nachhaltige

Möglichkeit zur Herstellung aromatischer Chemikalien wie Vanillin, p-Hydroxybenzoësäure und Syringasäure. Dies eröffnet auch Wege zur Herstellung nachhaltiger Kunststoffvorläufer und -produkte unter Verwendung funktioneller Ligninpolymere und -oligomere wie Caprolactam. Die Integration der Ligninverwertung mit erneuerbaren Energiequellen wie Solar- und Windenergie bietet eine vielversprechende Strategie zur Erreichung der CO₂-Neutralität. Ziel dieses Projekts ist die Entwicklung eines neuen elektrochemischen Depolymerisationsverfahrens zur Behandlung von Lignin bei Raumtemperatur und unter Umgebungsbedingungen. Es werden wertvolle Produkte wie Syringyl und Guaiacyl sowie Wasserstoff erwartet. Ziele: Entwicklung, Validierung und Anwendung geeigneter Analysemethoden (HPLC, GPC, GC, GC-MS, FTIR, NMR) für die beteiligten chemischen Spezies Gesamt- und Teilreaktionsnetzwerkanalyse für Modell-Ligninsysteme/BL, Zerlegung in Haupt- und Nebenprodukte Literaturrecherche: Reaktionsnetzwerke, Katalysatoren, Lösungsmittelsysteme, Thermodynamik, Reaktionskinetik, Reaktoren und Prozessbedingungen Katalysator- und Lösungsmittelscreening für Gesamt-/Teilreaktionsnetzwerke, Bewertung geeigneter Betriebsparameter für Ein- und Mehrtopfsynthese Experimentelle Untersuchung der Reaktionskinetik mit Reaktionsnetzwerken zunehmender Komplexität Herstellung grüner Chemikalien und Vorläufer für die Polymerisation (siehe Abbildung unten und Verbindung zu Prof. Thiele und Dr. Vidakovic-Koch) Kinetische Modellierung mit Modell- und Realfeeds, Modellbewertung und -vergleich ...

[Mehr hier](#)

Projektleitung: Prof. Dr. habil. Christof Hamel
Projektbearbeitung: M.Sc. Shakila Perera, Christof Hamel
Förderer: Haushalt - 03.07.2025 - 14.04.2028

Conversion of (hemi-)cellulose to green platform chemicals (5-HMF) - Network analysis, kinetics and reactor design

Ziele:

- Entwicklung und Validierung geeigneter Analysemethoden (HPLC, GC, GC-MS, FTIR) für die beteiligten chemischen Spezies
 - Gesamt- und Teilreaktionsnetzwerkanalyse/-zerlegung für Haupt- und Nebenprodukte
 - Literaturrecherche: Reaktionsnetzwerke, Katalysatoren, Lösungsmittelsysteme, Thermodynamik, Reaktionskinetik, Reaktoren und Prozessbedingungen
 - Katalysator- und Lösungsmittelscreening für Gesamt-/Teilreaktionsnetzwerke, Bewertung geeigneter Betriebsparameter für Ein- und Mehrtopfsynthese
 - Experimentelle Untersuchung der Reaktionskinetik mit Reaktionsnetzwerken zunehmender Komplexität
 - (Mechanistische) kinetische Modellierung mit Modell- und Realfeeds, Modellbewertung und -vergleich
 - Modellbasierte Reaktor-/Prozessauslegung (Ein-/Mehrtopfsynthese, Trenneinheiten, Dosierungsstrategien, Lösungsmittelwechsel) in Matlab und Aspen
 - Berücksichtigung: Katalysator-, Reaktor- und Prozessebene
-

Projektleitung: Prof. Dr. habil. Christof Hamel
Projektbearbeitung: Dr. Yanjun Wang, M.Sc. Gonzalez Ríos Ingrid Joselin, Christof Hamel
Förderer: EU - EFRE Sachsen-Anhalt - 26.09.2025 - 31.12.2027

Projekt 2 im Rahmen des Center for Dynamic Systems (CDS) ZS/2023/12/182075: Transforming Waste into High-Value Products: Harnessing Lignin, Lignocellulose, and Black Liquor for Sustainable Chemicals and Polymer Innovations - Conversion of (ligno/hemi)cellulose to building blocks and platform chemicals (Projektbereich 1, Teilprojekt 1.4)

Lignin, Hemicellulose und Lignocellulose sowie Schwarzlauge sind Abfallprodukte der Zellstoff- und Papierindustrie (ca. 50 Millionen Tonnen pro Jahr) und stellen eine erhebliche Herausforderung für die Umwelt dar. Derzeit werden Lignin-Nebenprodukte und Schwarzlauge überwiegend durch energieintensive Verdampfung und anschließende Verbrennung verwertet. Lignin ist jedoch die reichhaltigste natürliche Quelle für aromatische Verbindungen und bietet daher eine nachhaltige Möglichkeit zur Herstellung aromatischer Chemikalien wie

Vanillin, p-Hydroxybenzoësäure und Syringasäure. Dies eröffnet auch Wege zur Herstellung nachhaltiger Kunststoffvorläufer und -produkte unter Verwendung funktioneller Ligninpolymere und -oligomere wie Caprolactam. Die Integration der Ligninverwertung mit erneuerbaren Energiequellen wie Solar- und Windenergie bietet eine vielversprechende Strategie zur Erreichung der CO₂-Neutralität. Ziel dieses Projekts ist die Entwicklung eines neuen elektrochemischen Depolymerisationsverfahrens zur Behandlung von Lignin bei Raumtemperatur und unter Umgebungsbedingungen. Es werden wertvolle Produkte wie Syringyl und Guaiacyl sowie Wasserstoff erwartet.

Ziele:

- Durchführung von eigener experimentelle Arbeiten in homo- und heterogen katalysierten Systemen auf Basis biogener Reststoffe mit hohem Schwierigkeitsgrad auf der Grundlage eigener konzeptioneller Überlegungen
 - Netzwerkanalyse und Entwicklung (mechanistischer) kinetischer Modelle, Modellreduktion und Parametrisierung für die modellbasierte Reaktor- und Prozessentwicklung
 - Betrieb modularer Versuchsanlagen und insbesondere Reaktionskalorimetrie im Nieder- und Hochdruckbereich zur Untersuchung von Reaktionskinetik mit operande-Spektroskopie und HPLC-/GC-MS-Analytik, Thermochemische Untersuchungen
-

Projektleitung: Prof. Dr. habil. Christof Hamel

Projektbearbeitung: Dr. Divya Bhutani, M.Sc. Ingrid Joselin Gonzalez Rios, Christof Hamel

Förderer: EU - EFRE Sachsen-Anhalt - 02.09.2025 - 31.12.2027

Projekt 3 im Rahmen Center for Dynamic Systems (CDS) ZS/2023/12/182075: Transforming Waste into High-Value Products: Harnessing Lignin, Lignocellulose, and Black Liquor for Sustainable Chemicals and Polymer Innovations - Electrochemical transformation of black liquor to green hydrogen and lignin-derived functional components (Projektbereich 1, Teilprojekt 1.4)

Elektrochemische Oxidation von Schwarzlauge

Schwarzlauge, ein Abfallprodukt der Zellstoff- und Papierindustrie (ca. 50 Millionen Tonnen pro Jahr), stellt eine erhebliche Herausforderung für die Umwelt dar. Derzeit werden Lignin-Nebenprodukte und Schwarzlauge überwiegend durch energieintensive Verdampfung und anschließende Verbrennung verwertet. Lignin ist jedoch die reichhaltigste natürliche Quelle für aromatische Verbindungen und bietet daher eine nachhaltige Möglichkeit zur Herstellung aromatischer Chemikalien wie Vanillin, p-Hydroxybenzoësäure und Syringasäure. Dies eröffnet auch Wege zur Herstellung nachhaltiger Kunststoffvorläufer und -produkte unter Verwendung funktioneller Ligninpolymere und -oligomere wie Caprolactam. Die Integration der Ligninverwertung mit erneuerbaren Energiequellen wie Solar- und Windenergie bietet eine vielversprechende Strategie zur Erreichung der CO₂-Neutralität. Ziel dieses Projekts ist die Entwicklung eines neuen elektrochemischen Depolymerisationsverfahrens zur Behandlung von Lignin bei Raumtemperatur und unter Umgebungsbedingungen. Es werden wertvolle Produkte wie Syringyl und Guaiacyl sowie Wasserstoff erwartet.

Projektleitung: Prof. Dr. habil. Christof Hamel

Projektbearbeitung: M.Sc. Thomas Friedericci, M.Sc. Lea Hilfert, Christof Hamel

Förderer: EU - EFRE Sachsen-Anhalt - 01.01.2024 - 31.12.2027

Innovative Membranreaktoren für die nachhaltige, regionale Produktion von grünen Basischemikalien aus Methanol

Hintergrund Die Synthese von Basischemikalien, wie Dimethylether (DME), Dimethoxymethan (DMM) und Methylformiat (MF) sind großindustrielle Prozesse, die hohe Treibhausgasemissionen durch die Verwendung fossiler Rohstoffe und die benötigten hohen Prozesswärmen verursachen. Für die nachhaltige Herstellung der Chemikalien kann alternativ klimaneutrales Methanol aus grünem Wasserstoff, der durch regenerative Energie gewonnen wird, eingesetzt werden. Der Transformationsprozess der chemischen Industrie bietet den KMUs in Sachsen-Anhalt die Chance, durch regionale Produktion den zukünftigen Bedarf an Basischemikalien, sowie deren Lieferketten zu sichern. Um den Technologietransfer zu gewährleisten, sind vor allem Forschung und Entwicklung im öffentlichen Sektor essentiell. Projektziele Im Projekt soll eine Wertschöpfung des grünen Wasserstoffs und seiner Folgeprodukte realisiert werden, indem grünes Methanol zu DME, DMM und MF umgewandelt wird. Dazu

wird erstmals eine synergetische Integration eines bereits entwickelten -Katalysators (4,8%) mit einer inerten Membran in Membranreaktoren mit ausschließlich partikulären Katalysatorsschüttungen realisiert. Dadurch wird eine gezielte Reaktionslenkung und damit Selektivitätskontrolle durch eine getrennte, verteilte Dosierung von Methanol und Sauerstoff gegenüber dem konventionellen Festbettreaktor erreicht. Das Ziel des Projektes ist, Synergien zwischen kommerziellen Membranen und dem Katalysator aufzuzeigen. Wissenschaftliche Grundlage dafür sind umfassende kinetische Studien und die Entwicklung mechanistischer kinetischer Modelle, die der Evaluation des Reaktorsystems dienen. Abschließend sollen die modellbasierten Ergebnisse experimentell validiert werden. Aus grünem Methanol werden somit drei Wertprodukte gewonnen, die Anwendung in der chemischen Industrie finden. Das Produktspektrum kann durch Temperatursteuerung und intelligente Reaktionsführung in Membranreaktoren gezielt gelenkt werden. Arbeitsplan Zur gezielten Steuerung ...

[Mehr hier](#)

Projektleitung: Prof. Dr. habil. Christof Hamel

Projektbearbeitung: M.Sc. Jan Paul Walter

Kooperationen: Fraunhofer-Institut für Keramische Technologien und Systeme Institutsteil Hermsdorf IKTS-HD; Fraunhofer-Gesellschaft zur Förderung der angewandten Forschung e.V.; Rauschert Kloster Veilsdorf GmbH; AECI Schirm Schönebeck; OHplus GmbH Staßfurt; Chemiewerke Bad Köstritz GmbH

Förderer: Bundesministerium für Bildung und Forschung - 01.11.2024 - 31.10.2027

Innovative Katalytische Membran-Reaktoren für die nachhaltige, effiziente Produktion von Plattformchemikalien - Materialinnovationen von Katalysator und Membran (I-KaMeRa)

Um nachhaltig den Bedarf von Industrie und Konsumenten in der Gesellschaft an bereits etablierten Produkten zu decken, ist eine neue Rohstoffbasis und Weiterentwicklung der konventionellen Herstellungsverfahren notwendig. Damit zukünftig Produkte aus nachwachsenden Rohstoffen und mit Hilfe von erneuerbaren Energien hergestellt werden können, ist die Entwicklung neuer Materialien in Form hocheffizienter katalytischer und membranbasierter Technologien unerlässlich. Beide Technologien finden synergetisch, gekoppelt in katalytischen Membranreaktoren Anwendung. Für die Entwicklung von innovativen, ressourcenschonenden Membranreaktoren ist insbesondere die Kopplung zwischen transmembranem Stofftransport und der Reaktionskinetik essenziell. Unter optimalen Bedingungen werden genauso viele Moleküle durch die Membran in die Reaktionszone transportiert, wie durch die Reaktion umgesetzt werden. Demzufolge ist die Kombination aus Katalysator und Membranmaterial sowie deren Abstimmung von entscheidender Bedeutung für die Entwicklung von Membranreaktoren. Daher werden in diesem Projekt alle drei Teilespekte Katalysatorentwicklung, Membranentwicklung und deren Kopplung in Membranreaktoren sowohl separat als auch in Kombination untersucht, bewertet und up-skaliert. Die Membranentwicklung wird durch die Rauschert Kloster Veilsdorf GmbH gemeinsam mit dem Fraunhofer-Institut für Keramische Technologien und Systeme durchgeführt, die Katalysatorentwicklung sowie die Kopplung der entwickelten Membranen und Katalysatoren in Membranreaktoren durch die Technische Chemie und Chemische Verfahrenstechnik der Otto-von-Guericke-Universität Magdeburg. Begleitet wird das Projekt durch die assoziierten Partner AECI Schirm GmbH, Chemiewerke Bad Köstritz GmbH und die OHplus GmbH. In den einzelnen Entwicklungsstufen kommen sowohl experimentelle als auch simulationsbasierte Forschungsansätze zum Tragen, um die im Labormaßstab erzielten Ergebnisse in den Demonstratormaßstab zu übertragen und zu testen. ...

[Mehr hier](#)

Projektleitung: Prof. Dr. habil. Christof Hamel
Projektbearbeitung: M.Sc. Adrian Baum, Dr.-Ing. Martin Gerlach, Dr.-Ing. Klaus-Peter Kalk, Prof. Dr.-Ing. habil. Christof Hamel
Kooperationen: Leuna-Harza GmbH Leuna
Förderer: Industrie - 01.10.2023 - 30.09.2027

Experimentelle und modellbasierte Studien zur Hydrochlorierung von Glycerin zu Dichlorhydrin

Im Projekt soll die Synthese der Hydrochlorierung von Glycerin zu Dichlorhydrin experimentell und modellbasiert untersucht werden, um neue, effizientere Reaktoren zu entwickeln und den Gesamtprozess optimieren zu können. Hierfür soll zunächst eine mechanistische kinetische Modellbildung basierend auf Katalysezyklen inkl. Modellreduktion, u.a. unter Nutzung operando-spektroskopischer Methoden (GC-MS, NMR, FTIR-/Raman-Spektroskopie), durchgeführt werden. Der Einfluss des Stofftransports im voligenden Mehrphasensystem bzw. dessen Berücksichtigung in der Modellierung unter Berücksichtigung realer Feeds inkl. Verunreinigungen stehen im Fokus. Neben der Kinetik erfolgt die Ermittlung thermodynamischer Daten wie Gaslöslichkeiten, Reaktionsgleichgewichte und -konstanten, Reaktionsenthalpien und Stofftransportkoeffizienten unter Nutzung von Gruppenbeitragsmethoden und Messungen im Reaktionskalorimeter RC1e.

Die kinetischen und thermodynamischen Modelle, inkl. Parameter, sollen anschließend der simulationsbasierten Auslegung neuer Reaktorkonzepte, inkl. Stofftransportmodell und unter expliziter Berücksichtigung der Wärme-/Impulsbilanzen, den Simulationsumgebungen mittels Matlab® und Comsol® zugeführt werden.

Eine experimentelle Validierung des präferierten Reaktorkonzepts unter Verwendung von Dosierstrategien sowie Berücksichtigung von Umlauf- und Rückführströmen ist vorzunehmen. Das Projekt wird durch eine Gesamtprozessmodellierung, inkl. Rohstoffvorbereitung, Feedkonditionierung, Reaktor, nachgeschaltete Trennoperationen und Rückführströme, mittels Flow-Sheet-Simulation in AspenPlus abgeschlossen.

Projektleitung: Prof. Dr. habil. Christof Hamel
Projektbearbeitung: M.Sc. Sobolev Alexandr, Dr. Martin Gerlach, PD. Dr. Andreas Vorholt, M.Sc. Rucha Shirish Medhekar, Christof Hamel
Kooperationen: Max-Planck-Institut für Chemische Energiekonversion (CEC) Mülheim
Förderer: Deutsche Forschungsgemeinschaft (DFG) - 01.06.2024 - 31.05.2027

Überwachung und Steuerung von Reaktionen in der homogenen Katalyse auf der Grundlage von Daten eines molekularen Katalysators

Die Katalyse ist eine der wichtigsten Technologien unserer Zeit, die die Nachhaltigkeit in der chemischen Industrie verbessern wird. Die Katalysatorforschung konzentriert sich eher auf Aktivität und Selektivität als auf die Stabilität des Katalysators. Letztere ist für die industrielle Umsetzung von entscheidender Bedeutung, bestimmt die Anschlussfähigkeit von Forschungsprojekten und ist für die Umstellung auf erneuerbare Energieträger unerlässlich. Insbesondere bei der homogenen Katalyse ist der Anteil der Stabilitätsstudien im Vergleich zur heterogenen Katalyse gering. Das Hauptziel dieses Projekts ist es, ein tieferes Verständnis der Deaktivierungsmechanismen in der homogenen Katalyse zu erlangen und herauszufinden, wie die damit einhergehenden negativen Auswirkungen auf katalysierte Reaktionen bei kontinuierlichen Reaktionsprozessen vermieden werden können. Die vorgestellten 4 Deaktivierungsmodi werden im Rahmen dieses Projekts im Detail behandelt: Modus 1: Langfristige Deaktivierung aufgrund inhärenter dynamischer Katalysatorkomplexreaktionen (Alterung) Modus 2: Katalysatorverluste aufgrund von Auslaugung bei kontinuierlichen Prozessen einschließlich Katalysatorabtrennung/-rückführung Modus 3: Deaktivierung aufgrund von Beschränkungen des Gas-/Flüssigkeitstransports Modus 4: Verunreinigungsinduzierte Deaktivierung (inhärenter dynamischer Reaktorbetrieb) Methodisch wird dies durch den Einsatz multispektroskopischer Messungen in Kombination mit fortschrittlicher chemometrischer Analyse während kinetischer und kontinuierlicher Experimente einschließlich Katalysatorabtrennung und -rückführung auf Prozessebene erreicht. Die daraus resultierenden zeitaufgelösten molekularen Daten von Katalysatorspezies und Reaktanten werden zur Entwicklung neuer mechanistischer kinetischer Modelle der Deaktivierung verwendet. Diese Modelle dienen als Ausgangspunkt für eine modellbasierte Prozesssteuerung und -optimierung durch Katalysatordosierungsstrategien als Gegenmaßnahme für ...

[Mehr hier](#)

Projektleitung: Prof. Dr. habil. Christof Hamel
Projektbearbeitung: Prof. Dr.-Ing. habil. Christof Hamel, M.Sc. Igor Gamm
Förderer: Land (Sachsen-Anhalt) - 01.10.2023 - 31.12.2026

Kinetic description of the enzymatic depolymerization of single-grade plastic waste and product purificaion

Die Depolymerisation von Polymeren durch (bio)chemische Methoden zielt grundsätzlich auf die angestrebten Rückgewinnungsprozesse, die ihre Effizienz durch hohe Selektivität auch unter explizit milden Reaktionsbedingungen wiederholt unter Beweis gestellt haben. So wird die Depolymerisation von sortenreinen Kunststoffabfällen mit funktionellem Rückgrat, konkret PET und PEF, für die anschließende Re-Synthese gemeinsam von den PIs Hamel, von Langermann und Thiele durch die Kombination von enzymatischen und chemischen Abbaurouten mit Fokus auf die integrierte Abtrennung und (Rück-)Gewinnung der Abbauprodukte untersucht. Neuartige chemo-enzymatische Depolymerisationswege von PET und PEF durch maßgeschneiderte Enzyme (PETase, Cutinase, etc.) und die Kombination von Kinetik und Trennverfahren (Membranen, Adsorption) sollen untersucht werden. Für ein vorausgewähltes Enzym/Lösungsmittel-System von Jan von Langermann werden kinetische Experimente mit BHET und PET (Trimer) als Feeds durchgeführt, die ein profundes Wissen über das Reaktionsnetzwerk liefern, das für die kinetische Analyse und Modellierung verwendet werden soll. Die Operando-Spektroskopie wird für die Mischungsanalyse eingesetzt. Die für PET abgeleiteten Methoden und kinetischen Modelle werden dann auf PEV angewendet, um ihre Anwendbarkeit zu beweisen. Die Daten für PEF werden von Julian Thiele zur Verfügung gestellt. Die für freie Enzyme abgeleiteten kinetischen Modelle ermöglichen es, neue Reaktorkonzepte mit immobilisierten Enzymen zu untersuchen und vorzuschlagen, um die Nachhaltigkeit in der Gruppe von Jan von Langermann zu verbessern. Neben der Depolymerisationskinetik sollen geeignete Trennverfahren und deren Kombination bewertet werden, um die entstehenden Abbauprodukte (PET, PEV, BHET, MHET, Terephthalsäure usw.) abzutrennen. Daher werden Durchführbarkeit, Anwendung und Grenzen, z.B. von Membran-, Adsorptions- und SMB-Trennverfahren, untersucht. Die PIs und die durch das Projekt finanzierten ...

[Mehr hier](#)

Projektleitung: Prof. Dr. habil. Christof Hamel
Projektbearbeitung: M.Sc. Pascal Kumar, Christof Hamel
Kooperationen: Dr. Steffen Mozer, requisimus AG Esslingen; Dr. Manfred Anders, ZFB Projektmanagement GmbH, Leipzig
Förderer: BMWK / ZIM Zentrales Innovationsprogramm Mittelstand - 01.05.2024 - 30.11.2026

Herstellung von grünem Methanol aus Biogas durch die Direktsynthese mittels Mikrowellenplasma

Die Elektrifizierung ist eine der Säulen der aktuellen Defossilisierungsstrategien insbesondere für den Individualverkehr, was jedoch den Auf- und Ausbau der bestehenden Netzinfrastruktur für Strom und Wasserstoff erfordert. Luftfahrt, Schifffahrt und der Güterverkehr lassen sich nicht ohne weiteres Elektrifizieren, sodass die Branchen auf alternative und regenerative Kraftstoffe setzen. Das geplante Projekt zielt daher auf die Herstellung von grünem Methanol als klimaneutraler Roh- und Kraftstoff durch ein neuartiges Herstellungsverfahren für Methanol mittels eines Mikrowellenplasmas und der Nutzung von Biogas. Das so gewonnenen Methanol kann direkt als Kraftstoff, in Brennstoffzellen oder zu Kerosin weiterverarbeitet, eingesetzt werden. Durch die geplante Direktsynthese mittels Mikrowellenplasma soll der energieintensive Zwischenschritt der Synthesegasgewinnung aus fossilem Erdgas und den damit verbundenen CO₂-Emmissionen eliminiert und Energie-/Betriebskosten signifikant reduziert werden. Ziel des Projekts ist deshalb die Entwicklung und Testung eines geeigneten Mikrowellenplasmareaktors und Demonstration der Direktsynthese von Methanol im Labormaßstab.

Projektleitung: Prof. Dr. habil. Christof Hamel
Projektbearbeitung: M.Sc. Jan Paul Walter, M.Sc. Lucas Schmidt, B.Sc. Scholz Laura, Christof Hamel
Kooperationen: Mercer Stendal GmbH
Förderer: Industrie - 01.10.2024 - 30.09.2026

Selektive Abtrennung von grünem CO₂ aus Abgasströmen der Papierindustrie zur Wertschöpfung

Das Forschungsprojekt widmet sich der Untersuchung von CO-Absorptions- und -Desorptionsprozessen unter Einsatz wässriger Amin-Lösungen. Ziel ist es, die Effizienz, Stabilität und Langzeitbeständigkeit dieser Lösungen im Rahmen der CO-Abscheidung und -Nutzung (Carbon Capture and Utilization, CCU) zu bewerten. Dies ist besonders relevant im Kontext der Nutzung von CO-reichen Abgasen aus Biomasseverbrennungsanlagen. Neben CO enthalten diese Abgase weitere Komponenten wie Sauerstoff (O₂), Stickstoffdioxid (NO₂), Schwefelwasserstoff (H₂S), Schwefeldioxid (SO₂), Stickstoff (N₂) sowie feine Stäube. Diese Begleitstoffe können die chemische Stabilität und Absorptionskapazität der verwendeten Amine erheblich beeinflussen. Die Untersuchungen fokussieren sich auf drei spezifische Amine/Mischungen: N-Methyldiethanolamin (MDEA), Ethanolamin (MEA) und Diethylentriamin (DETA). Die Konzentration der Amine wird dabei gezielt variiert, um den Einfluss unterschiedlicher Bedingungen auf die Absorption und Desorption von CO zu analysieren. Während der CO-Beladung reagieren die Amine mit dem CO unter Bildung von Carbamaten. Die Experimente umfassen die systematische Variation mehrerer Parameter, um deren Einfluss auf die Effizienz der CO-Abscheidung zu untersuchen. Hierzu zählen insbesondere die Aminkonzentration, die Temperatur und die Verweilzeit der Lösung im Prozess. Durch die gezielte Veränderung dieser Parameter können optimale Bedingungen für die Absorption und Desorption ermittelt werden. Zudem wird in einem zweiten Schritt untersucht, wie Störkomponenten aus Biomasse-Abgasen die CO₂-Absorptionskapazität und die chemische Stabilität der Amine beeinflussen. Die Experimente erfolgen zunächst unter idealisierten Bedingungen mit einem Modellgasgemisch aus 20 % CO und 80 % Stickstoff (N₂). Dies ermöglicht die detaillierte Analyse der Grundreaktionen und die Ermittlung optimaler Betriebsparameter ohne Störeinflüsse. Anschließend werden Langzeitexperimente mit Realgas ...

[Mehr hier](#)

Projektleitung: Prof. Dr. habil. Christof Hamel
Projektbearbeitung: Adrian Baum
Förderer: Industrie - 01.10.2025 - 31.03.2026

Photochemische Behandlung von Epoxidharzen und Reaktivverdünnern – Analyse, Kinetik sowie experimentelles und modellbasierte Verfahrensentwicklung

Biobasierte Epoxidharze sind wirtschaftlich von großer Bedeutung. Sowohl Flüssigharze als auch Reaktivverdünnner sind klare, farblose Flüssigkeiten. In der Produktion entstehen jedoch gelbliche Verunreinigungen. Diese wirken sich negativ auf die Produktqualität aus und schränken das Einsatzgebiet maßgeblich ein. In Voruntersuchungen wurde festgestellt, dass die Verunreinigung durch UV-Licht abgebaut werden. Am Lehrstuhl für Chemische Verfahrenstechnik der OVGU wurden aufbauend spezifische Wellenlängen zum photochemischen Abbau mittels UV/VIS-Spektroskopie identifiziert. Es wurde gezeigt, dass die Kinetik dieses Prozesses Wellenlängen-spezifisch verfolgt und gezielt beeinflusst werden kann.

Im Projekt soll die photochemische Behandlung experimentell und modellbasiert im Hinblick auf geeignete Verfahrens- und Anlagenkonzepte untersucht werden. Dabei soll diskontinuierliche und kontinuierliche Reaktormodelle für die industrielle Anwendung entwickelt und bewertet werden.

Projektleitung: Prof. Dr. habil. Christof Hamel
Förderer: EU - EFRE Sachsen-Anhalt - 01.04.2024 - 31.12.2025

Modulares Reaktorsystem für die heterogene Katalyse zur Untersuchung industrieller, skalierbarer Katalysatoren

Der Rohstoffwandel in der Chemischen Industrie bedingt neue Reaktoren und dynamische Prozesse. Die aktuelle Roadmap Katalyse sowie Reaktionstechnik messen diesem für die Zukunft eine hohe Bedeutung

bei, um die gesetzten Nachhaltigkeitsziele zu erfüllen und auch regional wettbewerbsfähig zu sein. Neue, flexible, biobasierte Rohstoffe mit fluktuierenden Eigenschaften stellen eine besondere Herausforderung für die Entwicklung neuer Katalysatoren und Prozesse dar. Explizit ist hierbei die Deaktivierung und Regeneration teurer edelmetallbasierter Katalysatoren zu nennen. Basis für die modellbasierte Entwicklung und Optimierung neuer Prozesse ist ein detailliertes Verständnis der Kinetik im Katalysator. Insbesondere bei komplexen Deaktivierungsprozessen durch Verkokung und periodischer Regeneration ist eine Analyse der zeitlichen/örtlichen Aktivität essentiell, um die Dynamik von Reaktion und Temperaturfronten zu verstehen, die Katalysatorstandzeit und damit die Nachhaltigkeit deutlich zu erhöhen sowie in den industriellen Maßstab zu skalieren bzw. gezielt zu beeinflussen. Das im Projekt zu realisierende modulare Reaktorsystem für die heterogene Katalyse (Abbildung 1) bietet erstmalig die Möglichkeit einer dynamischen und intrapartikulären Katalysatorpartikeldiagnostik in der Katalyse, gekoppelt mit Spektroskopie durchzuführen und so die Dynamik der Systeme hochauflöst zu erfassen bzw. diese unter Verwendung dynamischer Methoden gezielt anzuregen. Folglich können Daten mit hohem Informationsgehalt bei reduziertem experimentellem Aufwand/Kosten für die kinetische Analyse und mechanistische Modellbildung von Katalysatoren erhalten werden. Damit ist der Schlüssel zur Auslegung neuer Reaktorkonzepte, zur Prozessintensivierung, der Erhöhung von Katalysatorstandzeiten im Sinne der Nachhaltigkeitsstrategie und dem modellbasierten Scale-up gegeben. Hier setzt das Projekt mit dem Modularen Reaktorsystem in Form dynamischer, experimenteller und modellbasierter Untersuchungen im ...

[Mehr hier](#)

Projektleitung: Prof. Dr. Gunter Saake, Dr.-Ing. Robert Heyer

Projektbearbeitung: Daniel Walke

Förderer: Deutsche Forschungsgemeinschaft (DFG) - 01.12.2021 - 30.04.2025

Optimizing graph databases focussing on data processing and integration of machine learning for large clinical and biological datasets

Graphdatenbanken stellen eine effiziente Technik zur Speicherung und zum Zugriff auf hochgradig verknüpfte Daten unter Verwendung einer Graphstruktur dar, wie z.B. Verbindungen zwischen Messdaten zu Umweltparametern oder klinischen Patientendaten. Die flexible Knotenstruktur macht es einfach, die Ergebnisse verschiedener Untersuchungen hinzuzufügen. Dies reicht von einfachen Blutdruckmessungen über die neuesten CT- und MRT-Scans bis hin zu hochauflösenden Omics-Analysen (z.B. von Tumorbiopsien, Darmmikrobiom-Proben). Allerdings wird das volle Potenzial der Datenverarbeitung und -analyse mittels Graphdatenbanken in biologischen und klinischen Anwendungsfällen noch nicht vollständig ausgeschöpft. Insbesondere die riesige Menge an miteinander verbundenen Daten, die geladen, verarbeitet und analysiert werden müssen, führt zu zu langen Verarbeitungszeiten, um in klinische Arbeitsabläufe integriert werden zu können. Um dieses Ziel zu erreichen sind neuartige Optimierungen von Graph-Operatoren sowie eine geeignete Integration von Analyseansätzen notwendig. Dieses Projekt zielt darauf ab, die oben genannten Probleme in zwei Richtungen zu lösen: (i) Vorschlag geeigneter Optimierungen für Graphdatenbank-Operationen, auch unter Einsatz moderner Hardware, und (ii) Integration von Algorithmen des maschinellen Lernens für eine einfachere und schnellere Analyse der biologischen Daten. Für die erste Richtung untersuchen wir den Stand der Technik von Graphdatenbanksystemen und deren Speicherung sowie ihr Verarbeitungsmodell. Anschließend schlagen wir Optimierungen für effiziente operationale und analytische Operatoren vor. Für die zweite Richtung stellen wir uns vor, Algorithmen des maschinellen Lernens näher an ihre Datenlieferanten - die Graphdatenbanken - heranzubringen. Zu diesem Zweck füttern wir in einem ersten Schritt die Algorithmen des maschinellen Lernens direkt mit dem Graphen als Eingabe, indem wir geeignete Graphenoperatoren entwerfen. In einem zweiten Schritt ...

[Mehr hier](#)

Projektleitung: apl. Prof. Dr.-Ing. habil. Abdolreza Kharaghani
Projektbearbeitung: MSc. Enqi Liu
Kooperationen: Prof. Alba Dieguez Alonso; Prof. Viktor Scherer, Ruhr-Universität Bochum
Förderer: Deutsche Forschungsgemeinschaft (DFG) - 01.08.2024 - 31.07.2028

Adaptive Porennetzwerkmodellierung und Experimente zu thermochemischen Prozessen in einzelnen porösen Partikeln

Eine entscheidende Komponente bei der Entwicklung von DEM/CFD-Rechenwerkzeugen zur Beschreibung des thermochemischen Verhaltens von Schüttgütern sind die Einzelpartikelmodelle für DEM. Nur mit genauen Einzelpartikelmodellen lassen sich Partikelumwandlungen und/oder Partikelproduktqualitäten am Ausgang industrieller Reaktoren zuverlässig vorhersagen. Die Komplexität der Beschreibung liegt in der Tatsache begründet, dass auf der Partikelebene Chemie und Transport auf ähnlichen Zeitskalen miteinander konkurrieren.

Das Projekt B4 treibt die Weiterentwicklung der Modellierung reaktiver Prozesse auf Partikelebene voran, wobei der Schwerpunkt auf der Pyrolyse von Biomasse und der Umwandlung von Holzkohle als reaktive Modellsysteme im 2. Die Biomasseumwandlung wurde ausgewählt, da sie als hochkomplexes Modellsystem für DEM-Einzelpartikelmodelle dienen kann, die heterogene Reaktionen, Veränderungen der Partikelform und Porenstruktur sowie anisotrope Intrapartikeltransporteigenschaften umfassen. Als methodischer Ansatz zur Entwicklung anspruchsvoller Einzelpartikelmodelle wird ein neuartiger, einzigartiger simulativ-experimenteller Rahmen abgeleitet. Dieser Rahmen stützt sich auf drei Säulen: die Entwicklung adaptiver Porennetzwerkmodelle (PNM), die Parametrisierung von Kontinuumsmodellen (CM) auf der Grundlage effektiver Transport-, chemischer und morphologischer Eigenschaften, die aus den hochaufgelösten PNM-Simulationen abgeleitet werden, und die Bereitstellung von Messdaten, die die Überbrückung von Skalen von PNM zu CM erleichtern.

Dieser Text wurde mit DeepL übersetzt

Projektleitung: apl. Prof. Dr.-Ing. habil. Abdolreza Kharaghani
Förderer: Deutsche Forschungsgemeinschaft (DFG) - 01.11.2022 - 31.10.2026

Continuum model with gas-liquid interfacial area for evaporation in porous media

Die Trocknungskinetik poröser Materialien wird von den Flüssigkeits-Gas-Grenzflächen (Menisken) beeinflusst, die sich im Laufe der Trocknung bilden und verschieben. In diesem Projekt wird versucht, die Flüssigkeits-Gas-Grenzfläche in Kontinuumsmodelle der Trocknung einzubeziehen, indem der Stand der Technik der Porennetzwerkmodellierung, Porennetzwerksimulationen und neue Experimente kombiniert werden.

Dieser Text wurde mit DeepL übersetzt

Projektleitung: apl. Prof. Dr.-Ing. habil. Abdolreza Kharaghani
Kooperationen: Nestlé, Switzerland; International Fine Particle Research Institute; Danone Nutricia Research; Merck Group; Carbon Innovation Centre
Förderer: Sonstige - 01.09.2023 - 31.08.2026

Modeling porosity development during drying of porous systems

Die Bildung und Entwicklung von Poren in porösen Systemen während des Trocknungsprozesses wird auf mehrere nebeneinander liegende und konkurrierende Mechanismen zurückgeführt. In diesem Projekt sollen Berechnungsmodelle entwickelt werden, die diese Mechanismen erfassen und zur zuverlässigen Beschreibung einer Vielzahl von Formulierungen und Trocknern verwendet werden können, wobei die endgültige Porenstruktur mit den Formulierungseigenschaften und Prozessvariablen in Beziehung gesetzt wird.

Dieser Text wurde mit DeepL übersetzt

Projektleitung: apl. Prof. Dr.-Ing. habil. Abdolreza Kharaghani
Projektbearbeitung: MSc. Chen Jing, Dr.-Ing. Lu Xiang
Förderer: Stiftungen - Sonstige - 01.06.2022 - 31.05.2026

Simulation der Trocknung dicker poröser Medien durch Integration von Porennetzwerkmodellen und Algorithmen des maschinellen Lernens

Ein wichtiger Pfeiler des Projekts ist die Erarbeitung einer übergreifenden Methodik, die Porennetzwerkmodelle und überwachte maschinelle Lernverfahren gemeinsam nutzt. Eine solche Methodik wird Simulationen der Trocknung in dicken porösen Medien, aber auch thermo-chemische Prozesse (wie Pyrolyse) in thermisch dicken Partikeln unterstützen.

Dieser Text wurde mit DeepL übersetzt

Projektleitung: apl. Prof. Dr.-Ing. habil. Abdolreza Kharaghani, MSc. Bürger Johannes
Kooperationen: Dr. Maciej Jaskulski, TU Lodz
Förderer: Deutsche Forschungsgemeinschaft (DFG) - 01.05.2022 - 30.09.2025

Mechanismus der Agglomeration bei der Sprühtrocknung mit Rückführung der feinen Partikel

Pulver, die durch Sprühtrocknung hergestellt werden, erfordern häufig einen zusätzlichen Vergrößerungsschritt, der hauptsächlich entweder außerhalb des Trockenturms oder durch Rückführung trockener untermaßiger Partikel in den Trockenturm erfolgt. In diesem Projekt werden die Kenntnisse über die Vergrößerung von Pulvern bei der Sprühtrocknung mit Rückführung von Feingut erweitert, wobei sowohl die Prozess- als auch die Produktqualität im Vordergrund stehen. Ein effizientes Vorhersagewerkzeug im Rahmen der numerischen Strömungsmechanik (CFD) wird erstellt und anhand von räumlich und zeitlich aufgelösten Experimenten in einer Pilotanlage bewertet.

Dieser Text wurde mit DeepL übersetzt

Projektleitung: Prof. Dr.-Ing. habil. Kai Sundmacher, Prof. Dr.-Ing. habil. Kai Sundmacher
Kooperationen: Max-Planck-Institut für Dynamik komplexer technischer Systeme
Förderer: Land (Sachsen-Anhalt) - 01.06.2023 - 31.12.2028

Intelligente Prozesssysteme für eine umweltfreundliche kohlenstoffbasierte chemische Produktion in einer nachhaltigen Gesellschaft

Das SmartProSys-Forschungscluster zielt darauf ab, fossile Rohstoffe in der chemischen Produktion durch erneuerbare Kohlenstoffquellen zu ersetzen und damit einen Beitrag zu einer kohlenstoffneutralen Gesellschaft zu leisten. Sie verfolgt eine systemorientierte Strategie und untersucht ressourceneffiziente Abbau- und Synthesestrategien auf Prozessebene, intelligente katalytische Umwandlungen auf molekularer Ebene sowie wirtschaftliche und gesellschaftliche Auswirkungen auf einer höheren Systemebene. Die Komplexität des Systems erfordert die Entwicklung leistungsstarker Rechen- und maschineller Lernmethoden für den Entwurf, die Simulation, die Optimierung und die Steuerung des Systems. An SmartProSys sind Forscher aus den Bereichen der systemorientierten Verfahrenstechnik, Chemie, Mathematik, Logistik, Politikwissenschaft und Psychologie beteiligt.

Dieser Text wurde mit DeepL übersetzt

Projektleitung: Prof. Dr.-Ing. habil. Kai Sundmacher
Förderer: Deutsche Forschungsgemeinschaft (DFG) - 01.01.2023 - 31.12.2028

Autonome Regelung einer Prozesskette zur CO2-Karbonisierung unter Verwendung von Bergbauabfällen

Das Ziel des Projekts ist die Entwicklung einer autonomen und selbst-lernenden Prozesskette, um aus CO2 und Bergbauabfällen über die Karbonatbildung einen schwer löslichen Feststoff herzustellen. Dabei werden in vier Schritten 1. Calcium- und Magnesiumionen aus dem Mineral herausgelöst, 2. die entstandene Suspension filtriert, um 3. in der wässrigen Lösung bei einem pH-Wechsel-Prozess unter Zugabe von CO2 die gezielte Bildung von Calciumkarbonat und Magnesiumkarbonat hervorzurufen und dann 4. die Feststoffe abzuzentrifugieren. Dabei soll der Prozess auch bei Änderungen in den Anfangs- und Randbedingungen autonom die optimalen Bedingungen zur gezielten Herstellung der Feststoffe finden und einstellen, um damit die gewünschten Produkteigenschaften zu erzielen und möglichst wenig Energie zu verbrauchen. Das Projekt ist eingebettet in den SPP2364 und wird gemeinsam mit Kollegen des KIT in Karlsruhe und der RPTU Kaiserslautern-Landau bearbeitet.

Projektleitung: Dr.-Ing. Vico Tenberg, Prof. Dr.-Ing. habil. Kai Sundmacher
Projektbearbeitung: Sahil Sethi, Vico Tenberg, apl. Prof. Dr. Heike Lorenz
Förderer: EU - EFRE Sachsen-Anhalt - 15.04.2025 - 31.12.2027

CDS - Center for Dynamic Systems (CDS) ZS/2023/12/182075 / TP 1.3: Solvolyse sortenreiner Kunststoffabfälle

Ziel dieses Projektes ist es kosten- und energieeffiziente Lösungen für die Trennung und das Recycling von gemischten Kunststoffabfällen zu entwickeln. Dazu verwenden wird verschiedene Ansätze, wie z.B. die Depolymerisation und dem selektiven Herauslösen einzelner Polymersorten, zur effektiven Aufreinigung von Kunststoffabfällen um damit eine geschlossene Kreislaufwirtschaft zu ermöglichen. Dazu dient die Entwicklung eines Frameworks mittels maschinellem Lernens, welches Löslichkeiten von Polymer-/Oligomer-/Monomer-Lösungsmittel-Systemen vorhersagen kann. Damit soll ein Lösungsmittel-Ranking erstellt werden, mit Hilfe dessen, die schnelle Vorauswahl von Prozessvarianten sowie die anschließende experimentelle Validierung unterstützt werden sollen. Diese prädiktiven Modelle werden in Depolymerisations- und Lösungsprozesse integriert, um Lösungsmittelauswahl und Prozessparameter wie Druck oder Temperatur zu optimieren um die Gesamteffizienz zu steigern.

Projektleitung: Prof. Dr.-Ing. habil. Kai Sundmacher
Förderer: Deutsche Forschungsgemeinschaft (DFG) - 01.10.2023 - 30.09.2027

Integriertes computergestütztes Molekül-, Material- und Prozessdesign für die mehrstufige katalytische Umwandlung von Olefinen in alpha-Aminosäuren und beta-Aminoalkohole

Dieses Projekt ist Teil der Forschungsgruppe "Mehrstufige katalytische Produktionssysteme für die Feinchemie durch integriertes Molekül-, Material- und Prozessdesign (IMPD4Cat)". Es zielt auf die Entwicklung einer integrierten computergestützten Methodik für das Molekül-, Material- und Prozessdesign ab, die die rationelle Auswahl wesentlicher Prozesshilfsstoffe (homogene Katalysatoren, Oxidationsmittel, Lösungsmittel, Membranen usw.) in direkter Kombination mit dem Entwurf eines vollständigen Reaktions-Separations-Prozesses unterstützt. Daher müssen geeignete Deskriptoren für die Hilfsstoffe identifiziert werden, um auf der Grundlage einer begrenzten Menge experimenteller Daten quantitative Struktur-Eigenschafts-Beziehungen zu ermitteln. Durch Einbettung dieser Beziehungen und der Funktionsmodelle der Prozessstufen in ein mathematisches Optimierungsprogramm lassen sich optimale Molekül-Material-Prozess-Kombinationen ermitteln. Bei der Suche nach den optimalen Lösungen soll nicht nur eine maximale Produktivität, sondern auch eine Minimierung des Energiebedarfs, der Emissionen und der Abfallmengen angestrebt werden. Die Entwicklung der Designmethodik erfolgt unter Betrachtung prototypischer mehrstufiger katalytischer Umwandlungspfade, nämlich von Olefinen zu alpha-Aminosäuren oder beta-Aminoalkoholen, in enger Zusammenarbeit mit den anderen Teilprojekten der Forschungsgruppe.

Projektleitung: Dr. Andreas Voigt, Prof. Dr.-Ing. habil. Kai Sundmacher
Kooperationen: TU Kaiserslautern; KIT Karlsruhe
Förderer: Deutsche Forschungsgemeinschaft (DFG) - 01.12.2022 - 31.12.2026

Autonome Regelung einer Prozesskette zur Karbonatbildung aus CO₂ unter Einsatz von Bergbauabfällen

Eine Prozesskette, beginnend mit der Auslösung von Calcium und Magnesium aus Bergbauabfällen mit sauren Lösungen, der Filtration der Suspension bis hin zur Endverarbeitung der Lösung in einem pH-Wechsel-Prozess unter Einsatz von CO₂ unter höherem Druck und Zugabe von Base zur gezielten Herstellung von Calcium- und Magnesiumkarbonat als schwerlöslichen Fällungsprodukten soll unter wechselseitigen Bedingungen der Ausgangsmaterialien und Prozessumgebung optimal gesteuert und autonom geregelt werden. In Kooperation mit der TU Kaiserslautern (Regelung) und des KIT (Auslösung und Filtration) soll in Magdeburg im Rahmen des SPP2364 der komplexe Prozess in einer Miniplant als Pilotanlage aufgebaut, detailliert untersucht und optimiert werden.

Projektleitung: Prof. Dr.-Ing. habil. Evangelos Tsotsas, MSc. Aisel Ajalova
Kooperationen: Prof. Achim Kienle, OvGU Magdeburg; Prof. Andreas Bück, Friedrich-Alexander University Erlangen-Nürnberg
Förderer: Deutsche Forschungsgemeinschaft (DFG) - 15.12.2022 - 14.11.2028

Autonome Strukturbildungsprozesse in der Sprühwirbelschichtagglomeration

Die jüngsten Fortschritte bei der Agglomeration in der Sprühwirbelschicht ermöglichen es, die Kinetik und die Partikelbildung während des Prozesses zu modellieren. Mit einer minimalen Menge an empirischen Informationen über den Einfluss der Betriebsbedingungen auf die fraktale Dimension können Agglomerate *in silico* erzeugt und sogar in 3D ausgedruckt werden. Diese fortschrittlichen Technologien sollen auf den kontinuierlich betriebenen Prozess angewendet werden, in Kombination mit neuen Methoden zur Inline-Überwachung und automatischen Steuerung. Das Ziel ist die automatische Steuerung. Ziel ist es, den Prozess autonom in Richtung gewünschter Agglomeratstrukturen und strukturabhängiger Endnutzereigenschaften zu führen.

Dieser Text wurde mit DeepL übersetzt

Projektleitung: Prof. Dr.-Ing. habil. Evangelos Tsotsas
Projektbearbeitung: MSc. Feng Shi
Kooperationen: Prof. Andreas Bück (OVGU, Partikelsysteme)
Förderer: EU - ESF Sachsen-Anhalt - 01.07.2025 - 30.06.2028

Wirbelschichtpyrolyse mit gemischter Beschickung

Die Pyrolyse ist eine Möglichkeit für das Recycling von Kunststoffen, die häufig in Wirbelschichtreaktoren durchgeführt wird. Solche Reaktoren können verschiedene Arten von Kunststoffen (eventuell gemischt mit Biomasse), inertes Material (Sand), Partikel für die Induktionsheizung und Katalysatorpartikel enthalten. Die Vermischung/Entmischung ist in solchen Fällen ein wichtiges Thema, ebenso wie die Wärmeübertragungseffizienz und die Qualität der Fluidisierung, die durch unerwünschte Agglomeration beeinträchtigt werden kann. All diese Aspekte werden mit modernen experimentellen (Particle Tracking Velocimetry) und Modellierungstechniken (CFD-DEM, Monte Carlo Modelle) untersucht.

Dieser Text wurde mit DeepL übersetzt am 28.11.2025

Projektleitung: Prof. Dr.-Ing. habil. Evangelos Tsotsas
Projektbearbeitung: MSc. Simson Rodrigues, MSc. Neda Kazemi
Kooperationen: Dr. Nicole Vorhauer-Huguet; Prof. Viktor Scherer, Ruhr-Universität Bochum
Förderer: Deutsche Forschungsgemeinschaft (DFG) - 01.07.2020 - 30.06.2028

Kontaktwärmeübertragung und Wärmeleitung in Schüttbetten aus kantigen Teilchen

Ein zentraler Parameter der thermischen DEM ist der Partikel-Partikel-Wärmeübergangskoeffizient bei binären Kontakten. Der Kontaktwärmeübergang ist wichtig für thermochemische Prozesse in Partikelsystemen, wird aber üblicherweise mit vereinfachten Modellen berechnet, deren Gültigkeit selbst bei gleich großen Kugeln fraglich ist. Für polyedrische Partikel fehlen trotz zahlreicher Anwendungen in der Praxis zuverlässige Grundlagen. Das Projekt zielt auf eine neue und zuverlässigere Methode zur Vorhersage der Wärmeübertragung, wenn Partikel für eine bestimmte Zeit miteinander in Kontakt kommen, anhand der effektiven Schüttsschichtwärmefähigkeit. Dazu wird die effektive Schüttsschichtwärmefähigkeit durch Experimente und Simulationen für ein breites Spektrum unterschiedlicher polyedrischer Partikel untersucht. Auf dieser Grundlage werden neue Korrelationen für die Vorhersage der effektiven Wärmeleitfähigkeit für beliebige Materialien, die aus polyederartigen Teilchen bestehen, entwickelt. Der Übergang zu Teilchen-Teilchen-Wärmeübergangskoeffizienten wird durch Experimente in einer kleinen Dreh trommel kalibriert. Binäre Mischungen von Teilchen, die sich in Größe, Form oder Leitfähigkeit unterscheiden, werden ebenfalls berücksichtigt. Die Porosität des gepackten Bettes und die relative Fläche der flachen Kontakte zwischen den Partikeln wird aus den Ergebnissen der Röntgen- μ -CT-Bildgebung abgeleitet. Die Morphologie des interstitiellen Festbetts, einschließlich der Variabilität der Porengröße, wird berücksichtigt.

Dieser Text wurde mit DeepL übersetzt

Projektleitung: Prof. Dr.-Ing. habil. Evangelos Tsotsas, MSc. Subash Reddy Kolan
Kooperationen: MSc. Rui Wang, supported by CSC (Chinese Scholarship council), on agglomerate generation and characterization; Dr. Stutee Bhoi, supported by AvH (Alexander von Humboldt Foundation) on advanced population balance and Monte Carlo modeling of agglomeration
Förderer: Deutsche Forschungsgemeinschaft (DFG) - 01.10.2021 - 30.09.2027

Heteroaggregation von fluidisierten Nanopartikeln und feststoffhaltigen Aerosoltröpfchen

Das Projekt zielt darauf ab, in einer Wirbelschicht sehr kleine Partikel (Nanopartikel oder Submikronpartikel) unterschiedlicher Zusammensetzung zu Heteroagglomeraten zu mischen, die zusätzlich mit Hilfe von Aerosoltröpfchen, die ein einbettendes festes Material enthalten, eingekapselt oder beschichtet werden können. Auf diese Weise werden binäre oder ternäre Partikelkomposite aus extrem fein verteilten Bestandteilen hergestellt. Anstelle der konventionellen Fluidisierung wird eine spezielle Strahlschichtanlage mit regulierbarem Lufteinlass für die Verarbeitung verwendet. Hochgeschwindigkeits-Lufteinlassdüsen tragen dazu bei, das dynamische Gleichgewicht zwischen Aggregation und Bruch in dieser Art von Anlage in Richtung kleinerer und festerer Agglomerate zu verschieben. Im Hinblick auf die Charakterisierung von Agglomeraten werden neue Methoden zur Rekonstruktion der 3D-Agglomeratstruktur aus 2D-Bilddaten entwickelt. In diesem Rahmen kann der Grad der Durchmischung der Subagglomerate identifiziert und durch die Verwendung von nicht gebranntem, d.h. nicht gesintertem, Rohmaterial in Richtung einzelner Nanopartikel verschoben werden. Um den Prozess zu beschreiben, werden neuartige Populationsbilanzen und diskrete Modelle verwendet. Die Leitfähigkeit der Heteroagglomerate (thermisch, elektrisch) wird gemessen und modelliert.

Dieser Text wurde mit DeepL übersetzt

Projektleitung: Prof. Dr.-Ing. habil. Evangelos Tsotsas, Ali Kaabi Fallahyehasl
Förderer: Deutsche Forschungsgemeinschaft (DFG) - 16.10.2023 - 15.10.2026

Anfängliche Sprüh-Wirbelschicht-Agglomeration an der Grenze zur Beschichtung

Das Projekt zielt darauf ab, die Grenze zwischen der Agglomeration in der Sprühwirbelschicht und der Beschichtung zu erforschen, die wichtige Schlüsselprozesse für die fortschrittliche Partikeltechnik sind. Wir werden die Agglomeration in der Nähe dieser Grenze (Borderline-Agglomeration) experimentell untersuchen und uns dabei auf die Anfangsphase der Agglomeration (beginnende Agglomeration) konzentrieren, in der sich aus Primärpartikeln Dimere (zu Einzelpartikeln zusammengeschichtete Partikel) bilden. Das Hauptaugenmerk liegt auf der einfachsten Agglomeratstruktur und den klarsten Bedingungen des Sprühwirbelschicht-Agglomerationsprozesses. Der Prozess wird auch durch Modellierung beschrieben. Hier können wir auf eigene Monte-Carlo-Modelle zurückgreifen, die stochastisch und diskret sind und Ereignisse und Prozesse auf Mikroebene darstellen können. Das Ziel ist es, diese Modelle radikal zu verbessern. So werden die entscheidenden Modellbestandteile überarbeitet, nämlich die Teilmodelle für Bruch und Trocknung, die auf separaten Experimenten ohne Sprühen (für Bruch) bzw. ohne Bindemittel im Spray (für Trocknung) basieren. Das Kriterium für die Aggregation oder den Rückprall nach einem Nassaufprall wird ebenfalls überarbeitet, obwohl es weiterhin auf der normalen Impulsdissipation beruht. Das verbesserte Modell wird einen direkten und bedingungslosen Zugang zur Agglomerations-Beschichtungs-Grenze ermöglichen, wodurch Regimekarten überflüssig werden.

Dieser Text wurde mit DeepL übersetzt

Projektleitung: Prof. Dr.-Ing. habil. Evangelos Tsotsas
Projektbearbeitung: MSc. Supriya Bhaskaran
Kooperationen: Dr. Nicole Vorhauer-Huguet; Dr. Tanja Vidakovic-Koch, MPI Magdeburg
Förderer: Sonstige - 01.11.2020 - 31.05.2025

Lattice-Boltzmann-Modellierung der Gas-Flüssigkeits-Verteilung in der anodischen Transportschicht bei der Wasserelektrolyse

Transportphänomene in elektrochemisch relevanten dünnen porösen Schichten sind der Schlüssel für die weitere Entwicklung umweltfreundlicher Energieerzeugungstechnologien. Im Falle der Wasserspaltung durch Elektrolyse sind die Benetzung und Trocknung der anodischen Transportschicht von besonderer Bedeutung. Diese Prozesse werden hier mit der Lattice-Boltzmann-Methode untersucht, die Berechnungen an der realen porösen Struktur ermöglicht, die durch Mikro-CT rekonstruiert wird. Die Forschungsarbeiten ergänzen ein paralleles Projekt, das die Modellierung von Porennetzwerken verwendet.

Dieser Text wurde mit DeepL übersetzt

Projektleitung: Dr.-Ing. Nicole Vorhauer-Huguet
Kooperationen: Jun.-Prof. Stefanie Duvigneau
Förderer: EU - EFRE Sachsen-Anhalt - 01.07.2025 - 30.06.2028

Computergestützte und experimentelle Untersuchung der biotechnologischen Herstellung von Biopolymeren in porösen Bioreaktoren mit hohem Oberfläche-zu-Volumen Verhältnis

Erneuerbare Ressourcen können zur Herstellung biologisch abbaubarer Polymere unter Verwendung verschiedener Mikroorganismen genutzt werden. Um die Produktionsprozesse für Biopolymere zu intensivieren, können neuartige und wettbewerbsfähige Reaktorkonzepte wie Biofilmreaktoren entwickelt werden. Eine solche Entwicklung erfordert eine starke wissenschaftliche Grundlagenforschung, für die wir leistungsfähige mathematische Modelle anstreben.

Projektleitung: Dr.-Ing. Nicole Vorhauer-Hugel
Projektbearbeitung: M.Sc. Felix Faber
Kooperationen: Dr.-Ing. Jan Barowski
Förderer: Deutsche Forschungsgemeinschaft (DFG) - 01.07.2024 - 30.06.2028

In-situ-Bestimmung von Erwärmung und Phasenänderungen in mikrowellenbeheizten Schüttbettreaktoren

Das Projekt "In-situ-Bestimmung von Erwärmung und Phasenänderungen in mikrowellen-beheizten Schüttbettreaktoren" betrachtet die Ausbreitung elektromagnetischer Wellen mit materialabhängiger Reflexion, Transmission und Absorption bei stark gekoppelten Änderungen der dielektrischen Eigenschaften mit Temperatur und Zusammensetzung. Zu diesem Zweck wird in Zusammenarbeit mit SFB Bulk Reaction Projekt B1 ein neuartiger radarbasierter Messaufbau für Prozesse bis zu max. 1000°C entwickelt. Die wesentliche Neuerung dieser Messtechnik wird die Möglichkeit sein, sie in-situ unter Hochtemperaturbedingungen im Mikrowellenreaktor einzusetzen. Die erfassten dielektrischen Änderungen werden zeitaufgelöste Korrelationen für lokale Temperatur- und Zusammensetzungsänderungen liefern. Die Funktionalität des Systems wird für Phasenänderungen in Holz zusammen SFB Bulk Reaction Projekt B4 demonstriert werden. Der Einfluss interner Wärmequellen (direkte volumetrische Erwärmung durch Mikrowellen) auf die Wärmeübergangskoeffizienten wird zusammen mit SFB Bulk Reaction Projekt B2 untersucht.

Projektleitung: Dr.-Ing. Nicole Vorhauer-Hugel
Kooperationen: Prof. Dr. Michael Rother
Förderer: Deutsche Forschungsgemeinschaft (DFG) - 01.04.2025 - 31.03.2028

Erfassung der Terpenproduktivität von Methanosarcina acetivorans-Biofilmen in porösen Substraten anhand eines mathematisch-physiologischen Ansatzes

Projektziel ist eine solide Grundlage für die Entwicklung skalierbarer Bioreaktoren, in welchen produktive Biofilme in porösen Strukturen immobilisiert sind. Das hohe Oberflächen-zu-Volumen-Verhältnis, das in solchen Reaktoren realisiert wird, stellt den Schlüssel zu wettbewerbsfähigen Raum-Zeit-Ausbeuten dar. Für die Methodenentwicklung wird die anaerobe Kohlenmonoxid-Fermentation durch Methanosarcina acetivorans betrachtet, einem genetisch handhabbaren Mikroorganismus mit nachgewiesenen Potenzial für die industrielle Synthese von Feinchemikalien, einschließlich Terpenen. Ein zuverlässig vorhersagbarer Prozess wird durch Kombination von Transkriptomanalyse und genetischer Manipulation auf der einen und verfahrenstechnischer Überwachung thermodynamischer und struktureller Eigenschaften auf der anderen Seite erreicht. Messungen werden durch einen skalierbaren numerischen Ansatz vervollständigt, der ein rechnerisch effizientes 3D-Porennetzwerkmodell des gekoppelten Transports und Wachstums umfasst sowie die realistische Struktur der porösen Reaktoren und die Physiologie von M. acetivorans berücksichtigt. Die Modellentwicklung wird Teil des Projekts sein und Experimente mit kontinuierlich durchströmten mikrofluidischen Plattformen einbeziehen, da sie sowohl das Wachstum von M. acetivorans unter kontrollierten Bedingungen in einem kleinen Reaktor als auch die erforderlichen Modellparameter abbilden können. Die Terpenproduktivität soll durch Modulation der Biofilmarchitektur, der Filmdicke und der Umsatzrate maximiert werden. Dies wird durch Anpassung der Durchflussraten, Konzentrationsprofile und der räumlichen und zeitlichen Variation der Temperatur unter Verwendung des Vorhersagemodells erreicht. Die optimale Substratstruktur, die ebenfalls durch Modellvorhersagen zugänglich wird, soll eine hohe Porenutzung und eine langanhaltende hohe Biofilmproduktivität ermöglichen. Als Packungsmaterial wird zunächst Polyacrylnitril (PAN) betrachtet, das sich bereits als geeignet ...
[Mehr hier](#)

Projektleitung: Dr.-Ing. Nicole Vorhauer-Hugot
Projektbearbeitung: M.Sc. Akshay Ujjani Narasimhaiah
Förderer: BMWi/AIF - 01.05.2024 - 31.10.2025

Einfluss der Prozessführung auf den Energiebedarf von Mikrowellentrocknern

In der Ziegelproduktion ist die Trocknung ein prozessbestimmender Schritt, da sie zum einen über die Qualität des Produktes entscheidet und zum anderen die Produktionskapazität bestimmt. Momentan werden dafür bei den Ziegelherstellern fast ausschließlich konvektive Verfahren eingesetzt, welche heiße Luft als Trocknungsmedium verwenden. Die Möglichkeiten der Prozessintensivierung sind mit den derzeitigen Konzepten bereits weitestgehend ausgeschöpft. Außerdem wird die heiße Luft durch Verbrennung von fossilen Brennstoffen, in der Regel Erdgas, erzeugt. Eine Elektrifizierung ist hier zielführend, so dass die Trocknung mit regenerativen Energien erfolgen kann, wenn langfristig Ofen und Trockner entkoppelt werden und die Wärme nicht aus dem Brennprozess zurückgewonnen wird.

Das Forschungsvorhaben leistet einen wichtigen Beitrag zum Verständnis der Konstruktion, Regelung und Betrieb von Mikrowellentrocknern. Die Untersuchungen sind auf die systematische Prozessführung unter Berücksichtigung der Prozess- und Materialparameter fokussiert. Als Projektergebnis werden Handlungsempfehlungen in Form einer umfangreichen Datenbasis zum Verhalten von Ziegelrohlingen in Mikrowellentrocknern bei unterschiedlichen Prozessführungen angestrebt. Diese können genutzt werden, um das skalierbare Segment eines Mikrowellentrockners in die Industrie zu überführen.

Somit hat das Vorhaben in zweierlei Hinsicht einen Beitrag zum gesellschaftlichen und gesamtwirtschaftlichen Ziel der Energie- und Ressourceneffizienz. Zum einen direkt durch die gesteigerte Energieeffizienz, zum anderen als Verfahren klimaneutraler, industrieller Prozesse.

Projektleitung: Prof. Dr. Berend van Wachem
Förderer: Deutsche Forschungsgemeinschaft (DFG) - 01.07.2023 - 30.06.2028

SFB 287 FP2 Bulk-Reaktion - Teilprojekt C2

Strömungsmischung, Wärmeübertragung und chemische Reaktionen in Festbett- und bewegten Bettreaktoren. Das Projekt C2 untersucht die Strahlausbreitung in Festbett- und bewegten Bettreaktoren, die für zahlreiche Anwendungen in der chemischen und energieverfahrenstechnischen Industrie von Bedeutung sind, z. B. in katalytischen Festbettreaktoren, Pelletheizungen, Schachtöfen und Rostfeuerungssystemen. Die experimentellen Ergebnisse werden mit numerischen Simulationen verglichen, um die Validierung durchzuführen und Fehler in den verschiedenen Mittelungsansätzen der DEM/CFD-Modellierung zu quantifizieren. Zudem werden PR-DNS- und DEM/CFD-Simulationen mit den neuen Partikelkonfigurationen aus FP2 fortgesetzt, um Fehler in bestehenden DEM/CFD-Ansätzen zu identifizieren und verbesserte Mittelungsverfahren zu entwickeln. Diese Simulationen adressieren auch den Wärmeübergang und tragen zur Weiterentwicklung des DEM/CFD-Rahmenwerks bei.

Projektleitung: Prof. Dr. Berend van Wachem
Förderer: Deutsche Forschungsgemeinschaft (DFG) - 01.07.2023 - 30.06.2028

SFB 287 FP2 BulkReaktion - Teilprojekt C5

Das Ziel von Projekt C5 ist die Entwicklung, Ableitung und Validierung neuer Modelle für eine präzisere Kopplung zwischen Fluid und Partikeln in DEM/CFD-Frameworks, wobei die heterogene und anisotrope Struktur lokaler Partikelpackungen berücksichtigt wird. Hierfür werden aufgelöste Simulationen von Partikelpackungen durchgeführt, die folgende Aspekte umfassen: i) Partikel mit variierenden Größenverteilungen, ii) nicht-isotherme Strömungen und iii) bewegte Partikel. Diese Erweiterungen stellen eine natürliche Weiterentwicklung unserer numerischen Werkzeuge dar und sind von hoher Relevanz für die Forschungsgemeinschaft im Bereich DEM/CFD.

Projektleitung:

Prof. Dr. Berend van Wachem

Förderer:

Deutsche Forschungsgemeinschaft (DFG) - 01.04.2025 - 31.03.2028

Modellentwicklung der Grobstruktursimulation für turbulente Gas-Partikel Strömungen

Die meisten industriellen und natürlichen Prozesse von partikelbeladenen Gasströmen finden in einem turbulenten Strömungsfeld statt. Diese Strömungen können normalerweise in numerischen Simulationen genau vorhergesagt werden, indem die kleinsten turbulenten Längen- und Zeitskalen bis auf die Kolmogorov-Skalen aufgelöst und jedes Partikel einzeln mit dem Euler-Lagrange-Verfahren verfolgt wird. Für die meisten industriellen Prozesse ist jedoch eine solche direkte numerische Simulation (DNS) zu rechenintensiv. Eine gängige Alternative in Einphasenströmungen ist die Durchführung sogenannter Grobstruktursimulationen (LES), die die größten Strömungsstrukturen auflösen und die kleinen Strömungsstrukturen durch geeignete Modelle berücksichtigen. Obwohl LES in Einphasenströmungen etabliert sind, sind sie nicht direkt auf partikelbeladene Strömungen anwendbar, da die kleinen Strömungsskalen, die in einer LES nicht aufgelöst werden, das Partikelverhalten erheblich beeinflussen können. Darüber hinaus verändern die Partikel die aufgelösten und die nicht aufgelösten Strömungsstrukturen, weshalb die Modelle von Einphasen-LES in partikelbeladenen Strömungen im Allgemeinen nicht anwendbar sind. Während der ersten Projektphase haben wir neue LES-Modelle für unbeschränkte Strömungen entwickelt. In der nächsten Projektphase streben wir an, solche Modelle für wandgebundene Strömungen zu entwickeln. In diesem Antrag adressieren wir die drei wesentlichen Probleme von LES, angewandt auf partikelbeladenen Turbulenz: (i) Rekonstruktion des Feinstrukturgeschwindigkeitsfeldes, um genaue Partikelstatistiken zu erhalten, (ii) Modellierung des Einflusses der Partikel auf die aufgelöste und die nicht aufgelöste Turbulenz, und (iii) Vorhersage der korrekten Partikelkollisionsstatistiken.

Projektleitung:

Prof. Dr. Berend van Wachem

Förderer:

Deutsche Forschungsgemeinschaft (DFG) - 01.03.2025 - 29.02.2028

Verbesserung der Simulationen von großen mit dichten Partikeln beladenen Strömungen durch maschinelles Lernen: ein genetischer Programmieransatz

Partikelbeladene Strömungen treten in vielen natürlichen und industriellen Prozessen auf, wie zum Beispiel in der Strömung von roten und weißen Blutkörperchen in Plasma oder der Bewegung von Partikeln in Wirbelschichten. In den letzten 40 Jahren haben Wissenschaftler Euler-Lagrange (EL) Simulationen verwendet, um das Verhalten solcher Strömungen vorherzusagen. Allerdings stützen sich EL-Simulationen stark auf Schließungsmodelle, um die Subfilterspannungen (d.h. Fluidturbulzenzen) und die Wechselwirkung zwischen dem Fluid und den Partikeln zu beschreiben. Diese Schließungsmodelle entstehen aus komplexen physikalischen Phänomenen, die auf kleinen Skalen auftreten: wie kleine Fluidwirbel interagieren und wie das Fluid mit den Oberflächen der Partikel interagiert. Aktuelle Modelle hierfür sind weitgehend empirisch, rudimentär und die genaue Bestimmung der Werte wäre extrem teuer, da viele hoch aufgelöste Simulationen für jeden der Fälle durchgeführt werden müssten. Dies ist ein Antrag zur Entwicklung neuartiger Modelle für die Subfilterspannungen und die Wechselwirkungen zwischen Partikeln und Flüssigkeiten zur Vorhersage partikelbeladener Strömungen auf Prozessebene unter Berücksichtigung der Eigenschaften der Strömung um das Partikel und der umgebenden Partikel unter Verwendung eines überwachten maschinellen Lernansatzes: genetische Programmierung (GP). GP ist sehr gut geeignet, da das Ergebnis überprüfbare Gleichungen produziert. In der ersten Förderperiode haben wir ein neues, sehr genaues Partikel-Fluid-Wechselwirkungsmodell entwickelt. In dieser Förderperiode werden wir das Modell mit einer Unsicherheitsquantifizierung erweitern und einen Ausdruck für die nicht geschlossenen Subfilterspannungen entwickeln. Die entwickelten Gleichungen werden durch analytische Lösungen und hoch aufgelöste Simulationen validiert und ermöglichen genaue, groß angelegte Simulationen dichter partikelbeladener Strömungen auf Prozessebene, wobei nur ein Bruchteil der Kosten vollständig ...

[Mehr hier](#)

Projektleitung: Prof. Dr. Berend van Wachem
Förderer: EU - EFRE Sachsen-Anhalt - 01.05.2025 - 31.12.2027

Center for Dynamic Systems (CDS) ZS/2023/12/182075

Das Projekt untersucht experimentell und numerisch das Verhalten nicht-sphärischer Partikel in turbulenten Strömungen mit dem Ziel, die Effizienz moderner Trenntechnologien wie Zyklone und Zickzack-Sichter zu verbessern. Im Fokus steht die Quantifizierung des Einflusses der Partikelform auf Bewegung, Orientierung und Segregation sowie die Entwicklung validierter Modelle für formabhängige aerodynamische Kräfte und Drehmomente. Hierzu werden hochauflösende Strömungsdiagnostik (PIV), 3D-Partikelverfolgung und datengetriebene Methoden wie physikinformierte neuronale Netze kombiniert. Die Ergebnisse münden in belastbare Benchmark-Datensätze und konkrete Designempfehlungen zur Optimierung industrieller Trennprozesse.

Projektleitung: Prof. Dr. Berend van Wachem
Förderer: Deutsche Forschungsgemeinschaft (DFG) - 01.10.2024 - 31.12.2027

Zwei-, Drei-, und Vier-Wege-Kopplung suspendierter länglicher Partikel in turbulenten Strömungen

Das Projekt befasst sich mit der Entwicklung präziser Modelle zur Beschreibung des Verhaltens nicht-sphärischer Partikel in turbulenten Mehrphasenströmungen, die in industriellen Prozessen häufig auftreten.

Ziel ist es, die bisherige Annahme sphärischer Partikel zu überwinden, da sie oft zu ungenauen Ergebnissen führt. Mit einem Euler/Lagrange-Ansatz, der LES- und RANS-Methoden integriert, sollen Rückwirkungen der Partikel auf die Strömung, fluiddynamische Wechselwirkungen und Partikelkollisionen berücksichtigt werden. Die Modelle basieren auf grundlegenden physikalischen Prinzipien und werden mittels partikelaufgelöster direkter numerischer Simulationen (PR-DNS) abgeleitet. Die Ergebnisse sollen die Vorhersage und Optimierung von Prozessen mit nicht-sphärischen Partikeln deutlich verbessern.

Projektleitung: Prof. Dr. Berend van Wachem
Förderer: Deutsche Forschungsgemeinschaft (DFG) - 01.01.2024 - 31.12.2026

Nachwuchsgruppe im Emmy Noether-Programm (2. Förderphase)

Sowohl Staubflammen als auch industrielle Zellkultivierungen weisen häufig Trägerströmungen auf, die turbulent sind. Turbulenz ist dabei eine scheinbar zufällige Bewegung des Trägerfluids, die von kleinen Störungen hervorgerufen wird. Da Turbulenz den kleinskaligen Impuls-, Stoff- und Wärmeaustausch zwischen dem Trägermedium und den dispergierten Partikeln beeinflusst, liegt unser Fokus im zweiten Förderabschnitt auf der Frage, wie sich diese Beeinflussung im Mittel auf großskalige Vorhersagegrößen wie beispielsweise die Oxidpartikelgrößenverteilung oder die Zellanzahl auswirkt? Zur Beantwortung dieser Frage wird die Bewegungsgleichung, die das Verhalten der Partikelpopulation beschreibt, in eine übergeordnete statistische Beschreibung eingebettet. Ein Vorteil dieses geschachtelten Ansatzes ist, dass Ausdrücke für chemische Reaktionen und für den Gas-Partikel Stoff- und Wärmeaustausch, die in laminaren Strömungen bestimmt wurden, gültig bleiben und geschlossen behandelt werden können.

Das vollständige Modellierungsrahmenwerk wird schließlich eingesetzt, um den Schadstoff- und Oxidpartikelaustritt einer turbulenten Staubflamme zu beurteilen und sowohl die räumliche Mikroträgerverteilung in einem Bioreaktor als auch mögliche Substratlimitierungen vorherzusagen. Zu Validierungszwecken ziehen wir dabei Vergleiche mit existierenden experimentellen Messungen heran.

Projektleitung: Prof. Dr. Berend van Wachem, Berend van Wachem
Förderer: Deutsche Forschungsgemeinschaft (DFG) - 01.01.2023 - 31.08.2026

Nichtlineare Kapillarsysteme mit tensidebeladenen Grenzflächen

An Fluidgrenzflächen adsorbierte oberflächenaktive Substanzen sind allgegenwärtig und das Verständnis ihres subtilen, aber oft dominanten Einflusses ist daher für eine Vielzahl von technischen Anwendungen und Naturphänomenen von zentraler Bedeutung. Theoretische Untersuchungen zur physikalisch-chemischen Hydrodynamik von Kapillarsystemen mit Tensiden beschränkten sich bisher überwiegend auf einfache Tenside, Fälle ohne Topologieänderungen und kleine Reynolds-Zahlen. Infolgedessen gibt es kein umfassendes Verständnis des Einflusses von Oberflächenviskosität und Trägheit, der in technischen Anwendungen von der Biotechnik bis zur Fertigung wichtig ist, in Kapillarsystemen einschließlich Änderungen der Grenzflächentopologie. Dieses Projekt untersucht die grundlegenden physikalischen Mechanismen, die mit dem nichtlinearen Verhalten von tensidbeladenen Kapillarsystemen verbunden sind, und konzentriert sich auf den subtilen, aber wichtigen Einfluss der Oberflächenviskosität sowie die Entwicklung von Kapillarinstabilitäten und -fragmentierung.

Dies wird zu einem detaillierteren Verständnis der Wechselwirkung von Oberflächenviskosität und Trägheit mit der oberflächenspannungsdominierten Grenzflächenbewegung und ihrer Auswirkungen auf Topologieänderungen in Kapillarsystemen über einen weiten Bereich von Längenskalen beitragen. Um diese Strömungen zu untersuchen, werden wir neue numerische Methoden zur Simulation von Grenzflächenströmungen mit unlöslichen Tensiden und Oberflächenviskosität im Bereich der Kontinuumsmechanik entwickeln, die, integriert in modernste numerische Simulationswerkzeuge, einen rationalen rechnerischen Rahmen für die genaue Modellierung oberflächenaktiver Substanzen stellen werden.

Projektleitung: Prof. Dr. Berend van Wachem
Projektbearbeitung: Jun.-Prof. Dr. Fabian Denner
Förderer: Deutsche Forschungsgemeinschaft (DFG) - 01.02.2022 - 31.08.2026

Aerosolenstehung in der Lunge und Einkapselung von Viren

Mikroskopische Aerosole wurden als die Hauptinfektionswege für SARS-CoV-2 identifiziert. Diese Tröpfchen werden tief in der Lunge aus Auskleidungsflüssigkeiten erzeugt. Während der Atmung bilden sich dünne Filme und reißen auf, wodurch feine Tröpfchen freigesetzt werden, die die Viruslast einkapseln. Im Gegensatz zu größeren Tröpfchen, die sich in den oberen Atemwegen bilden, bleiben mikroskopisch kleine Tröpfchen, die hier untersucht wurden, viel länger in der Luft schwebend und stellen somit ein höheres Risiko für luftübertragene Infektionen dar. Hier wird sich ein interdisziplinäres Forschungsteam mit der Wissenschaft der Aerosolerzeugung und Viruseinkapselung befassen, das medizinisches, biologisches und strömungsmechanisches Fachwissen verbindet. Wir werden den Schwerpunkt auf realistische Flüssigkeiten zusammen mit Viruspartikeln legen und uns auf die schnellen und empfindlichen Strömungen konzentrieren, die zu Filmbrüchen, Tröpfchenbildung, Verkapselung und Stabilisierung führen. Der Schwerpunkt liegt auf Experimenten mit hoher räumlich-zeitlicher Auflösung, Simulationen des Zerstäubungs- und Tropfenbildungsprozesses von dünnen Filmen und der biologischen Virulenz der dabei erzeugten Aerosolpartikel. Während die Forschung durch die Virulenz von SARS-CoV-2 motiviert wurde, werden auch andere Virenarten getestet, um die grundlegende Mechanismen zu entschlüsseln, die zu einer Übertragung von Krankheitserregern aus der Lunge über die Luft erlauben.

Projektleitung: Prof. Dr. Berend van Wachem, Berend van Wachem
Förderer: Deutsche Forschungsgemeinschaft (DFG) - 01.11.2022 - 31.07.2026

Optimierung des Betriebs von Wirbelschichtverfahren mittels maschinellen Lernens

Wirbelschichtverfahren sind die Basis für viele Anwendungen, bei denen eine schnelle Vermischung, Wärme- und Stoffübertragung zwischen Gas und Feststoffpartikeln erforderlich ist. Ihre Leistung hängt weitgehend von der Blasendynamik ab: aufsteigende Blasen treiben die Feststoffzirkulation an und verbessern den Gas-Feststoff-Kontakt erheblich, wodurch Misch-, Reaktions- und Transporteigenschaften verbessert werden. Dabei werden

bisher fast alle Wirbelschichten mit einem gleichförmigen Gasstrom betrieben. Aktuelle wissenschaftliche Arbeiten zeigen jedoch, dass der Betrieb einer Wirbelschicht mit einer alternierenden Gasströmung (z.B. sinusförmige Gasfluidisierungsgeschwindigkeit) zu unterschiedlichen Blasenmustern und -dynamiken führt. Ziel dieses Projekts ist es, die Blasen in einer Wirbelschicht durch Anwendung von Methoden der Künstlichen Intelligenz (KI) wie evolutionäre Algorithmen und genetische Programmierung zu kontrollieren. Wir werden unsere Wirbelschicht im Labormaßstab mit Kamerasystem und Berechnungsmodellen im Euler-Euler- und Euler-Lagrange-Verfahren verwenden, um die Dynamik von Blasen in der Wirbelschicht zu erfassen, während die Wirbelgasgeschwindigkeit räumlich und zeitlich variiert wird. Zunächst werden diese Ergebnisse verwendet, um das optimale Zuflussmuster für gegebene Zielfunktionen zu finden. Die Herausforderung für die KI-Algorithmen besteht darin, das richtige Gleichgewicht zwischen den zeitintensiven experimentellen Daten und den Simulationsdaten zu finden, um das erforderliche Fluidisierungsgeschwindigkeitsprofil effizient bereitzustellen. Darüber hinaus werden wir mehrere widersprüchliche Zielfunktionen mithilfe von multikriteriellen Optimierungsalgorithmen betrachten. Zweitens werden die KI-Algorithmen verwendet, um durch Steuerung und Kontrolle des Geschwindigkeitsprofils eine optimale Blasengröße und Dynamik zu erhalten. Die Möglichkeit, das Verhalten der Blasen in einer Wirbelschicht zu kontrollieren, ermöglicht die Verbesserung von ...

[Mehr hier](#)

Projektleitung: Prof. Dr. Berend van Wachem, Berend van Wachem
Förderer: Land (Sachsen-Anhalt) - 01.08.2022 - 30.06.2025

Design of Novel Fluidized Bed Processes for Plastics Recycling

Ziel dieses Projekts ist die Entwicklung eines neuartigen und flexiblen Verfahrens auf Basis der Wirbelschichttechnologie zur Co-Pyrolyse von Biomasse und Kunststoffabfällen zur Herstellung verwertbarer Rohstoffe. Die Entwicklung dieses neuen Prozesses muss auf der detaillierten Modellierung der chemischen und physikalischen Phänomene des Umwandlungsprozesses mit dem komplexen Verhalten innerhalb eines Wirbelbetts basieren. Besonderes Augenmerk muss auf die physikalisch-chemischen Eigenschaften und die Morphologie der verwendeten Rohstoffe sowie auf deren Entwicklung während des Umwandlungsprozesses gelegt werden. Als erster Schritt wird eine detaillierte Bewertung des Stands der Technik bei der Pyrolyse (Co-Pyrolyse) von Biomasse und Abfall auf intrinsischer Ebene durchgeführt, mit dem Ziel, die relevantesten entwickelten kinetischen Mechanismen und Parameter zu identifizieren und bisher in der Praxis umgesetzt. Solche Ergebnisse werden mit den Ergebnissen der Pyrolyse einzelner ausgewählter Verbindungen und ihrer Mischungen verglichen. Dies wird die kinetischen Parameter der Umwandlung als Funktion der Rohstoffzusammensetzung und der Prozessbedingungen liefern und die gleichzeitige Identifizierung der relevantesten Wissens- und methodischen Lücken in der Pyrolysemodellierung solcher komplexer Mischungen auf intrinsischer und Partikelebene ermöglichen. Darüber hinaus werden auch die Reaktionswärme und das thermische Verhalten der verschiedenen Materialien untersucht, insbesondere mit dem Ziel, die Erweichungs- und Schmelzpunkte der Rohstoffkombinationen zu ermitteln, die zu Agglomerationsproblemen und Verstopfungen führen können. Dies wird mit der Bewertung des Stands der Technik zur Pyrolyse (Co-Pyrolyse) von Kunststoffabfällen und Biomasse auf Rektorebene kombiniert mit dem Ziel, die relevantesten Lösungen sowie Prozessbeschränkungen (Sintern, Agglomeration) zu identifizieren, De-fluidisierung, Spannen, ...) in Wirbelschichtreaktoren, die zur Pyrolyse von Biomasse ...

[Mehr hier](#)

Projektleitung: Prof. Dr. Berend van Wachem
Förderer: Land (Sachsen-Anhalt) - 01.08.2022 - 30.06.2025

Understanding the role of particle shape in gas-solid processes (1.-3. Förderphase)

Das Projekt widmet sich der Entwicklung eines umfassenden Simulationsframeworks, basierend auf CFD-DEM, zur Modellierung der Kunststoffpyrolyse in Wirbelschichtreaktoren, einem vielversprechenden Ansatz zur Bewältigung der Herausforderungen des Kunststoffrecyclings.

Während experimentelle Studien aufgrund begrenzter Einblicke in mikro- und mesoskalige physiko-chemische Wechselwirkungen nur eingeschränkte Erkenntnisse liefern, bietet CFD-DEM eine geeignete Methode

zur Analyse und Optimierung der komplexen Prozesse in Wirbelschichten. Insbesondere adressiert das Projekt offene Herausforderungen wie das Schmelzverhalten von Kunststoffen, das in Wirbelschichten zu Problemen wie Sinterung und Agglomeration führen kann, die eine De-fluidisierung des Reaktors verursachen. Die chemischen Reaktionen, Partikelschrumpfung und Schmelzverhalten werden detailliert untersucht, und das Projekt zielt darauf ab, dass erste valide Simulationsmodell für die Kunststoffpyrolyse in Wirbelschichten zu entwickeln. Dieses Modell soll sowohl zur Optimierung von Reaktorbetrieben als auch zur Förderung einer zirkulären Wirtschaft beitragen.

6. VERÖFFENTLICHUNGEN

BEGUTACHTETE ZEITSCHRIFTENAUFsätze

Aamer, Emad; Faber, Felix; Bhaskaran, Supriya; Dürr, Robert; Bettenbrock, Katja; Kienle, Achim; Vorhauer-Huguet, Nicole

Pore network model for study of biofilm growth limitations in porous substrata

Transport in porous media - Dordrecht [u.a.]: Springer Science + Business Media B.V, Bd. 153 (2025), Artikel 12, insges. 32 S.

[Imp.fact.: 2.6]

Ajalova, Aisel; Chen, Kaicheng; Hoffmann, Torsten; Tsotsas, Evangelos

Study of particle discharge from a fluidized bed - experimental investigation and comparative modeling analysis Processes - Basel : MDPI, Bd. 13 (2025), Heft 2, Artikel 562, insges. 21 S.

[Imp.fact.: 2.8]

Ajalova, Aisel; Ma, Wenjing; Hoffmann, Torsten; Tsotsas, Evangelos

Continuous spray fluidized bed agglomeration - influence of gas inlet temperature and binder content on growth and morphology

Powder technology - Amsterdam [u.a.]: Elsevier Science, Bd. 464 (2025), Artikel 121260, insges. 16 S.

[Imp.fact.: 4.6]

Alkadhem, Ali M.; Mohamed, Hend Omar; Hoffmann, Torsten; Fan, Jiyuan; Musteata, Valentina E.; Ogg, Stephen C.; Ruiz-Martinez, Javier; Tsotsas, Evangelos; Castaño, Pedro

Dispersing zeolite in technical catalyst particles using a top spray fluidized bed reactor for methanol to hydrocarbons reaction

The chemical engineering journal - Amsterdam : Elsevier, Bd. 509 (2025), insges. 13 S.

[Imp.fact.: 13.4]

Altaf, Haashir; Milicic, Tamara; Faber, Felix; Vidakovic-Koch, Tanja; Tsotsas, Evangelos; Vorhauer-Huguet, Nicole

Use of reconstructed pore networks for determination of effective transport parameters of commercial Ti-Felt PTLs

Processes - Basel : MDPI, Bd. 13 (2025), Heft 4, insges. 24 S.

[Imp.fact.: 2.8]

Bałdys, Weronika; Wileńska, Małgorzata; Bürger, Johannes; Blatkiewicz, Michał; Piątkowski, Marcin; Sobulska, Mariia; Hashemloo, Ziba; Kharaghani, Abdolreza; Jaskułski, Maciej

Quantitative analysis of key spray drying variables' impact on maltodextrin powder parameters

Drying technology - Philadelphia, Pa. : Taylor & Francis, Bd. 43 (2025), Heft 15-16, S. 2262-2282

[Imp.fact.: 2.7]

Beer, Katrin; Böcher, Michael; Ganzer, Caroline; Blöbaum, Anke; Engel, Lukas; Sieverding, Theresa De Paula; Sundmacher, Kai; Matthies, Ellen

Forest-based bioeconomy and bio-based chemical production in the European Union - Policy issues, institutions, actors, and instruments in a changing forest policy subsystem

Forest policy and economics - Amsterdam [u.a.]: Elsevier, Bd. 177 (2025), insges. 18 S.

[Imp.fact.: 4.0]

Bello, Ayomikun; Kharaghani, Abdolreza; Tsotsas, Evangelos

Comparative pore and continuum-scale modeling of evaporation in mixed wettability porous media

Advances in water resources - Amsterdam [u.a.]: Elsevier Science, Bd. 206 (2025), Artikel 105123, insges. 9 S.

[Imp.fact.: 4.2]

Burock, Robert; Chuzel, Léa; Kähne, Thilo; Reichl, Udo; Rapp, Erdmann; Hennig, René

Raider of the lost N-glycans - localizing rare and frequently overlooked IgG N-glycans with sulfation or bisecting LacNAc

Frontiers in molecular biosciences - Lausanne : Frontiers, Bd. 12 (2025), Artikel 1593708, insges. 15 S.

[Imp.fact.: 4.0]

Bächle, Volker; Hegde, Chinmay Laxminarayan; Voigt, Andreas; Sundmacher, Kai; Gleiß, Marco

Tailings as a source for generating valuable magnesium and calcium carbonates by leaching and carbonization
Industrial & engineering chemistry research - Columbus, Ohio : American Chemical Society, Bd. 64 (2025), Heft 24, S. 12064-12073
[Imp.fact.: 4.0]

Bürger, Johannes Vincent; Jaskulski, Maciej; Kharaghani, Abdolreza

Modeling of maltodextrin drying kinetics for use in simulations of spray drying
Drying technology - Philadelphia, Pa. : Taylor & Francis, Bd. 43 (2025), Heft 1-2, S. 214-227
[Imp.fact.: 2.7]

Chandran, Akshay; Evrard, Fabien; Wachem, van Berend

A semi-analytical transient undisturbed velocity correction scheme for wall-bounded two-way coupled Euler-Lagrange simulations
Journal of computational physics - Amsterdam : Elsevier, Bd. 520 (2025), Artikel 113496, insges. 29 S.
[Imp.fact.: 3.8]

Chandran, Akshay; Evrard, Fabien; Wachem, van Berend

Steady undisturbed velocity correction scheme for Euler-Lagrange simulations near planar walls
International journal of multiphase flow - Oxford : Pergamon Press, Bd. 191 (2025), Artikel 105305, insges. 15 S.
[Imp.fact.: 3.8]

Dam, An Phuc; Franz, Tobias; Papakonstantinou, Georgios; Sundmacher, Kai

Catalyst dissolution in PEM water electrolysis - influence of time, current density and Iridium ion transport in single-pass and recirculation water flow modes
Applied catalysis. B, Environmental - Amsterdam : Elsevier, Bd. 365 (2025), Artikel 124946, insges. 11 S.
[Imp.fact.: 21.1]

Dernbecher, Andrea; Bhaskaran, Supriya; Vorhauer-Huget, Nicole; Seidenbecher, Jakob; Gopalkrishna, Suresh; Briest, Lucas; Dieguez-Alonso, Alba

Investigation on the intra-particle anisotropic transport properties of a beech wood particle during pyrolysis
Particuology - Amsterdam : Elsevier, Bd. 98 (2025), S. 172-190
[Imp.fact.: 4.1]

Dominguez, Dayron Chang; Dam, An Phuc; Alia, Shaun M.; Richter, Thomas; Sundmacher, Kai

Application of a temporal multiscale method for efficient simulation of degradation in PEM water electrolysis under dynamic operating conditions
Computers & chemical engineering - Amsterdam [u.a.]: Elsevier Science, Bd. 198 (2025), insges. 11 S.
[Imp.fact.: 3.9]

Duch, Karsten; Kozachynskyi, Volodymyr; Rätze, Karsten H.G.; Illner, Markus; Sundmacher, Kai; Repke, Jens-Uwe

Enhancing reactive microemulsion processes - dynamic optimization and cyclic semibatch operation for the reductive amination of undecanal in a mini-plant
Industrial & engineering chemistry research - Columbus, Ohio : American Chemical Society, Bd. 64 (2025), Heft 1, S. 520-534
[Imp.fact.: 3.8]

Duill, Finn Felix; Schulz, Florian; Jain, Aman; Paucke, Nils; Wachem, van Berend

Analysis of IAQ in classrooms during COVID-19 pandemic and the effect of window ventilation and air cleaners depending on season
Building and environment - New York, NY [u.a.]: Elsevier, Bd. 270 (2025), Artikel 112484
[Imp.fact.: 1.7]

Dürr, Robert; Otto, Eric; Kok, Rudolph; Hempfling, Stefan; Duvigneau, Stefanie; Kienle, Achim; Bück, Andreas

Surrogate modeling of microbial PHA-biopolymer synthesis

Industrial & engineering chemistry research - Columbus, Ohio : American Chemical Society, Bd. 64 (2025), Heft 38, S. 18640-18655

[Imp.fact.: 4.0]

Elmestikawy, Hani; Chéron, Victor; Wachem, van Berend

On the influence of the periodic boundary conditions on the drag of random particle arrangements in PR-DNS

International journal of multiphase flow - Oxford : Pergamon Press, Bd. 185 (2025), Artikel 105143

[Imp.fact.: 3.8]

Evrard, Fabien; Chandran, Akshay; Cortez, Ricardo; Wachem, van Berend

Undisturbed velocity recovery with transient and weak inertia effects in volume-filtered simulations of particle-laden flows

Journal of computational physics - Amsterdam : Elsevier, Bd. 523 (2025), Artikel 113684, insges. 30 S.

[Imp.fact.: 3.8]

Faber, Felix; Vorhauer-Huget, Nicole; Thomik, Maximilian; Gruber, Sebastian; Först, Petra; Tsotsas, Evangelos

Pore-scale study of coupled heat and mass transfer during primary freeze-drying using an irregular pore network model

Drying technology - Philadelphia, Pa. : Taylor & Francis, Bd. 43 (2025), Heft 1-2, S. 162-182

[Imp.fact.: 2.7]

Favaro Nascimento, Raul; Men, Jialin; Ubaid, Mohammed; Düsenberg, Björn; Schmidt, Jochen; Bück, Andreas

Inter-aggregate mixing in hetero-aggregates formulated in opposed jets fluidized bed

Particuology - Amsterdam : Elsevier, Bd. 107 (2025), S. 287-299

[Imp.fact.: 4.3]

Ferreira, Daiane B.; Cunha, Lucas P.; Vorhauer-Huget, Nicole; Tsotsas, Evangelos; Thoméo, Joao C.

Extraction of spores of Metarhizium anisopliae in a rotary drum

Chemical engineering and processing - Amsterdam [u.a.]: Elsevier, Bd. 216 (2025), Artikel 110430, insges. 12 S.

[Imp.fact.: 3.9]

Ferreira, Daiane Bortolote; Messias, Ana Paula; Santos, dos Dyrney Araújo; Vorhauer-Huget, Nicole; Tsotsas, Evangelos; Thoméo, João Cláudio

Characterization of Metarhizium anisopliae spore extraction in a rotary drum using DEM method

Particuology - Amsterdam : Elsevier, Bd. 109 (2026), S. 59-74

[Imp.fact.: 4.3]

Fischer, Christin; Hamel, Christof

Nachhaltige Synthese präbiotischer Galactooligosaccharide in Molkereinebenströmen

Lebensmittel-Brief - Lampertheim : LID . - 2025, Heft 3, S. 32-33

Franz, Tobias; Miličić, Tamara; Papakonstantinou, Georgios; Vidaković-Koch, Tanja; Sundmacher, Kai

On the origin of low-frequency inductive loops in the impedance spectra of proton exchange membrane water electrolyzers

Journal of power sources - New York, NY [u.a.]: Elsevier, Bd. 655 (2025), Artikel 237981, insges. 13 S.

[Imp.fact.: 7.9]

Fuchs, Lukas; Weber, Sabrina; Men, Jialin; Eiermann, Niklas; Furat, Orkun; Bück, Andreas; Schmidt, Volker

Stochastic modeling of particle structures in spray fluidized bed agglomeration using methods from machine learning

Powder technology - Amsterdam [u.a.]: Elsevier Science, Bd. 467 (2026), Artikel 21475, insges. 15 S.

[Imp.fact.: 4.6]

Gennari, Gabriele; Gorges, Christian; Denner, Fabian; Wachem, van Berend

A marching cubes based method for topology changes in three-dimensional two-phase flows with front tracking
Journal of computational physics - Amsterdam : Elsevier, Bd. 540 (2025), Artikel 114284, insges. 27 S.
[Imp.fact.: 3.8]

Gerlach, Martin; Huxoll, Fabian; Jameel, Froze; Stein, Matthias; Seidel-Morgenstern, Andreas; Hamel, Christof; Sadowski, Gabriele

Activity-based approach to predict the effect of solvent composition on the reaction kinetics of hydroformylation
The chemical engineering journal - Amsterdam : Elsevier, Bd. 513 (2025), Artikel 162959, insges. 10 S.
[Imp.fact.: 13.2]

Goldhahn, Ruben; Minor, Ann-Joelle; Rihko-Struckmann, Liisa; Ohl, Siew-Wan; Pfeiffer, Patricia; Ohl, Claus-Dieter; Sundmacher, Kai

Recycling of bulk polyamide 6 by dissolution-precipitation in CaCl₂-EtOH-H₂O mixtures
Recycling - Basel : MDPI, Bd. 10 (2025), Heft 1, insges. 16 S.
[Imp.fact.: 4.6]

Gorges, Christian; Chéron, Victor; Chopra, Anjali; Denner, Fabian; Wachem, van Berend

Correlations for aerodynamic force coefficients of non-spherical particles in compressible flows
International journal of multiphase flow - Oxford : Pergamon Press, Bd. 184 (2025), Artikel 105111, insges. 20 S.
[Imp.fact.: 3.8]

Gorges, Christian; Evrard, Fabien; Chiodi, Robert; Wachem, van Berend; Denner, Fabian

Sharp front tracking with geometric interface reconstruction
Journal of computational physics - Amsterdam : Elsevier, Bd. 535 (2025), Artikel 114059, insges. 21 S.
[Imp.fact.: 3.8]

Göbel, Sven; Mayerlen, Ludwig; Eiser, Isabelle Yazel; Fichtmueller, Lisa; Clements, David; Reichl, Udo; Genzel, Yvonne; Lehrer, Axel T.

Process intensification for recombinant Marburg virus glycoprotein production using drosophila S2 cells
Engineering in life sciences - Weinheim : Wiley-VCH, Bd. 25 (2025), Heft 5, Artikel e70022, insges. 13 S.
[Imp.fact.: 3.0]

Göbel, Sven; Zinnecker, Tilia; Jordan, Ingo; Sandig, Volker; Vervoort, Andrea; Jong, de Jondavid; Diallo, Jean-Simon; Satzer, Peter; Satzer, Manfred; Dallmeier, Kai; Reichl, Udo; Genzel, Yvonne

Optimization of YF17D-vectored Zika vaccine production by employing small-molecule viral sensitizers to enhance yields
Vaccines - Basel : MDPI, Bd. 13 (2025), Heft 7, Artikel 757, insges. 26 S.
[Imp.fact.: 3.7]

Hausmann, Max; Wachem, van Berend

A formally exact wall-boundary condition in large eddy simulations using volume filtering
Journal of fluid mechanics - Cambridge [u.a.]: Cambridge Univ. Press, Bd. 1022 (2025), Artikel R4, insges. 12 S.
[Imp.fact.: 4.2]

Hausmann, Max; Wachem, van Berend

Wall-modeled large eddy simulations using the volume-filtering framework
Physical review fluids - College Park, MD : APS, Bd. 10 (2025), Artikel 044604, insges. 24 S.
[Imp.fact.: 2.8]

Heinks, Tobias; Hofmann, Katrin; Last, Simon; Gamm, Igor; Blach, Luise; Wei, Ren; Bornscheuer, Uwe Theo; Hamel, Christof; Langermann, von Jan

Selective modification of the product profile of biocatalytic hydrolyzed PET via product-specific medium engineering
ChemSusChem - Weinheim : Wiley-VCH, Bd. 18 (2025), Heft 6, Artikel e202401759, insges. 10 S.
[Imp.fact.: 6.6]

Heinks, Tobias; Hofmann, Katrin; Zimmermann, Lennard; Gamm, Igor; Lieb, Alexandra; Blach, Luise; Ren, Wei; Bornscheuer, Uwe T.; Thiele, Julian; Hamel, Christof; Langermann, von Jan
Analysis of the product-spectrum during the biocatalytic hydrolysis of PEF (poly(ethylene furanoate)) with various esterases
RSC sustainability - [Cambridge]: Royal Society of Chemistry, Bd. 3 (2025), Heft 3, S. 1346-1355
[Imp.fact.: 4.9]

Herzsprung, Peter; Sobolev, Aleksandr; Tümping, von Wolf; Kamjunke, Norbert; Schwidder, Michael; Lechtenfeld, Oliver J.
Temporal dynamics and intermediate product formation in DOM phototransformation revealed by liquid chromatography ultrahigh-resolution mass spectrometry
Environmental science & technology - Columbus, Ohio : American Chemical Society, Bd. 59 (2025), Heft 27, S. 13787-13797

Hoang, Tuan Son; Wormstall, Sara-Theres; Hoang, Nam-Hai; Reichl, Udo; Rexer, Thomas F. T.
Establishment of a cell-free multi-enzyme cascade for the synthesis of UDP-GalNAc
New biotechnology - New York, NY [u.a.]: Elsevier, Bd. 89 (2025), S. 20-28
[Imp.fact.: 4.9]

Hug, Laura A; Hatzenpichler, Roland; Moraru, Cristina; Soares, André R; Meyer, Folker; Heyder, Anke; Abdallah, R. Z; Abdalrahem, A; Abdulkadir, N; Adesiyani, I. M; Alteio, L; Anantharaman, K; Anderson, R; Andrei, A-S; Baeza, J. A; Bak, F; Baker, B; Bartholomäus, A; Bejerman, N; Biddle, J; Bissett, A; Blakeley-Ruiz, J. A; Block, K; Boldt, J; Bonilla-Rosso, G; Bornemann, T. L; Brauer, V. S; Brazelton, W; Bremges, A; Buelow, E; Burcham, Z.M; Cansdale, A; Caporaso, J.G; Cernava, T; Chatzigiannidou, I; Costa, R; Currie, C.R; Daebeler, A; De Anda, V; De Santiago, A; Arake de Tacca, L. M; Debelius, J; Dittami, S. M; Dong, X; Džunková, M; Edwards, A; Edwards, R; Egbert, S; Engelmann, J. C; Esser, S. P; Ettema, T. J. G; Ettinger, C. L; Petrovic Fabijan, A; Ferguson, R. M. W; Ferretti, P; Foucault, P; Fuhrman, J. A; Gada, A. M; Geesink, P; Gerhardt, I. R; Gessner, M. O; Giovannelli, D; Gittins, D; Gloor, G. B; González-Pech, R. A; Gopalakrishnappa, C; Greening, C; Gregor, R; Gregory, A. C; Grossart, A.-P; Groussin, M; Valenzuela Guerrero, B; Guzel, M; Hamamura, N; Hamilton, T. L; Hamm, J. N; Hart, L; Hassenrück, C; Hay, M; Hechler, R. M; Hellwig, Patrick; Henson, M; Herold, M; Hesketh-Best, P. J; Hess, M; Hillary, L; Hitch, T. C; Hivarkar, S. S; Hoff, K. J; Hom, E. F; Hou, S; Hugerth, L. W; Hwang, Y; Ilott, N; Jay, Z. J; Jungbluth, S. P; Karimi, E; Kaspareit, Y. M; Keating, C; Kellom, M; Kiledal, E. A; Klarenberg, I; Knight, R; Koech, A. K; Koonin, E. V; Kormas, K; Kujala, K; Kyrides, N. C; La Rosa, S. L; Laczny, C. C; Lahmers, K; Lan, X; Lateef, A. A; Lau, S. H; Leese, F; Lezcano, M. Á; Li, S. S; Lima, R. N; Lücker, S; Mahnert, A; Majidian, S; Malfertheiner, L; Marshall, A; Meaden, S; Meehan, C. J; Meier, D. V; Melkonian, C; Mende, D. R; Meyer, J. L; Michoud, G; Mikryukov, V; Miravet-Verde, S; Muschiol, J; Nata'ala, M. K; Neufeld, J. D; Neuhauser, S; Osuolale, O; Osvatic, J; Pappas, K. M; Parks, D. H; Parry, R. H; Pascoal, P. V; Pavloudi, C; Peyton, B; Plewka, J; Poyet, M; Priest, T; Quaye, E. K; Ramganesh, S; Rattei, T; Rausch, P; Rech, E; Rinke, C; Robinson, C; Rodríguez-Gijón, A; Rodriguez-R, L. M; Rohwer, R. R; Roloff, T; Rothman, J. A; Rückert, S; Ruff, S. E; Saini, J. S; Santiago-Martínez, M. G; Santoferrara, L; Sarhan, M. S; Saw, J. H; Sbaffi, T; Schäfer, R. B; Schaible, G; Schloter, M; Schmitz, R. A; Schubert, C; Schwengers, O; Sehnal, L; Sekar, J; Seyoum, M. M; Shah, M. B; Sharon, I; Siebers, B; Sieradzki, E. T; Skliros, D; Snoeyenbos-West, O. L; Sorbie, A; Speth, D. R; Sprehn, C. G; Srivastava, P; Stach, T. L; Stajich, J. E; Starke, J; Steen, A. D; Stöckl, R; Stoikidou, T; Stopnisek, N; Sukumaran, R; Sures, B; Suzuki, S; Tamarit, D; Thieringer, P; Tito, R. Y; Trivedi, C. B; Trubl, G; Truu, J; Tsiknia, M; Ugalde, J; Valentin-Alvarado, L. E; Vázquez-Campos, X; Vierheilig, J; von Meijenfeldt, F. A. B; Wagner, M; Walsh, C. J; Wang, S; Wang, Y; Wegner, C.-E; Weir, T; Weiss, L. C; Weissman, J. L; Wichels, A; Williams, C. L; Williams, T. A; Worden, A. Z; Woyke, T; Wu, M; Xiu, W; Zhang, Y; Zhu, J; Ziels, R. M; Zwirzitz, B; Probst, Alexander J

A roadmap for equitable reuse of public microbiome data
Nature microbiology - London : Nature Publishing Group, Bd. 10 (2025), Heft 10, S. 2384-2395

Jacobtorweihe, Lennart; Göbel, Sven; Wolschek, Markus; Altomonte, Jennifer; Reichl, Udo; Genzel, Yvonne
High cell density perfusion process of quail cells producing oncolytic rVSV-NDV
Engineering in life sciences - Weinheim : Wiley-VCH, Bd. 25 (2025), Heft 7, Artikel e70035, insges. 11 S.
[Imp.fact.: 3.0]

Jain, Aman Kumar; Dennerb, Fabian; Wachem, van Berend

Self-sorting of bidisperse particles in evaporating sessile droplets

International journal of multiphase flow - Oxford : Pergamon Press, Bd. 193 (2025), Artikel 105382, insges. 20 S.

[Imp.fact.: 3.8]

Jamali, D. H.; Ganzer, C.; Sundmacher, Kai

Hydrogen network topology optimization by MINLP - comparing retrofit with new-built design scenarios

Applied energy - Amsterdam [u.a.]: Elsevier Science, Bd. 400 (2025), Artikel 126292, insges. 14 S.

[Imp.fact.: 13.8]

Janodet, Romain; Wachem, van Berend; Denner, Fabian

A fully-coupled algorithm with implicit surface tension treatment for interfacial flows with large density ratios

Journal of computational physics - Amsterdam : Elsevier, Bd. 520 (2025), Artikel 113520, insges. 22 S.

[Imp.fact.: 3.8]

Keßler, Tobias; Plate, Christoph; Behrens, Jessica; Martensen, Carl J.; Leipold, Johannes; Kaps, Lothar; Seidel-Morgenstern, Andreas; Sager, Sebastian; Kienle, Achim

Two degrees of freedom control of a multistage power-to-methanol reactor

Computers & chemical engineering - Amsterdam [u.a.]: Elsevier Science, Bd. 192 (2025), Artikel 108893, insges. 9 S.

[Imp.fact.: 3.9]

Khurram Faridi, Ibtihaj; Tsotsas, Evangelos; Heineken, Wolfram; Koegler, Marcus; Kharaghani, Abdolreza

Development of a neural network model predictive controller for the fluidized bed biomass gasification process

Chemical engineering science - Amsterdam [u.a.]: Elsevier Science, Bd. 293 (2025), Artikel 120000, insges. 18 S.

[Imp.fact.: 4.3]

Kirschtowski, Sabine; Jameel, Froze; Kumar, Pascal; Stein, Matthias; Gerlach, Martin; Hamel, Christof

Mechanistic kinetic modeling of the rhodium-catalyzed hydroaminomethylation of 1-decene - influence of hydrogen on catalyst species by forced gas phase perturbations

Industrial & engineering chemistry research - Columbus, Ohio : American Chemical Society, Bd. 64 (2025), Heft 25, S. 12558-12576

[Imp.fact.: 4.0]

König-Mattern, Laura; Rihko-Struckmann, Liisa; Sundmacher, Kai

Systematic solvent selection enables the fractionation of wet microalgal biomass

Separation and purification technology - Amsterdam [u.a.]: Elsevier Science, Bd. 354 (2025), Heft Part 8, Artikel 129462, insges. 11 S.

[Imp.fact.: 8.2]

König-Mattern, Laura; Sanchez Medina, Edgar I.; Komarova, Anastasia O.; Linke, Steffen; Rihko-Struckmann, Liisa; Luterbacher, Jeremy S.; Sundmacher, Kai

Machine learning-supported solvent design for lignin-first biorefineries and lignin upgrading

The chemical engineering journal - Amsterdam : Elsevier, Bd. 495 (2025), Artikel 153524, insges. 14 S.

[Imp.fact.: 13.2]

Küchler, Jan; Opitz, Patricia; Jordan, Ingo; Genzel, Yvonne; Benndorf, Dirk; Reichl, Udo

Quantification of intracellular influenza A virus protein dynamics in different host cells after seed virus adaptation

Applied microbiology and biotechnology - Berlin : Springer, Bd. 109 (2025), Artikel 74, insges. 17 S.

[Imp.fact.: 3.9]

Küchler, Jan; Zinnecker, Tilia; Hellwig, Patrick; Wolf, Maximilian; Benndorf, Dirk; Genzel, Yvonne; Reichl, Udo

Quantitative analysis of proteomic changes in two monoclonal suspension MDCK cell lines infected with human influenza A virus (H1N1)

PLOS ONE - San Francisco, California, US : PLOS, Bd. 20 (2025), Heft 10, Artikel e0327939, insges. 18 S.

[Imp.fact.: 3.5]

Leipold, Johannes; Nikolic, Daliborka; Seidel-Morgenstern, Andreas; Kienle, Achim

Optimization of methanol synthesis under forced periodic operation in isothermal fixed-bed reactors

Computers & chemical engineering - Amsterdam [u.a.]: Elsevier Science, Bd. 196 (2025), Artikel 109040

Malekjani, Narjes; Kharaghani, Abdolreza; Tsotsas, Evangelos

A comparative study of dimensional and non-dimensional inputs in physics-informed and data-driven neural networks for single-droplet evaporation

Chemical engineering science - Amsterdam [u.a.]: Elsevier Science, Bd. 306 (2025), Artikel 121214, insges. 14 S.
[Imp.fact.: 4.1]

Malekjani, Narjes; Kharaghani, Abdolreza; Tsotsas, Evangelos

Physics-informed and data-driven neural networks with dimensional and non-dimensional inputs for single-droplet evaporation - investigating the role of increasing physical complexity in predictive ability

Chemical engineering science - Amsterdam [u.a.]: Elsevier Science, Bd. 316 (2025), S. 17, Artikel 121911

Men, Jialin; Ajalova, Aisel; Tsotsas, Evangelos; Bück, Andreas

Inferential online measurement of 3D fractal dimension of spray fluidized bed agglomerates

Processes - Basel : MDPI, Bd. 13 (2025), Heft 7, Artikel 2316, insges. 14 S.

[Imp.fact.: 2.8]

Minor, Ann-Joelle; Sanchez Medina, Edgar Ivan; Goldhahn, Ruben; Linke, Steffen; Rihko-Struckmann, Liisa; Sundmacher, Kai

Chemical recycling of nylon 6 using ionic liquids - from solvent screening to techno-economic assessment

Separation and purification technology - Amsterdam [u.a.]: Elsevier Science, Bd. 386 (2026), Artikel 136502

[Imp.fact.: 9.0]

Oliveira, Kamila de Sá; Kharaghani, Abdolreza; Tsotsas, Evangelos; Bojorge Ramirez, Ninoska Isabel; Freitas, Suely Pereira

Characterizing the drying behavior and particle morphology of functional oil emulsions through single droplet drying experiments

Drying technology - Philadelphia, Pa. : Taylor & Francis, Bd. 43 (2025), Heft 3, S. 575-593

[Imp.fact.: 2.7]

Perterson, Luisa; Gosea, Ion Victor; Benner, Peter; Sundmacher, Kai

Digital twins in process engineering - an overview on computational and numerical methods

Computers & chemical engineering - Amsterdam [u.a.]: Elsevier Science, Bd. 193 (2025), insges. 21 S.

[Imp.fact.: 3.9]

Pour, Yehonatan David; Krasovitov, Boris; Fominykh, Andrew; Hashemloo, Ziba; Kharaghani, Abdolreza; Tsotsas, Evangelos; Levy, Avi

Effect of nonisothermal gas absorption on drying of acoustically levitated wet porous granules

Drying technology - Philadelphia, Pa. : Taylor & Francis, Bd. 43 (2025), Heft 11-12, S. 1728-1741

[Imp.fact.: 2.7]

Qin, Hao; Zhang, Xiang; Ruan, Jiawei; Sundmacher, Kai

Screen ammonium-based deep eutectic solvents for CO₂ capture - extended UNIFAC-DES, calibrated COSMO-RS, and experiment

AIChE journal / American Institute of Chemical Engineers - Hoboken, NJ : Wiley . - 2025, insges. 12 S. ;

[Online first]

[Imp.fact.: 4.0]

Refas, Ibtissem; Amiali, Malek; George, Oluwafemi Ayodele; Le, Kieu Hiep; Malekjani, Narjes; Kharaghani, Abdolreza

Bioactive composition, microstructure, and physicochemical properties of *Arbutus unedo* berries dried using different techniques

Journal of stored products research - Amsterdam [u.a.]: Elsevier Science, Bd. 111 (2025), Artikel 102501, insges. 11 S.

[Imp.fact.: 2.8]

Ren, Jinbo; Liao, Minjie; Qian, Yining; Yuan, Xin; Li, Jiahao; Ma, Lingjun; Miao, Song; Reitmaier, Michael; Kharaghani, Abdolreza; Först, Petra; Kulozik, Ulrich; Ji, Junfu
Toward improving the rehydration of dairy powders - a comprehensive review of applying physical technologies
Comprehensive reviews in food science and food safety - Hoboken, NJ : Wiley, Bd. 24 (2025), Heft 2, Artikel e70154, insges. 31 S.
[Imp.fact.: 14.1]

Rodrigues, Simson Julian; Kazemi, Neda; Tsotsas, Evangelos
Local-scale variability in packed beds of polyhedral particles - structural and thermal distribution
Powder technology - Amsterdam [u.a.]: Elsevier Science, Bd. 451 (2025), Artikel 120461, insges. 16 S.
[Imp.fact.: 4.5]

Schenke, Sören; Sewerin, Fabian; Wachem, van Berend; Denner, Fabian
Wave-DNA - a software tool for simulating nonlinear acoustic waves emitted by moving boundaries
SoftwareX - Amsterdam [u.a.]: Elsevier, Bd. 30 (2025), Artikel 102101, insges. 6 S.
[Imp.fact.: 2.4]

Sethi, Sahil; Zhang, Xiang; Sundmacher, Kai
Process-driven solvent screening for efficient extractive distillation using interpolative rational functions
Chemical engineering science - Amsterdam [u.a.]: Elsevier Science, Bd. 301 (2025), insges. 14 S.
[Imp.fact.: 4.1]

Svitnič, Tibor; Sundmacher, Kai
Cost-scaling of large Power-to-Methanol plants supplied with wind power and CO₂ from direct air capture - a Chile case study
Energy conversion and management - Amsterdam [u.a.]: Elsevier Science, Bd. 345 (2025), Artikel 120343, insges. 19 S.
[Imp.fact.: 7.6]

Svoboda, Tomás; Henke, Svatopluk; Gillarová, Simona; Sluková, Marcela; Isoz, Martin; Hamel, Christof
Model-based scaling of preparative chromatographic separation of sucrose and glucose using bilevel parameter estimation for equilibrium dispersive model with nonlinear isotherm
Journal of chromatography - New York, NY [u.a.]: Science Direct, Bd. 1757 (2025), Artikel 466135, insges. 12 S.
[Imp.fact.: 4.0]

Wachem, van Berend; Elmestikawy, Hani; Chandran, Akshay; Hausmann, Max
A new paradigm for computing hydrodynamic forces on particles in Euler-Lagrange point-particle simulations
Journal of fluid mechanics - Cambridge [u.a.]: Cambridge Univ. Press, Bd. 1018 (2025), Artikel A41, insges. 21 S.
[Imp.fact.: 4.2]

Walter, Jan Paul; Hoffmann, Carina; Wolff, Tanya; Hamel, Christof
"Influence of coke on intraparticle mass and heat transfer during coking and regeneration phases of the thermal propane dehydrogenation - view inside a single catalyst particle"
The chemical engineering journal - Amsterdam : Elsevier, Bd. 523 (2025), Artikel 168215, insges. 17 S.
[Imp.fact.: 13.2]

Wang, Rui; Ajalova, Aisel; Kolan, Subash Reddy; Hoffmann, Torsten; Chen, Kaicheng; Tsotsas, Evangelos
Representation of aggregates from their two-dimensional images for primary particles of different sizes
Powder technology - Amsterdam [u.a.]: Elsevier Science, Bd. 451 (2025), Artikel 120465, insges. 11 S.
[Imp.fact.: 4.5]

Wang, Rui; Chen, Kaicheng; Kolan, Subash Reddy; Tsotsas, Evangelos
Estimation of morphological properties in aggregates from 2D data based on machine learning method
Powder technology - Amsterdam [u.a.]: Elsevier Science, Bd. 469 (2026), Artikel 121801, insges. 15 S.
[Imp.fact.: 4.6]

Wang, Zihao; Zhou, Teng; Sundmacher, Kai

BayesCAMPD - data-efficient and closed-loop integrated molecular and process design using Bayesian optimization
AIChE journal / American Institute of Chemical Engineers - Hoboken, NJ : Wiley . - 2025, insges. 11 S. ;
[Online first]
[Imp.fact.: 4.0]

Wolf, Maximilian; Lange, Julian; Benndorf, Dirk; Welz, Lina; Nikolaus, Susanna; Siever, Laura Katharina; Tran, Florian; Schallert, Kay; Hellwig, Patrick; Schreiber, Stefan; Gunzer, Matthias; Rosenstiel, Philip; Reichl, Udo; Adolph, Timon; Jukic, Almina; Aden, Konrad; Heyer, Robert
Fecal metaproteomics enables functional characterization of remission in patients with inflammatory bowel disease
Journal of proteomics - New York, NY [u.a.]: Elsevier, Bd. 318 (2025), S. 1-11, Artikel 105455, 1 Online-Ressource (11 Seiten)
[Imp.fact.: 2.8]

Zhan, Mingxiu; Zhan, Ninghua; Zhang, Jingchi; Jiang, Hongjie; Jiao, Wentao; Wang, Jinqing; Shan, Yongping; Xu, Xu; Kharaghani, Abdolreza; Tsotsas, Evangelos; Wu, Rui
Role of PFAS in gas–liquid displacement in unsaturated porous media - a pore-scale study
Journal of hydrology - Amsterdam [u.a.]: Elsevier, Bd. 664 (2026), Artikel 134471, insges. 11 S.
[Imp.fact.: 6.3]

Zhang, Wei; Bück, Andreas; He, Zhixia; Tsotsas, Evangelos; Jiang, Zhaochen
Simulation of transport phenomena and electrochemical reaction in the PEMFC catalyst layer using a dual network coupled agglomerate model
Energy conversion and management - Amsterdam [u.a.]: Elsevier Science, Bd. 345 (2025), Artikel 120406, insges. 16 S.
[Imp.fact.: 10.9]

Zhang, Wei; Lu, Xiang; Bück, Andreas; He, Zhixia; Tsotsas, Evangelos; Jiang, Zhaochen
Pore network simulation of HT-PEMFC GDL using radical Voronoi tessellation - analysis of oxygen, phosphoric acid solution, and charge transport
International journal of heat and mass transfer - Amsterdam [u.a.]: Elsevier, Bd. 246 (2025), Artikel 127025, insges. 14 S.
[Imp.fact.: 5.8]

Zimmermann, Ronny Tobias; Sundmacher, Kai

Kern-Schale-Katalysatorpellets - Das Gelbe vom Ei für den lastflexiblen Festbett-Reaktorbetrieb?
Chemie - Ingenieur - Technik - Weinheim : Wiley-VCH Verl., Bd. 97 (2025), Heft 5, S. 411-420
[Imp.fact.: 1.5]

Zinnecker, Tilia; Thiele, Kristin; Schmidberger, Timo; Genzel, Yvonne; Reichl, Udo
Influenza A virus production following quality by design principles
Engineering in life sciences - Weinheim : Wiley-VCH, Bd. 25 (2025), Heft 4, Artikel e70027, insges. 11 S.
[Imp.fact.: 3.9]

Zinnecker, Tilia; Wicke, Emelie; Reichl, Udo; Göbel, Sven; Genzel, Yvonne

Seed train intensification and TFDF-based perfusion for MDCK cell-based influenza a virus production
Processes - Basel : MDPI, Bd. 13 (2025), Heft 5, Artikel 1286, insges. 21 S.
[Imp.fact.: 2.8]

Zuniga-Banuelos, Frania J.; Lemke, Greta; Hoffmann, Marcus; Reichl, Udo; Rapp, Erdmann

Immunoglobulin A carries sulfated and O-acetylated N-glycans primarily at the tailpiece site – strategies for site-specific N-glycan identification
Frontiers in molecular biosciences - Lausanne : Frontiers, Bd. 12 (2025), Artikel 1595173, insges. 19 S.
[Imp.fact.: 4.0]

BEGUTACHTETE BUCHBEITRÄGE

Gosea, Ion Victor; Peterson, Luisa; Goyal, Pawan; Bremer, Jens; Sundmacher, Kai; Benner, Peter

Learning reduced-order quadratic-linear models in process engineering using operator inference

Numerical mathematics and advanced applications ENUMATH 2023, Volume 1 / European Conference on Numerical Mathematics and Advanced Applications , 2023 - Cham : Springer . - 2025, S. 365-376 - (Lecture notes in computational science and engineering; volume 153) ;

[Konferenz: European Conference on Numerical Mathematics and Advanced Applications, ENUMATH 2023, Lisbon, Portugal, in September 2023]

Heyer, Robert; Wolf, Maximilian; Benndorf, Dirk; Uzzau, Sergio; Seifert, Jana; Grenga, Lucia; Pabst, Martin; Schmitt, Heike; Mesuere, Bart; Van Den Bossche, Tim; Haange, Sven-Bastiaan; Jehmlich, Nico; Di Luca, Mariagrazia; Ferrer, Manuel; Serrano-Villar, Sergio; Armengaud, Jean; Bode, Helge B.; Hellwig, Patrick; Robbe Masselot, Catherine; Léonard, Renaud; Wilmes, Pau

Metaproteomics in the one health framework for unraveling microbial effectors in microbiomes

Microbiome - London : Biomed Central, Bd. 13 (2025), Heft 1, insges. 21 S.

NICHT BEGUTACHTETE BUCHBEITRÄGE

Briest, Lucas; Wagner, Ralf; Tretau, Anne; Ganß, M.; Ujjani Narasimhaiah, Akshay; Tsotsas, Evangelos; Vorhauer-Huget, Nicole

In-situ temperature monitoring during microwave heating using fiber-optic sensors

2nd International Workshop on Reacting Particle-Gas Systems , 2025 - Magdeburg : [Otto von Guericke University Magdeburg]; Thévenin, Dominique *1966-*, S. 187-189 ;

[Workshop: 2nd international workshop on reacting particle-gas systems, Magdeburg, 16. - 18. June 2025]

Faber, Felix; Bhaskaran, Supriya; Dieguez-Alonso, Alba; Wagner, Ralf; Vorhauer-Huget, Nicole

Methodology for derivation of effective heat transfer properties by pore network modeling

2nd International Workshop on Reacting Particle-Gas Systems , 2025 - Magdeburg : [Otto von Guericke University Magdeburg]; Thévenin, Dominique *1966-*, S. 76-78 ;

[Workshop: 2nd international workshop on reacting particle-gas systems, Magdeburg, 16. - 18. June 2025]

Mondal, Rahul; Ignatova, Evelina; Heinzmann, Jonas; Do, Minh Dung; Murali, Abhivanth; Walke, Daniel; Cato, Patrick; Becker, Robert A.; Bleistein, Thomas; Saake, Gunter; Braneske, David; Heyer, Robert

SimKit - similarity graphs, eigendecomposition and spectral clustering in Neo4j

2025 IEEE International Conference on High Performance Computing and Communications (HPCC) - Piscataway, NJ : IEEE, S. 985-991 ;

[Konferenz: 2025 IEEE International Conference on High Performance Computing and Communications, HPCC, Exeter, United Kingdom, 13-15 August 2025]

Ujjani Narasimhaiah, Akshay; Schmidt, Albrecht; Briest, Lucas; Tretau, Anne; Wagner, Ralf; Tsotsas, Evangelos; Vorhauer-Huget, Nicole

Modelling a lab-scale microwave dryer for thermally thick materials

2nd International Workshop on Reacting Particle-Gas Systems , 2025 - Magdeburg : [Otto von Guericke University Magdeburg]; Thévenin, Dominique *1966-*, S. 128-130 ;

[Workshop: 2nd international workshop on reacting particle-gas systems, Magdeburg, 16. - 18. June 2025]

DISSERTATIONEN

Wu, Wencong; Tsotsas, Evangelos [AkademischeR BetreuerIn]; Bück, Andreas [AkademischeR BetreuerIn]

Prediction of particle mixing in rotary drums by DEM data-driven models

Magdeburg: Universitätsbibliothek, Dissertation Otto-von-Guericke-Universität Magdeburg, Fakultät für Verfahrens- und Systemtechnik 2025, 1 Online-Ressource (xi, 164 Blätter, 52,84 MB) ;

[Literaturverzeichnis: Blatt 151-160]