



FAKULTÄT FÜR VERFAHRENS-  
UND SYSTEMTECHNIK

# Forschungsbericht 2017

# FAKULTÄT FÜR VERFAHRENS- UND SYSTEMTECHNIK

Universitätsplatz 2, Gebäude 10, 39106 Magdeburg  
Tel. +49 (0)391 67 58443, Fax +49 (0)391 67 41252

## 1. Leitung

Prof. Dr.-Ing. habil. Dominique Thévenin (Dekan)  
Prof. Dr.-Ing. habil. Evangelos Tsotsas (Prodekan)  
Prof. Dr.-Ing. Eckehard Specht (Studiendekan)

## 2. Institute

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

## 3. Forschungsprofil

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

## 4. Kooperationen

- Max-Planck-Institut für Dynamik komplexer technischer Systeme

## 5. Veröffentlichungen

### **Dissertationen**

#### **Abdelsamie, Abouelmagd; Thévenin, Dominique [GutachterIn]**

Direct numerical simulations of turbulent flow and spray combustion. - Magdeburg, 2017, xxv, 165 Seiten, Illustrationen  
[Literaturverzeichnis: Seite 151-165]

#### **Abdelwahab, Abdulkadir Ahmed Alnour A.; Specht, Eckehard [GutachterIn]; Herz, Fabian [GutachterIn]**

Modeling of solid reaction behavior in direct heated rotary kilns. - Magdeburg, 2017, X, 133 Seiten, Illustrationen

[Literaturverzeichnis: Seite 111-116]

**Al-Khalaf, Ali Mohammed Ridha; Specht, Eckehard [GutachterIn]; Thévenin, Dominique [GutachterIn]**

Experimental and numerical analysis of flow mixing in packed beds. - Magdeburg, 2017, viii, 131 Seiten, Illustrationen, 30 cm

[Literaturverzeichnis: Seite 127-129]

**Bensmann, Boris; Sundmacher, Kai [AkademischeR BetreuerIn]**

Systemanalyse der Druckwasser-Elektrolyse im Kontext von Power-to-Gas-Anwendungen. - Magdeburg, 2017, xv, 151 Seiten, Illustrationen, Diagramme, 21 cm

[Literaturverzeichnis: Seite 139-151]

**Do, Nga Thi Quynh; Sundmacher, Kai [GutachterIn]**

Model-based analysis of an electro-enzymatic system for glucose oxidation. - Magdeburg, 2017, vi, 136 Seiten, Illustrationen

[Literaturverzeichnis: Seite 117-128]

**Eger, Toni; Specht, Eckehard [AkademischeR BetreuerIn]; Thévenin, Dominique [AkademischeR BetreuerIn]**

Zur Analyse und Bewertung der Wärmeübertragung am Beispiel von elektrischen Generatoren. - Aachen Shaker Verlag, 2017, 1. Auflage, ix, 210 Seiten, 58 Illustrationen, Diagramme, 21 cm, 333 g - (Berichte aus der Strömungstechnik), ISBN 978-3-8440-5470-5

**Eshghinejadfard, Amir; Thévenin, Dominique [AkademischeR BetreuerIn]**

Lattice Boltzmann simulation of laminar and turbulent two-phase flows. - Magdeburg, 2017, xx, 144 Seiten, Illustrationen

[Literaturverzeichnis: Seite 122-136]

**Fachet, Melanie; Sundmacher, Kai [AkademischeR BetreuerIn]**

Systematic analysis of carotenogenesis in microalgae for model-based process design. - Magdeburg, 2017, xviii, 165 Seiten, Illustrationen

**Galan, Kamila Gabriela**

Continuous preferential crystallization of enantiomers - simulation, analysis, process design and experimental validation. - [Barleben] Docupoint Wissenschaft [2017], xxii, 115 Seiten, Illustrationen, Diagramme, 21 cm - (Docupoint Wissenschaft), ISBN 978-3-86912-219-9

**Hentschel, Benjamin; Sundmacher, Kai [AkademischeR BetreuerIn]**

Optimal reaction route for hydroformylation of long-chain olefins in thermomorphic solvent systems. - Magdeburg, 2017, xv, 150 Seiten, Illustrationen, Diagramme, 30 cm

[Literaturverzeichnis: Seite 143-150]

**Heyer, Robert Steven; Reichl, Udo [GutachterIn]**

Charakterisierung von mikrobiellen Gemeinschaften aus Biogasanlagen mittels Metaproteomanalyse und Korrelationen der Ergebnisse zu den Prozessparametern. - Magdeburg, 2017, XVII, 164, xxxvii Blätter, Illustrationen

**Hoffmann, Torsten; Tsotsas, Evangelos [GutachterIn]; Peglow, Mirko [GutachterIn]; Bück, Andreas [GutachterIn]**

Experimentelle Untersuchungen des Einflusses von verschiedenen Prozessparametern auf das Partikelwachstum bei der Wirbelschicht-Sprühgranulation. - Magdeburg, 2017, XVIII, 137 Blätter, Illustrationen, Diagramme

[Literaturverzeichnis: Blatt 115-119]

**Horváth, Zoltán; Seidel-Morgenstern, Andreas [AkademischeR BetreuerIn]**

Kontinuierliche chromatographische Trennung gekoppelt mit kontinuierlich betriebenen Reaktoren und nachgeschalteten Trennprozessen. - Aachen Shaker Verlag, 2017, 1. Auflage, 156 Seiten, Illustrationen, Diagramme, 21 cm, 264 g - (Forschungsberichte aus dem Max-Planck-Institut für Dynamik komplexer technischer Systeme; Band 48), ISBN 978-3-8440-5629-7;

[Literaturverzeichnis: Seite 141-149]

**McBride, Kevin; Sundmacher, Kai [AkademischeR BetreuerIn]**

Model-based process design and solvent selection for the efficient recovery of homogeneous catalyst in chemicals production. - Magdeburg, 2017, xv, 170 Seiten, Illustrationen  
[Literaturverzeichnis: Seite [157]-169]

**Melcher, Thomas; Specht, Eckehard [AkademischeR BetreuerIn]; Krause, Ulrich [AkademischeR BetreuerIn]**

Reproduzierbarkeit von Brandversuchen - experimentelle und numerische Betrachtungen. - Barleben docupoint GmbH, 2017, xxiii, 200 Seiten, Illustrationen, Diagramme, 21 cm - (Docupoint Wissenschaft), ISBN 978-3-86912-129-1

**Moghaddam, Alireza Attari; Tsotsas, Evangelos [AkademischeR BetreuerIn]; Thévenin, Dominique [AkademischeR BetreuerIn]**

Parameter estimation and assessment of continuum models of drying on the basis of pore network simulations. - Barleben docupoint Verlag, 2017, xiii, 129 Seiten, Diagramme, 21 cm - (Docupoint Wissenschaft; Micro-macro transactions; Volume 27), ISBN 978-3-86912-130-7

**Pieler, Michael Martin; Reichl, Udo [GutachterIn]**

Investigation of influenza virus particle aggregation and purification with magnetic sulfated cellulose particles. - Magdeburg, 2017, xxv, 97 Seiten, Illustrationen  
[Literaturverzeichnis: Seite 61-72]

**Rein, Carsten; Specht, Eckehard [AkademischeR BetreuerIn]; Herz, Fabian [AkademischeR BetreuerIn]**

Analyse und Optimierung von wassergekühlten Transportrollen in Vorwärmöfen von Bandverzinkungsanlagen. - Magdeburg, 2017, XII, 108, XIII - XXVIII Seiten, Illustrationen  
[Literaturverzeichnis: Seite XIII-XVII]

**Saad, Rania Abdalla Babiker; Köser, Heinz [AkademischeR BetreuerIn]**

Influence of system type, loading regimes and helophyte species on inorganic sulfur transformations in constructed wetlands. - Magdeburg, 2017, xx, 112 Seiten, Illustrationen, Diagramme, Karten, 30 cm  
[Literaturverzeichnis: Seite 99-108]

**Santos da Silva, Francisco Vitor; Kienle, Achim [AkademischeR BetreuerIn]; Seidel-Morgenstern, Andreas [AkademischeR BetreuerIn]**

Analysis and design of center-cut separations using 8-zone simulated moving bed chromatography. - Magdeburg, 2017, 161 Seiten, Illustrationen, Diagramme, 30 cm  
[Literaturverzeichnis: Seite 142-153]

**Todorova, Zinaida Ivanova; Scheffler, Franziska [GutachterIn]; Krüger, Manja [GutachterIn]**

Einfluss der Oberflächenmodifizierung auf die Fließigenschaften von kohäsiven Schüttgütern. - Barleben, docupoint Verlag, 2017, X, 136 Seiten, Illustrationen, Diagramme - (Docupoint Wissenschaft; Micro-macro transactions; Volume 29), ISBN 978-3-86912-137-6;  
[Literaturverzeichnis: Seite 127-132]

**Tran, Thi Thu Hang; Tsotsas, Evangelos [GutachterIn]; Peglow, Mirko [GutachterIn]**

From single droplet to spray tower drying of dairy solutions. - Barleben docupoint GmbH, 2017, xiv, 136 Seiten, Illustrationen, Diagramme, 21 cm, ISBN 978-3-86912-214-4;  
[Sprache der Zusammenfassung: Deutsch; Literaturverzeichnis: Seite 100-105]

**Varnicic, Miroslava; Sundmacher, Kai [AkademischeR BetreuerIn]**

Novel electroenzymatic process for gluconic acid production. - Magdeburg, 2017, ix, 146 Seiten, Illustrationen, 30 cm  
[Literaturverzeichnis: Seite 132-146]

# INSTITUT FÜR STRÖMUNGSTECHNIK UND THERMODYNAMIK

Universitätsplatz 2, 39106 Magdeburg  
Tel. +49 (0)391 67 58576, Fax +49 (0)391 67 12762  
frank.beyrau@ovgu.de

## 1. Leitung

Prof. Dr.-Ing. F. Beyrau (geschäftsführender Leiter)  
Prof. Dr.-Ing. D. Thévenin  
Prof. Dr.-Ing. E. Specht

## 2. HochschullehrerInnen

Prof. Dr.-Ing. F. Beyrau (Lehrstuhl für Technische Thermodynamik)  
Prof. Dr.-Ing. E. Specht (Lehrstuhl für Thermodynamik und Verbrennung)  
Prof. Dr.-Ing. D. Thévenin (Lehrstuhl für Strömungsmechanik und Strömungstechnik)  
Prof. Dr.-Ing. (i. R.) J. Schmidt  
Prof. Dr.-Ing. Dr. h.c. (i. R.) H. J. Kecke  
Jun.-Prof. Dr. B. Fond  
PD Dr.-Ing. habil. Gábor Janiga

## 3. Forschungsprofil

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

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

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

- Industrieofenprozesse: Wärmeübergangsbedingungen in Tunnelöfen, Wärmeübergangsmessungen in einem Versuchsrohröfen, Simulation des Kalkbrennens in Schachtöfen, Simulation von Prozessen in Drehrohröfen. Simulation des Sinterns von Keramik in Tunnelöfen.
- Berechnung von Flammen. Optimierung von Brennern und Luftzuführung für Ausbrand, Flammenlänge, Vermischung und Vergleichmäßigung.

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

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

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

#### **4. Serviceangebot**

Wir bieten unter anderem:

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

## 5. Methoden und Ausrüstung

Am Institut stehen hochqualitative Messmethoden und numerische Simulationsprogramme zur Verfügung. Details hierzu finden Sie auf den jeweiligen Internetseiten der Lehrstühle.

## 6. Kooperationen

- Fraunhofer-Institut für Fabrikbetrieb und -automatisierung IFF, Magdeburg
- Prof. Andreas Seidel-Morgenstern, MPI Magdeburg
- Prof. Bernhard Preim, Inst. für Simulation und Grafik, FIN
- Prof. Georg Rose, Lehrstuhl für Medizinische Telematik und Medizintechnik, FEIT
- Prof. Gunther Brenner, T.U. Clausthal
- Prof. Jens Strackeljan, IFME
- Prof. Kai Sundmacher, MPI Magdeburg
- Prof. Klaus Tönnies, Inst. für Simulation und Grafik, FIN
- Prof. Martin Skalej, Zentrum für Radiologie, FME
- Prof. Szilard Szabo, University of Miskolc (Ungarn)
- Prof. Udo Reichl, MPI Magdeburg
- Prof. Ulrich Maas (KIT, Technische Thermodynamik)
- Prof. Uwe Riedel, Univ. Stuttgart & DLR
- Prof. Volker John, Freie Universität Berlin
- Volkswagen AG Wolfsburg

## 7. Forschungsprojekte

**Projektleitung:** Prof. Dr.-Ing. Frank Beyrau

**Förderer:** Land (Sachsen-Anhalt); 01.01.2016 - 31.12.2018

### **Competence in Mobility COMO, Zwei Teilprojekte zur thermischen Optimierung im E-Fahrzeug**

Die Reichweitensicherung von Elektrofahrzeugen unter winterlichen Bedingungen stellt eine Herausforderung für die einzusetzende Akkumulortechnologie dar. Im Rahmen des Teilprojektes Gesamtfahrzeug ist hier eine thermisch optimale Betriebsstrategie für die Fahrzeugbatterie, den Fahrgastraum sowie weitere relevante Komponenten zu entwickeln.

Im Rahmen des Teilprojektes Antriebsstrang wird für einen Radnabenmotor mit hoher Leistungsdichte eine Optimierung der bisherigen Kühlkanalgeometrie vorgenommen und im weiteren Verlauf eine Weiterentwicklung der Kühlung unter Anwendung von kleinen charakteristischen Längen sowie einer Mehrphasenkühlung angestrebt.

---

**Projektleitung:** Prof. Dr.-Ing. Frank Beyrau

**Projektbearbeitung:** M.Sc. A. Mendieta

**Förderer:** Industrie; 01.10.2016 - 30.06.2017

### **Entwicklung und Verifikation eines Messverfahrens zur Bestimmung der räumlich aufgelösten Wandtemperatur bei Auftreffen eines Kraftstoffsprays**

Bedingt durch den Spray-Wand-Kontakt in Otto-Motoren mit Direkteinspritzung kann es zu einer Benetzung der Brennraumwände kommen. Die hieraus resultierenden Kraftstofffilme sind eine Quelle für HC und Ruß-Emissionen, weshalb eine Minimierung der Wandfilmbildung anzustreben ist. Daher soll im Rahmen des Projektes ein Messverfahren zur direkten, berührungslosen und räumlich aufgelösten Bestimmung der Abkühlung auf der benetzten Wandfläche entwickelt werden. Maßgeblich hierfür ist eine grundlegende Untersuchung der einzusetzenden thermographischen Phosphore und Beschichtungsverfahren sowie der Sensitivität und Anwendbarkeit des Messverfahrens unter Otto-motorischen Bedingungen.

**Projektleitung:** Prof. Dr.-Ing. Frank Beyrau  
**Kooperationen:** ABO Wind AG; Fraunhofer IFF, Magdeburg; Stadtwerke Burg Energienetze mbH  
**Förderer:** EU - EFRE Sachsen-Anhalt; 01.01.2017 - 31.12.2019

**Intelligent Multi-Energy Systems (SmartMES)**

Das Projekt Intelligentes Multi-Energiesystem (SmartMES) hat es sich zum Ziel gesetzt, die möglichen technischen und wirtschaftlichen Potentiale einer umfangreichen Sektorenkopplung zu heben. Im Rahmen des Gesamtprojektes erfolgt die Modellierung des Strom-, Gas-, Wärmenetzes durch die Kooperationspartner. Der Schwerpunkt des Lehrstuhls für Technische Thermodynamik liegt dabei in der Erforschung der notwendigen Netzkopplungstechnologien. Dazu zählt die Entwicklung von detaillierten und realitätsnahen Modellen von verfahrenstechnischen Anlagen, wie Wärmepumpen, Organic-Rankine-Cycle Anlagen oder Sorptionskältemaschinen.

---

**Projektleitung:** Prof. Dr.-Ing. Frank Beyrau  
**Kooperationen:** Institut für Technische Verbrennung (ITV) , Universität Stuttgart  
**Förderer:** Deutsche Forschungsgemeinschaft (DFG); 01.07.2017 - 30.06.2020

**Numerische Simulation und experimentelle Charakterisierung der Nanopartikelbildung in Sprayflammen**

Die Sprayflammsynthese bietet vielfältige Möglichkeiten für die Herstellung maßgeschneiderter Nanopartikel. Allerdings ist das Zusammenspiel zwischen Spray, Turbulenz, Phasenübergang, Prekursorzerfall, Chemie und Partikelbildung so komplex, dass das Prozessverständnis als eher rudimentär zu bezeichnen wäre. Innerhalb des SPP 1980 sollen Gesamtmodelle entwickelt werden, die ein fundamentales Verständnis des Prozesses erlauben. Das hier beantragte Teilprojekt soll folgenden Aspekte zum Gesamterfolg beitragen:- Es soll ein stochastischer Ansatz entwickelt werden, der in der Lage ist, Wechselwirkungen zwischen Flammenchemie, Prekursoren und Turbulenz unter der Berücksichtigung der stark variierenden chemischen Zeitskalen abbilden zu können. Eine Modellierung muss die Wechselwirkungen zwischen Partikeln, Trägergas und Turbulenz lokal und instantan abbilden können.- Mit Hilfe verschiedener Lasermessverfahren sollen die Randbedingungen für die genannten Simulationen experimentell ermittelt werden. So sollen die Größen und Geschwindigkeiten der Prekursor-Lösungsmittel-Tropfen nach der Zerstäubung, sowie das Strömungsfeld im SPP-Standardbrenner gemessen werden. - Die experimentelle Validierung der Simulationen soll unter anderem durch etablierte Messverfahren geschehen.- Ein zentraler Aspekt in diesem Antrag ist Entwicklung einer Methodik zur Validierung von Mechanismen zu Partikelbildung, -wachstum und -agglomeration durch die Kombinationen von laserbasierten, bildgebenden Messmethoden mit detaillierten numerischen Simulationen. In Mehrphasensystemen sind solche Methoden allein bislang nur bedingt einsetzbar, da die Signale häufig aufgrund von Quereinflüssen keine eindeutige Bestimmung von physikalischen Größen erlauben. Hier sollen deshalb die Leistungsfähigkeit der angesprochenen Kombination aus bildgebender Diagnostik und numerischen Simulationen verbessert, und auf das Gebiet der Partikeldiagnostik erweitert werden. Um trotz der vorhandenen Mehrdeutigkeiten eine sinnvolle Validierung von Modellen zu erzielen, werden bei dieser Methode synthetische Signale aus den numerischen Simulationen gewonnen, die anschließend mit den tatsächlichen, aufgezeichneten experimentellen Signalen verglichen werden können.

---

**Projektleitung:** Prof. Dr.-Ing. Frank Beyrau  
**Förderer:** Industrie; 15.07.2016 - 14.07.2017

**Optische Erfassung der von Düsenfeldern generierten Wandbenetzung**

Die reproduzierbare Positionierung sowie Einstellung der Beaufschlagungsdichten von Düsenfeldern ist von großer Relevanz für Kühl- und Reinigungsprozesse. Im Rahmen des Projektes sind die Grundlagen einer automatisierten, auf optischen Verfahren basierenden Messmethodik zu entwickeln.

---

**Projektleitung:** Prof. Dr.-Ing. Frank Beyrau  
**Projektbearbeitung:** Dr. Christopher Abram  
**Kooperationen:** Princeton University  
**Förderer:** EU - HORIZONT 2020; 01.02.2017 - 31.07.2019  
**PHOSPHOR - Synthesis of Novel Phosphor Sensor Particles for Advanced Flame Diagnostics**  
**Synthese neuartiger Phosphor-Sensor-Partikel für die Verbrennungsdagnostik**

Phosphore sind keramische Materialien, die nach Beleuchtung durch einen Laser Licht abstrahlen. Bei



thermographischen Phosphoren hängen die Farbe und die Leuchtdauer der Emission von der Temperatur des Materials ab, sie können also messtechnisch als Temperatursensoren verwendet werden. Am Lehrstuhl für Technische Thermodynamik (LTT) der Otto-von-Guericke Universität Magdeburg (Prof. Dr.-Ing. Frank Beyrau) werden feinste Phosphor-Partikel Gasen oder Flüssigkeiten zugemischt, um Temperatur- und Geschwindigkeitsfelder in Strömungen zu bestimmen, oder die Partikel werden zusammen mit einem Lack auf Oberflächen aufgebracht, um z.B. die Temperatur der Kolbenoberfläche in Verbrennungsmotoren messen zu können.

Die primäre Zielsetzung dieses Forschungsprojektes ist, den messbaren Temperaturbereich durch Synthese neuer, für die Strömungstemperaturerfassung optimierter Phosphore zu vergrößern. Dr. Christopher Abram vom LTT wird hierzu 18 Monate am Advanced Combustion and Propulsion Lab an der Princeton University in den Vereinigten Staaten, arbeiten. Dort werden innovative Synthesemethoden entwickelt, die die Herstellung von Phosphorpartikeln mit spezifischen physikalischen und optischen Eigenschaften ermöglichen. Dr. Abram wird in Princeton lernen, Phosphore unter Verwendung dieser hochmodernen Verfahren herzustellen, und wird dann zurückkehren, um ein Labor zur Phosphorpartikelherstellung am LTT aufzubauen, wo die neuen Materialien hergestellt, charakterisiert und letztlich für praktische Anwendungen eingesetzt werden können. Das Projekt wird zu neuen Messmöglichkeiten für die angewandte- und Grundlagenforschung führen und so zur Verbesserung des Designs von Antrieben für die Automobil- und Raumfahrtindustrie beitragen. Dadurch werden Ressourcen geschont und die Umweltbelastung reduziert. Die neuartigen Materialien werden auch in Beleuchtungs- und Displaytechnologien und biologischen Sensoren Verwendung finden, wodurch sich auch neue Möglichkeiten zur zukünftigen Zusammenarbeit mit Princeton und anderen Forschungseinrichtungen und der Industrie ergeben werden.

Das Projekt wird durch das EU-Rahmenprogramm für Forschung und Innovation Horizont 2020 mit dem Marie Skłodowska-Curie Zuwendungsvertrag Nr. 708068 gefördert.

---

**Projektleitung:** Prof. Dr.-Ing. Frank Beyrau

**Projektbearbeitung:** M.Sc. Daniel Butscher

**Förderer:** Industrie; 01.10.2014 - 30.06.2017

#### **Untersuchung des Zerstäubungsverhaltens an 10MW Ölbrüner-Rücklaufdüsen**

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

---

**Projektleitung:** Prof. Dr.-Ing. Dominique Thévenin

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

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

**Förderer:** Industrie; 01.08.2012 - 28.02.2017

#### **Blutflussquantifizierung**

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

---

**Projektleitung:** Prof. Dr.-Ing. Dominique Thévenin

**Förderer:** Land (Sachsen-Anhalt); 01.09.2015 - 31.08.2019

#### **Direkte Numerische Simulation turbulenter Strömungen mit chemischen Reaktionen**

In diesem Projekt wird das eigene Computerprogramm DINOSOARS, mit dem die Direkte Numerische Simulation (DNS) turbulenter Strömungen mit chemischen Reaktionen möglich ist, mit der Immersed Boundary Methode (IBM) hoher Ordnung gekoppelt, um damit Simulationen in Konfigurationen mit komplexer Geometrie zu ermöglichen. Damit

können eine Vielzahl relevanter Anwendungen der Energie- und Prozesstechnik mit unschlagbarer Genauigkeit untersucht werden.

---

**Projektleitung:** Prof. Dr.-Ing. Dominique Thévenin  
**Projektbearbeitung:** M.Sc. Lisa-Maria Wagner  
**Kooperationen:** Prof. Matthias Kraume, FG Verfahrenstechnik, TU Berlin  
**Förderer:** Deutsche Forschungsgemeinschaft (DFG); 01.01.2014 - 31.12.2018

**Dispersion und Koaleszenz in gerührten mizellaren Dreiphasensystemen**

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

---

**Projektleitung:** Prof. Dr.-Ing. Dominique Thévenin  
**Kooperationen:** Prof. Romuald Skoda, Ruhr-Universität Bochum  
**Förderer:** Industrie; 01.07.2016 - 31.12.2017

**Experimentelle und numerische Untersuchung von Kreiselpumpen radialer Bauart mit teiloffenem Laufrad bei der Förderung von Flüssig/Gasgemischen mit hoher Gasbelastung**

Kreiselpumpen, welche für Flüssigkeitsförderung ausgelegt sind, müssen in der Praxis häufig auch gasbeladene Flüssigkeiten fördern. Dabei kommt es zu einem Abfall oder gar vollständigen Zusammenbruch der Förderung, welcher u.a. abhängig von der Menge und Verteilung des freien Gases in der Zuströmung, der Pumpenbauart und dem Betriebspunkt ist. Eine rechnerische Erfassung dieses Vorgangs ist bisher nicht möglich, und die Einsatzgrenzen der Kreiselpumpen sind nicht vorhersehbar.

In dem vorgeschlagenen Vorhaben soll eine 3D-Strömungssimulationsmethode mit Blasenpopulations- und Interaktionsmodellen eingesetzt und erweitert werden. Damit wird erstmals eine Vorausberechnung auch des Förderhöheneinbruchs von Radialpumpen möglich. Zur experimentellen Validierung werden Detailmessungen an Strömungskanälen sowie an einer transparent ausgeführten Radialpumpe durchgeführt.

---

**Projektleitung:** Prof. Dr.-Ing. Dominique Thévenin  
**Projektbearbeitung:** M.Sc. Amir Eshghinejadfard  
**Förderer:** Deutsche Forschungsgemeinschaft (DFG); 01.07.2014 - 30.06.2017

**Lattice-Boltzmann Simulationen partikelbeladener Strömungen**

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

---

**Projektleitung:** Prof. Dr.-Ing. Dominique Thévenin  
**Kooperationen:** Prof. Eberhard Ambos; Prof. Ulrich Gabbert, FMB  
**Förderer:** EU - EFRE Sachsen-Anhalt; 08.04.2016 - 31.03.2018

**Methoden-Kompetenz für den automobilen Leichtbau durch hochfesten Aluminiumguss**

Das Gesamtziel des Vorhabens besteht darin, eine Methodenplattform für den Aluminiumguss zu entwickeln und zu erproben, mit deren Hilfe erstmals ganzheitlich sowohl der technologische Prozess als auch die Bauteile optimal gestaltet werden können, so dass ein minimales Bauteilgewicht erreicht wird und gleichzeitig die Anforderungen

hinsichtlich der mechanischen Eigenschaften (Festigkeit, Dynamik, Temperatur etc.), der Kosten und der gießtechnischen Randbedingungen erfüllt werden. Die Erprobung der Methodenplattform erfolgt unter Nutzung realer Druckgussbauteile von PKW-Komponenten.

---

**Projektleitung:** Prof. Dr.-Ing. Dominique Thévenin

**Projektbearbeitung:** Dipl.-Ing. Christoph Roloff

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

**Förderer:** Deutsche Forschungsgemeinschaft (DFG); 01.07.2013 - 30.06.2017

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

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

---

**Projektleitung:** Prof. Dr.-Ing. Dominique Thévenin

**Projektbearbeitung:** Roloff, Dipl.-Ing. Christoph

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

**Förderer:** Deutsche Forschungsgemeinschaft (DFG); 30.06.2017 - 30.06.2019

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

Die experimentelle Untersuchung, Modellierung, dynamische Simulation und Bewertung mehrstufiger Partikel-Querstromtrennungen in einem turbulenten Fluidstrom wurde gezielt für das Schwerpunktprogramm "DynSim" ausgewählt, weil dieser typische Trennprozess für die Abtrennung einer großen Zahl von Rohstoffen, Abfällen, Zwischen- und Nebenprodukten in vielen Branchen der stoffwandelnden Wirtschaft eingesetzt wird. Trotz seiner nachweislich guten Prozessleistungen ist damit immer noch eine Reihe ungelöster verfahrenstechnischer Problemstellungen verbunden, wie z.B. fluktuierende Luftströmung und Partikelbeladungen im Trennraum, ausgeprägte stochastische Prozessdynamik sowie resultierende mangelhafte Prozessgüte (Trennschärfe) und Produktqualität (Reinheit). Die nachhaltige Lösung dieser Probleme erfordert die Bereitstellung physikalisch begründeter, multiskaliger und zur Vorhersage geeigneter Modelle für die Bewertung und Simulation der Prozessdynamik vernetzter stochastischer Querstrom-Trennungen, die sich künftig bequem in

Fliessschema-Simulationen der Feststoffverfahrenstechnik einbinden lassen. Im Einzelnen werden zeitlich und örtlich aufgelöste, analytische und numerische Modelle für die Prozesskinetik und das vernetzte dynamische Querstrom-Trennverhalten der Partikel hinsichtlich ihrer Trennmerkmale Korngröße, -dichte und -form entwickelt. Parallel dazu werden effiziente numerische Simulationen des turbulenten Strömungsfeldes innerhalb des Trennapparates durchgeführt. Stationäre sowie instationäre, Reynolds-gemittelte Navier-Stokes-Gleichungen werden mit den Bewegungsgesetzen der Partikeltranslation und -rotation dank der Diskreten-Elemente-Methode, gekoppelt. Damit werden die Partikel-Bewegungsbahnen in der echten Geometrie der abgeknickten Kanalelemente berechnet. Nach ersten, einseitig gekoppelten Simulationen mit einfachen Wandmodellen werden realistischere Simulationen unter Berücksichtigung physikalischer Partikel-Wand- und Partikel-Partikel-Kollisionen durchgeführt. Die quantitative Validierung der eingesetzten Modelle erfolgt über zeitlich und dreidimensional örtlich aufgelöste Messungen im Trennapparat auf Basis der Particle Tracking Velocimetry. Bei Bedarf können für die Modellüberprüfung Direkte Numerische Simulationen der Zweiphasenströmung auf Mikro-Ebene eingesetzt werden. Die verfahrenstechnische und energetische Prozessgüte (Trennschärfe, spezifischer Energieeintrag) und Produktqualität der Trennversuche und numerischen Experimente werden modellgestützt bewertet und optimiert. Dem folgen in der zweiten Förderperiode die Berechnung und Bewertung dynamischer Veränderungen der Prozessgüte und Produktqualität bei sprungförmigen und harmonischen Schwankungen des Aufgabestromes, der Beladungen und der Trennmerkmale Korngröße, -dichte und -form. Abschließend werden in der dritten SPP-Phase diese Bewertungs- und Simulationsmodelle in ein multiskaliges, modular aufgebautes Prozess-Systemmodell eingebettet.

---

**Projektleitung:** Prof. Dr.-Ing. Dominique Thévenin

**Kooperationen:** Prof. Einar Krus, Univ. Duisburg-Essen; Prof. Hartmut Wiggers, Univ. Duisburg-Essen

**Förderer:** Deutsche Forschungsgemeinschaft (DFG); 01.08.2017 - 31.07.2020

**Nanopartikelentstehung aus Prekursor-beladenen Tröpfchen: Strömungssimulation; Populationsdynamik von Partikeln und Tröpfchen; experimentelle Validierung**

Der Übergang von der Flüssig- in die Gasphase und das sich daran anschließende beginnende Partikelwachstum ist im Bereich der Sprayflammsynthese ein wenig untersuchtes Forschungsgebiet. Dabei fehlt es bisher sowohl an geeigneten experimentellen Untersuchungsmöglichkeiten als auch an numerischen Modellen, diese Phasenübergänge im Verlauf der Sprayflammsynthese umfassend zu beschreiben. Somit bleiben wichtige Teilschritte auf dem Weg vom Spray zum Partikel im Bereich der Spekulation.

Dieses Projekt hat es sich zum Ziel gesetzt, in einem Sprayflammenreaktor den Übergang von der flüssigen (Tropfen)-Phase in die feste Partikel-Phase detailliert zu untersuchen. Dabei kommt eine Kombination aus experimentellen und numerischen Werkzeugen zum Einsatz, die sich in ihren Möglichkeiten hervorragend ergänzen. Diese Arbeiten sollen insbesondere dazu dienen, den Übergang von der Spray/Tropfenphase in die Partikelphase zu untersuchen und so die Partikelentstehungsprozesse besser zu verstehen, um daraus relevante Parameter bezüglich einer zielgerichteten Sprayflammsynthese zu identifizieren, die dann zur Prozessoptimierung und zur Skalierung des Verfahrens verwendet werden können.

Die Aufgaben in Magdeburg betrifft die Berechnung der Trajektorien von verdampfenden Tropfen mittels DNS.

---

**Projektleitung:** Prof. Dr.-Ing. Dominique Thévenin

**Projektbearbeitung:** Oster, MSc Timo

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

**Förderer:** Deutsche Forschungsgemeinschaft (DFG); 01.10.2014 - 31.03.2018

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

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

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

---

**Projektleitung:** Prof. Dr.-Ing. Dominique Thévenin  
**Projektbearbeitung:** Wagner, MSc Lisa-Maria; Zähringer, Dr.-Ing. Katharina  
**Kooperationen:** Prof. Kai Sundmacher, MPI Magdeburg  
**Förderer:** Deutsche Forschungsgemeinschaft (DFG); 01.01.2014 - 31.12.2017

#### **Optimale Reaktionsführung in flüssigen Mehrphasensystemen**

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

---

**Projektleitung:** Prof. Dr.-Ing. Dominique Thévenin  
**Projektbearbeitung:** M.Sc. Olivier Cleyne, M.Sc. Stefan Hoerner  
**Förderer:** Bund; 01.07.2015 - 28.02.2018

#### **Optimierung von Fluidenergiemaschinen unter Berücksichtigung der Fischdurchgängigkeit**

Es besteht erhebliches technisches Verbesserungspotential bei dem Einsatz tiefschmächtiger Wasserräder sowie Fischtreppe, insbesondere, wenn eine Konfiguration mit mehreren Komponenten ausgewählt wird, in welcher hydrodynamische Wechselwirkungen auftreten. In diesem Projekt werden Computermodelle entwickelt, mit denen das Optimierungspotential solcher Konfigurationen im Sinne des Energieaustauschs unter Berücksichtigung der Fischdurchgängigkeit voll ausgeschöpft wird. Da das zugrunde liegende physikalische Problem sehr komplex ist, ist es dabei unabdingbar, experimentelle Daten unter kontrollierten und reproduzierbaren Strömungsbedingungen zu erhalten, um damit die Simulationskette zu validieren. Eine eigens hierfür konzipierte Versuchsrinne wird zu diesem Zweck am Institut aufgebaut, womit die Umströmung entsprechender Modelle komplett charakterisiert wird. Mit Hilfe dieser Rinne wird auch eine autonome Sonde zur Ermittlung der relevanten Strömungseigenschaften getestet.

---

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

#### **Simulationsbasierte Optimierung der Kühlung elektrischer Generatoren**

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

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

---

**Projektleitung:** Prof. Dr.-Ing. Dominique Thévenin  
**Förderer:** Industrie; 01.05.2016 - 30.04.2019

### **Simulationsbasierte Optimierung einer Kraftstoffeinspritzdüse**

Vorrangiges Ziel dieses Forschungsprojektes ist es, einen effizienten und zielführenden Simulationsprozess auf Basis der CFD-O (Computational Fluid Dynamics for Optimization: ein Ansatz, der am Lehrstuhl entwickelt wurde) zu entwickeln, mit dem eine optimale Auslegung einer Düsengeometrie für die Kraftstoffeinspritzung erzielt werden kann.

---

**Projektleitung:** Prof. Dr.-Ing. Dominique Thévenin

**Projektbearbeitung:** Eshghinejadfard, Dr.-Ing. Amir

**Kooperationen:** Prof. Andreas Seidel-Morgenstern, MPI Magdeburg; Prof. Heike Lorenz, MPI Magdeburg

**Förderer:** EU - EFRE Sachsen-Anhalt; 01.10.2016 - 30.09.2019

### **Vermessung und Modellierung des Wachstums von Einzelkristallen**

Zur gezielten Auslegung und Optimierung von Kristallisationsprozessen ist die Kenntnis der Wachstumsgeschwindigkeiten der Kristalle von zentraler Bedeutung. Diese Geschwindigkeiten sind spezifisch für die jeweils betrachteten Stoffsysteme und hängen stark vom eingesetzten Lösungsmittel, der Temperatur und den aktuellen Konzentrationsverhältnissen ab. Gegenwärtig verfügen wir über kein ausreichend zuverlässiges Instrumentarium zur Vorhersage dieser wichtigen Eigenschaft von Kristallen und es besteht ein Bedarf an zuverlässigen Mess- und Modellierungsmethoden. Unter den vorgeschlagenen Möglichkeiten eignet sich insbesondere der Einsatz der experimentellen Beobachtung der Dynamik der Größen- und Formveränderung von Einzelkristallen unter in sogenannten Wachstumszellen zuverlässigen und effizient einstellbaren Bedingungen. Numerisch erscheinen Lattice-Boltzmann-Ansätze besonders zielführend, um das Kristallwachstum unter Berücksichtigung der Hydrodynamik und aller Konzentrations- und Temperaturfelder zu beschreiben. Die Analyse der Versuchsergebnisse mit dem Ziel der Identifikation von Wachstumsmechanismen sowie der Schätzung von kinetischen Parametern erfordert dabei eine genaue Kenntnis der Fluidynamik in den Messzellen. Diesem Aspekt wurde in bisherigen Arbeiten, die in der Regel auf der Annahme idealer Vermischungen basierten, kaum Rechnung getragen. Weiterhin wurden bisher die Einflüsse von Abweichungen von isothermen Bedingungen sowie Auswirkungen von Verunreinigungen und gezielt zugesetzten Additiven nicht bewertet. Die hier angestrebte Kombination aus Einzelkristallexperimenten mit detaillierten numerischen Simulationen soll eine vollständige Aufklärung der zugrundeliegenden Mechanismen erlauben.

---

**Projektleitung:** Prof. Dr.-Ing. Eckehard Specht

**Förderer:** BMWi/AIF; 01.11.2015 - 30.04.2018

### **Analyse und Modellierung des Wärmeübergangs in Drehrohren mit Hubschaufeln**

Vorhandene Drehrohranlagen können gezielter optimiert und genauer an spezifische Produkteigenschaften angepasst werden. So kann die Produktqualität auf Basis bekannter, partikel aufgelöster Temperatur-Zeitverläufe gesteigert werden. Bei Absatzschwankungen kann der Prozess besser geregelt werden, was zu einer Vergleichmäßigung der Produktqualität, zur Verkleinerung von Ausschussmengen und damit zu verbesserter Ressourceneffizienz führt.

---

**Projektleitung:** Prof. Dr.-Ing. Eckehard Specht

**Förderer:** BMWi/AIF; 01.05.2017 - 30.04.2019

### **Einfluss der Art des Festbrennstoffes und der Prozessbedingungen von Kalk in mischgefeuerten Normalschachtöfen**

Auf Basis der Kenntnis der Temperaturverläufe und der Zersetzungsverläufe der verschieden großen Steine kann die Qualität des Kalkes gezielter beeinflusst werden. So wird der Rest-CO<sub>2</sub>-Gehalt, der vornehmlich die großen Steine betrifft, über die Betriebsbedingungen, wie Durchsatz, Energieeinsatz und Luftmenge einstellbar werden. Es wird auch abschätzbar sein, in wie weit ein höherer Aufwand bei der Klassierung der Steine vor dem Ofeneinsatz die Brennqualität verbessert, eventuell den Energieverbrauch reduziert und die Produktivität über einen erhöhten Durchsatz steigert. Die Vorhersage über die Brennbedingungen von Kalksteinen unterschiedlicher Herkunft wird erheblich vereinfacht. Über standardisierte Laboruntersuchungen lassen sich die den Zersetzungsverlauf bestimmenden Stoffwerte (Wärmeleitfähigkeit, Porendiffusionskoeffizient, Reaktionskoeffizient) relativ schnell ermitteln. Mit diesen Stoffwerten kann dann das Zersetzungsverhalten und die Reaktivität des Branntkalkes über die Zersetzungstemperaturen vorbestimmt werden. Die Anpassung des Kalzinierungsvorganges und des überbrennen des Kalksteines bzw. des Kalkes kann somit auf unterschiedliche Brennstoffe mittels Berechnung in bestehenden Öfen angepasst werden.

---

**Projektleitung:** Prof. Dr.-Ing. Eckehard Specht

**Projektbearbeitung:** Prof. Dr.-Ing. Eckehard Specht

**Förderer:** BMWi/AIF; 01.01.2016 - 30.06.2018

**Einfluss der Oberflächenrauigkeit auf die Sekundärkühlung beim Stranggießen von Nichteisen-Metallen**

Das Ziel des Forschungsvorhabens besteht darin, den Einfluss der Rauigkeit und der Struktur der Oberfläche auf den Wärmeübergang in der Sekundärkühlzone bei NE-Stranggießverfahren quantitativ zu beschreiben. Dazu sollen bekannte Korrelationen für den Wärmeübergang an glatten Oberflächen mit zu erarbeitenden Parametern ergänzt bzw. erweitert werden. Dies soll für die beiden gängigen Verfahren Spritzkühlung und Kokillenstrahlkühlung durchgeführt werden. Es soll dazu der lokale Wärmeübergangs-koeffizient der Bereiche Blasenverdampfung, partielle Filmverdampfung und stabile Filmverdampfung mit den zugehörigen Leidenfrosttemperaturen und DNB-Temperaturen ermittelt werden.

Der Einfluss der Rauigkeit und der Struktur der Oberfläche auf den Wärmeübergang in der Sekundärkühlzone beim Strangguss von NE-Metallen wird erstmalig systematisch untersucht. Es werden erstmalig lokale Wärmeübergangskoeffizienten für die Bereiche der Blasenverdampfung sowie der instabilen und stabilen Filmverdampfung gemessen. Damit kann mit den vorhandenen Simulationsprogrammen der Spannungsverlauf während des Erstarrungsprozesses erheblich genauer berechnet werden. Folglich kann die Kühlung gezielter eingestellt werden, um Risse zu vermeiden oder zumindest zu reduzieren.

---

**Projektleitung:** Prof. Dr.-Ing. Eckehard Specht

**Förderer:** BMWi/AIF; 01.01.2015 - 31.12.2017

**Ermittlung gesicherter Werte der Wärmeleitfähigkeit feuerfester Werkstoffe für die Auslegung von Industrieöfen und für die Prozessoptimierung**

Das Ziel des Forschungsprojektes besteht in der Ermittlung gesicherter Daten der Wärmeleitfähigkeit von feuerfesten Werkstoffen mit Hilfe von vergleichenden Messungen des Heißdraht- und des Laser-Flash-Verfahrens. Damit soll zum einen die Auslegung von Industrieöfen sicherer gemacht werden, zum anderen sollen die Prozesse in Industrieöfen genauer berechenbar sein, damit diese besser optimiert werden können. Prozesssimulationen können nämlich nicht genauer sein als die zu Grunde gelegten Stoffwerte.

---

**Projektleitung:** Prof. Dr.-Ing. Eckehard Specht

**Förderer:** BMWi/AIF; 01.02.2017 - 31.07.2019

**Interaktion von Axialtransport, Wärmeeintrag und Reaktion in Drehrohren**

Drehrohröfen sind gekennzeichnet durch ihre Rotation um die Rohrachse sowie die Neigung zur Horizontalen, wodurch ein kontinuierlicher axialer Schüttguttransport ermöglicht wird. Während sich der axiale Transport und die damit einhergehenden transversalen Bewegungsmuster der Schüttung in Drehrohren mit makroskopischen Modellen beschreiben lassen, ist der Wärmetransport in einem solchen System nur ansatzweise bekannt. Insbesondere die Auswirkungen der Transversalbewegung auf den axialen Schüttguttransport und den Wärmeeintrag in das Schüttbett sind bisher nicht erforscht. Ziel des Projektes ist es, die Basis für makroskopische Modelle, die das thermische Verhalten während des Axialtransportes eines polydispersen Schüttguts beschreiben können, zu schaffen und um chemische Reaktion zu erweitern. Hierzu wird eine partikelbasierende Simulationsmethodik (DEM), die fortlaufend durch Experimente überprüft wird, eingesetzt, um den Einfluss des Axialtransportes auf den Wärmeeintrag und das Reaktionsverhalten von Schüttgütern zu untersuchen.

Nach Projektende werden verbesserte mathematische Modelle und Berechnungsvorschriften zur Verfügung stehen, mit denen Hersteller von Drehrohren und Engineering Firmen das thermische Verhalten in der Schüttung während des Axialtransportes in Drehrohren bestimmen können. Diese Modelle werden den Einfluss der Dimensionierungs- und Betriebsparameter sowie der Schüttguteigenschaften (mechanisch und thermophysikalisch) berücksichtigen. Der konkrete

Nutzen der Modelle ist vielfältig. Besser gesicherte Transportmodelle reduzieren Zeit und Kosten für aufwändige Vorversuche bei der Produktentwicklung, tragen dazu bei Sicherheitszuschläge zu minimieren, verbessern die Produktqualität bzw. senken mögliche Ausschussmengen durch optimierte Einhaltung von Partikel-Zeitverläufen. Dies führt zu verminderten Investitions- und Betriebskosten sowie gesteigerten Erträgen.

---

**Projektleitung:** Prof. Dr.-Ing. Eckehard Specht

**Förderer:** BMWi/AIF; 01.04.2017 - 30.09.2019

**Neues Tunnelofenkonzept zum energieeffizienten Brennen von Ziegeln**

Drehrohröfen sind gekennzeichnet durch ihre Rotation um die Rohrachse sowie die Neigung zur Horizontalen, wodurch ein kontinuierlicher axialer Schüttguttransport ermöglicht wird. Während sich der axiale Transport und die damit einhergehenden transversalen Bewegungsmuster der Schüttung in Drehrohren mit makroskopischen Modellen beschreiben lassen, ist der Wärmetransport in einem solchen System nur ansatzweise bekannt. Insbesondere die Auswirkungen der Transversalbewegung auf den axialen Schüttguttransport und den Wärmeeintrag in das Schüttbett sind bisher nicht erforscht. Ziel des Projektes ist es, die Basis für makroskopische Modelle, die das thermische Verhalten während des Axialtransportes eines polydispersen Schüttguts beschreiben können, zu schaffen und um chemische Reaktion zu erweitern. Hierzu wird eine partikelbasierende Simulationsmethodik (DEM), die fortlaufend durch Experimente überprüft wird, eingesetzt, um den Einfluss des Axialtransportes auf den Wärmeeintrag und das Reaktionsverhalten von Schüttgütern zu untersuchen.

---

**Projektleitung:** Jun.-Prof. Dr.-Ing. Fabian Herz

**Förderer:** BMWi/AIF; 01.11.2015 - 30.04.2018

#### **Analyse und Modellierung des Wärmeübergangs in Drehrohren mit Hubschaufeln**

Im Rahmen des vorliegenden Forschungsvorhabens soll ein makroskopisches Modell zur Beschreibung des transversalen Wärmeübergangs an die Schüttung von Drehrohren mit Hubschaufeleinbauten formuliert werden. Hierfür wird ein bereits existierendes makroskopisches Modell zum Bewegungsverhalten granularer Medien erweitert. Erstmals werden experimentelle Messungen durchgeführt und mit entsprechenden DEM/CFD-Simulationen abgeglichen. Um dieses Ziel zu erreichen, arbeiten die Otto-von-Guericke-Universität Magdeburg (FS1) und die Ruhr-Universität Bochum (FS2) zusammen. Die FS1 führt die experimentellen Untersuchungen an einem Drehrohrsegment (Länge 1 m, Durchmesser 0,5 m) und die FS2 die numerischen Untersuchungen mittels DEM/CFD durch. Aufgrund ihrer technischen Bedeutung werden die vorgesehenen Untersuchungen auf L-förmige Hubschaufeln beschränkt. Nach Projektende werden verbesserte mathematische Modelle und Berechnungsvorschriften zur Verfügung stehen, mit denen Hersteller von Drehrohren und Engineering Firmen den Wärmeübergang in Drehrohren mit L-Hubschaufeln bestimmen können. Diese Modelle werden den Einfluss der Dimensionierungs- und Betriebsparameter sowie der Schüttguteigenschaften (mechanische und thermophysikalische Eigenschaften) berücksichtigen. Der konkrete Nutzen der verbesserten makroskopischen Modelle und Berechnungsvorschriften ist vielfältig. Besser gesicherte Wärmeübertragungsmodelle reduzieren Zeit und Kosten für aufwändige Vorversuche bei der Produktentwicklung, tragen dazu bei Sicherheitszuschläge zu minimieren, verbessern die Produktqualität bzw. senken mögliche Ausschussmengen durch verbesserte Einhaltung von Partikel-Zeitverläufen. Dies führt zu verminderten Investitions- und Betriebskosten sowie gesteigerten Erträgen. Mittelbar verbessert dies die Wettbewerbsfähigkeit deutscher KMU auf dem Weltmarkt.

---

**Projektleitung:** Dr. Christopher Abram

**Förderer:** EU - Sonstige; 01.06.2015 - 31.05.2019

#### **European Long-Term Ecosystem and socio-ecological Research Infrastructure**

Sowohl für die Forschung als auch die Anwendung im Bereich der Berichterstattung zur Situation der Biodiversität in Deutschland sind Monitoringdaten essentiell. Das Projekt zielt auf die Harmonisierung von Infrastrukturen und Monitoringaktivitäten in Europa und damit sichert es die Verfügbarkeit von qualitativ wertvollen Daten für die Berichterstattung zur Umwelt durch staatliche Institutionen.

---

**Projektleitung:** PD Dr. Gábor Janiga

**Kooperationen:** Prof. Bernhard Preim, Inst. für Simulation und Grafik, FIN; Prof. Georg Rose, Lehrstuhl für Medizinische Telematik und Medizintechnik, FEIT; Prof. Martin Skalej, Zentrum für Radiologie, FME

**Förderer:** EU - EFRE Sachsen-Anhalt; 01.10.2016 - 30.09.2017

#### **Patientenspezifische Behandlungsoptimierung intrakranieller Aneurysmen unter Berücksichtigung von Gefäßwanddeformationen**

Für die Behandlung von intrakraniellen Aneurysmen kommen häufig sog. Flow Diverter zum Einsatz. Ihr Funktionsprinzip basiert darauf, dass sie den Bluteintrag in die Gefäßaussackung reduzieren und somit einen natürlichen Thrombosierungsvorgang einleiten. Umfangreiche Studien haben gezeigt, dass es mithilfe von Flow Divertern zwar in einem hohen Prozentsatz zu einem Behandlungserfolg kommt, in einzelnen Fällen aber die Thrombosierung ausbleibt. Es wurde sogar über verzögerte Rupturen berichtet, die nach der Implantation eines Flow Diverters auftraten. Diese Situation ist auf den Umstand zurückzuführen, dass sich Aneurysmen patientenindividuell u.a.



in Lage, Größe, Form und Wachstumsverlauf unterscheiden, dem allerdings nur eine begrenzte Auswahl an Flow Diverter Konfigurationen gegenübersteht. Zur Verbesserung des Behandlungserfolgs wird eine individualisierte Therapie angestrebt, die die Entwicklung eines auf die Bedürfnisse des Patienten angepassten, personalisierten Stents darstellt. Hierzu werden numerische Methoden eingesetzt.

Am Projektende wird die erfolgreiche Entwicklung eines virtuellen Stenting-Verfahrens nachgewiesen, mit dem Patienten individuell optimierte Behandlungsvorschläge unterbreitet werden können

---

**Projektleitung:** PD Dr. Gábor Janiga

**Kooperationen:** Prof. Bernhard Preim, Inst. für Simulation und Grafik, FIN; Prof. Georg Rose, Lehrstuhl für Medizinische Telematik und Medizintechnik, FEIT; Siemens Healthcare

**Förderer:** Bund; 01.01.2015 - 31.12.2019

**Forschungscampus STIMULATE: Forschungsgruppe Hämodynamik/Tools**

Forschungsgegenstand der Forschungsgruppe Hämodynamik Tools im Rahmen des Forschungscampus *STIMULATE* ist die Entwicklung von neuen Instrumenten und Implantaten für neurovaskuläre Anwendungen. Dazu wird das Blutflussverhalten bei Einsatz verschiedener, existierender Stent-Implantate für die Behandlung zerebraler Aneurysmen untersucht. Basierend auf patientenspezifischen Aneurysmageometrien und -eigenschaften soll der Einfluss verschiedener Stent-Konfigurationen (Typ und Position) auf das Blutflussverhalten mittels CFD-Simulationen prognostiziert werden. Ziel ist es dabei, die individualisierte Stent-Konfiguration für die aktuelle Gefäßgeometrie zu ermitteln. Dabei wird der instabile und eingebettete Blutfluss intensiv untersucht und ausgewertet, da die Flusseigenschaften bei vielen neurovaskulären Erkrankungen eine entscheidende Rolle spielen könnten. Dies ist auch die Basis für die Entwicklung neuartiger Stent-Implantate. Zusätzlich werden für die Platzierung und Sondierung von Aneurysmen endovaskuläre Katheter auf Basis dünnwandiger hochflexibler Schläuche entwickelt.

---

**Projektleitung:** PD Dr. Gábor Janiga

**Projektbearbeitung:** Schulz, M.Sc. Franziska

**Förderer:** EU - ESF Sachsen-Anhalt; 01.12.2017 - 30.11.2021

**MEMoRIAL-M1.8 | Augmented 4D flow**

---

**Projektleitung:** PD Dr. Gábor Janiga

**Kooperationen:** apl. Prof. Dr. habil. Michael Mangold, Max-Planck-Institut für Dynamik komplexer technischer Systeme; Prof. Andreas Seidel-Morgenstern, MPI Magdeburg

**Förderer:** Deutsche Forschungsgemeinschaft (DFG); 01.09.2015 - 31.08.2017

**Modellgestützte Analyse und Synthese eines neuartigen vernetzten Prozesses zur kontinuierlichen Trennung von Enantiomeren**

- Modellvalidierung, Identifikation von geometrisch schwierigen Bereichen der Anlage
- CFD-DEM-Simulationen des Wirbelschichtkristallisators mit dem neuen Stoffsystem Guaifenesin
- Geometrische Optimierung des Wirbelschichtkristallisators für beide untersuchte Stoffsysteme

Die Arbeiten erfolgen im Verbund mit der Arbeitsgruppe von Prof. Seidel-Morgenstern am MPI Magdeburg und der Arbeitsgruppe von apl. Prof. Mangold am MPI Magdeburg. Das Projekt ist Teil des DFG-Schwerpunktprogramms SPP 1679 "Dynamische Simulation vernetzter Feststoffprozesse".

---

**Projektleitung:** Dr.-Ing. Jörg Sauerhering

**Förderer:** Land (Sachsen-Anhalt); 01.01.2016 - 31.12.2018

**Competence in Mobility COMO III, Teilprojekt Antriebsstrang: Optimierung der Fluidkühlung eines Radnabenmotors und Teilprojekt Gesamtfahrzeug: Thermische Optimierung von E-Mobilkonditionierung**

Für das TP Antriebsstrang wird im Rahmen von COMO III die Fluidkühlung optimiert und auf eine höhere thermische Last ausgelegt.

Für das TP Gesamtfahrzeug sind die für Heizung und Klimatisierung/Kühlung aufzubringenden thermischen Lasten des Innenraums sowie der Batterie und weiterer Komponenten in Betracht zu ziehen und eine möglichst energieeffiziente

Lösung mit Fokus auf die Reichweitensicherheit zu entwickeln.

---

**Projektleitung:** Dr.-Ing. Jörg Sauerhering

**Förderer:** Industrie; 01.09.2017 - 31.12.2017

**Experimentelle Untersuchung des Wärmeübergangs bei Sprühkühlung an senkrechten Oberflächen**

Sprühkühlung ermöglicht eine Intensivierung des Wärmeübergangs an thermisch hoch belasteten Oberflächen. Grundlegend für die Untersuchung ist die Verwendung eines dünnen, elektrisch beheizten Bleches, wobei die Vorderseite des Bleches mit dem Spray beaufschlagt und die Blechtemperatur auf der Rückseite infrarotthermografisch mit einer hohen optischen, thermischen und zeitlichen Auflösung erfasst wird. Der Wärmeübergang kann anschließend ortsaufgelöst aus dem Temperatur-Zeit-Verlauf berechnet werden

---

**Projektleitung:** Dr.-Ing. Katharina Zähringer

**Projektbearbeitung:** Kováts, MSc P.

**Förderer:** Deutsche Forschungsgemeinschaft (DFG); 01.05.2014 - 30.04.2017

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

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

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

---

**Projektleitung:** Dr.-Ing. Philipp Berg

**Förderer:** Industrie; 01.10.2017 - 30.09.2019

**Bewertung eines klinischen Prototypen für die individualisierte Blutflussvorhersage in intrakraniellen Aneurysmen**

Damit die Vorhersage des individuellen Blutflusses eines Aneurysmapatienten bzw. einer Aneurysmapatientin auch klinisch angewendet werden kann, wird ein strömungsmechanischer Prototyp auf seine Plausibilität bewertet. Hierbei wird besonderer Fokus auf die Therapieunterstützung gelegt.

---

**Projektleitung:** Dr.-Ing. Philipp Berg

**Förderer:** Bund; 01.01.2015 - 31.12.2019

**Forschungscampus STIMULATE / Forschungsgruppe Hämodynamik/Tools**

Forschungsgegenstand der Forschungsgruppe Hämodynamik Tools im Rahmen des Forschungscampus *STIMULATE* ist die Entwicklung von neuen Instrumenten und Implantaten für neurovaskuläre Anwendungen. Dazu wird das Blutflussverhalten bei Einsatz verschiedener, existierender Stent-Implantate für die Behandlung zerebraler Aneurysmen untersucht. Basierend auf patientenspezifischen Aneurysmageometrien und -eigenschaften soll der Einfluss verschiedener Stent-Konfigurationen (Typ und Position) auf das Blutflussverhalten mittels CFD-Simulationen prognostiziert werden. Ziel ist es dabei, die individualisierte Stent-Konfiguration für die aktuelle Gefäßgeometrie zu ermitteln. Dabei wird der instabile und eingebettete Blutfluss intensiv untersucht und ausgewertet, da die Flusseigenschaften bei vielen neurovaskulären Erkrankungen eine entscheidende Rolle spielen könnten. Dies ist auch die Basis für die Entwicklung neuartiger Stent-Implantate. Zusätzlich werden für die Platzierung und Sondierung von Aneurysmen endovaskuläre Katheter auf Basis dünnwandiger hochflexibler Schläuche entwickelt.

---

**Projektleitung:** Dr.-Ing. Florian Schulz

**Förderer:** Industrie; 15.07.2016 - 14.07.2017

**Optische Erfassung der von Düsenfeldern generierten Wandbenetzung**

Die reproduzierbare Positionierung sowie Einstellung der Beaufschlagungsdichten von Düsenfeldern ist von großer Relevanz für Kühl- und Reinigungsprozesse. Im Rahmen des Projektes sind die Grundlagen einer automatisierten, auf optischen Verfahren basierenden Messmethodik zu entwickeln.

## 8. Veröffentlichungen

### **Begutachtete Zeitschriftenaufsätze**

**Abdelsamie, Abouelmagd; Janiga, Gábor; Thévenin, Dominique**

Spectral entropy as a flow state indicator

In: International journal of heat and fluid flow - Amsterdam [u.a.]: Elsevier Science, Bd. 68.2017, S. 102-103

[Imp.fact.: 1,873]

**Abdelsamie, Abouelmagd; Lignell, David O.; Thévenin, Dominique**

Comparison between ODT and DNS for ignition occurrence in turbulent premixed jet combustion - safety-relevant applications

In: Zeitschrift für physikalische Chemie: international journal of research in physical chemistry and chemical physics - Berlin: De Gruyter, insges. 27 S., 2017

**Abdelsamie, Abouelmagd; Thévenin, Dominique**

Direct numerical simulation of spray evaporation and autoignition in a temporally-evolving jet

In: Proceedings of the Combustion Institute - Amsterdam [u.a.]: Elsevier, Bd. 36.2017, 2, S. 2493-2502

[Imp.fact.: 3,214]

**Al-Khalaf, Mohsan Rhida; Specht, Eckehard**

Prediction of cross flow mixing in the structured packed bed through CFD simulation using (FBM and PMM) and validation with experiments

In: Engineering applications of computational fluid mechanics - Hong Kong: CSE Dept., the H.K. PolyU, Bd. 11.2017, 1, S. 1-14

[Imp.fact.: 1,033]

**Attalla, M.; Maghrabie, Hussein M.; Qayyum, Abdul; Al-Hasnawi, Adnan G.; Specht, Eckehard**

Influence of the nozzle shape on heat transfer uniformity for in-line array of impinging air jets

In: Applied thermal engineering: design, processes, equipment, economics - Amsterdam [u.a.]: Elsevier Science, Bd. 120.2017, S. 160-169

[Imp.fact.: 3,043]

**Attalla, M.; Maghrabie, Hussein M.; Specht, Eckehard**

Effect of inclination angle of a pair of air jets on heat transfer into the flat surface

In: Experimental thermal and fluid science: international journal of experimental heat transfer, thermodynamics and fluid mechanics: ETF science - New York, NY: Elsevier, Bd. 85.2017, S. 85-94  
[Imp.fact.: 2,128]

**Berg, Philipp; Saalfeld, Sylvia; Voß, Samuel; Redel, Thomas; Preim, Bernhard; Janiga, Gábor; Beuing, Oliver**

Does the DSA reconstruction kernel affect hemodynamic predictions in intracranial aneurysms? - an analysis of geometry and blood flow variations

In: Journal of neuroInterventional surgery: JNIS: the journal of the Society of NeuroInterventional Surgery - London: BMJ Journals, Bd. 10.2018, 3, S. 290-296  
[Imp.fact.: 3,551]

**Cleyen, Olivier; Hoerner, Stefan; Thévenin, Dominique**

Characterization of hydraulic power in free-stream installations

In: International journal of rotating machinery - [S.I.]: Hindawi, Vol. 2017.2017, Art. 9806278, insgesamt 10 S.

**Eshghinejadfard, Amir; Abdelsamie, Abouelmagd; Hosseini, Seyed Ali; Thévenin, Dominique**

Immersed boundary lattice Boltzmann simulation of turbulent channel flows in the presence of spherical particles

In: International journal of multiphase flow - Oxford: Pergamon Press, Bd. 96.2017, S. 161-172  
[Imp.fact.: 2,509]

**Eshghinejadfard, Amir; Hosseini, Seyed Ali; Thévenin, Dominique**

Fully-resolved prolate spheroids in turbulent channel flows - a lattice Boltzmann study

In: AIP Advances - New York, NY: American Inst. of Physics, Vol. 7.2017, 9, Art. 095007, insgesamt 19 S.  
[Imp.fact.: 4,463]

**Eshghinejadfard, Amir; Sharma, Kashyapa; Thévenin, Dominique**

Effect of polymer and fiber additives on pressure drop in a rectangular channel

In: Journal of hydrodynamics / B - Amsterdam [u.a.]: Elsevier, Bd. 29.2017, 5, S. 871-878  
[Imp.fact.: 1,174]

**Gauding, Michael; Dietzsch, Felix; Goebbert, Jens Henrik; Thévenin, Dominique; Abdelsamie, Abouelmagd; Hasse, Christian**

Dissipation element analysis of a turbulent non-premixed jet flame

In: Physics of fluids: devoted to the publication of original theoretical, computational, and experimental contributions to the dynamics of gases, liquids, and complex or multiphase fluids - [S.I.]: American Institute of Physics, Vol. 29.2017, 8, Art. 085103, insgesamt 12 S.

[Imp.fact.: 2,017]

**Halder, Paresh; Samad, Abdus; Thévenin, Dominique**

Improved design of a Wells turbine for higher operating range

In: Renewable energy: an international journal: the official journal of WREN, The World Renewable Energy Network - Amsterdam [u.a.]: Elsevier Science, Bd. 106.2017, S. 122-134

[Imp.fact.: 4,357]

**Hallak, Bassem; Linn, Nyein; Specht, Eckehard; Herz, Fabian**

Combustion behavior of coke in shaft kilns with hypostoichiometric air flow

In: Energy procedia - Amsterdam [u.a.]: Elsevier, Bd. 120.2017, S. 612-619

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

Influence of particle size distribution on the limestone decomposition in single shaft kilns

In: Energy procedia - Amsterdam [u.a.]: Elsevier, Bd. 120.2017, S. 604-611

**Harth, Kirsten; Trittel, Torsten; Wegner, Sandra; Stannarius, Ralf**

Cooling of 3D granular gases in microgravity experiments

In: The European physical journal / Web of Conferences - Les Ulis: EDP Sciences, Vol. 140, Section Granular gas, Art.

04008, insgesamt 4 S., 2017

[Konferenz: 8th International Conference on Micromechanics on Granular Media, Powders and Grains 2017, Montpellier, France, July 3-7, 2017]

**Herz, Fabian; Specht, Eckehard; Abdelwahab, Abulkadir**

Modeling and validation of the siderite decomposition in a rotary kiln

In: Energy procedia - Amsterdam [u.a.]: Elsevier, Bd. 120.2017, S. 524-531

**Hlawitschka, M. W.; Kováts, Peter; Zähringer, Katharina; Bart, H.-J.**

Simulation and experimental validation of reactive bubble column reactors

In: Chemical engineering science - Amsterdam [u.a.]: Elsevier Science, Bd. 170.2017, S. 306-319

[Imp.fact.: 2,895]

**Hosseini, Seyed Ali; Eshghinejadfard, Amir; Darabiha, N.; Thévenin, Dominique**

Weakly compressible Lattice Boltzmann simulations of reacting flows with detailed thermo-chemical models

In: Computers and mathematics with applications: an international journal - Amsterdam [u.a.]: Elsevier Science, insges. 18 S., 2017

[Imp.fact.: 1,531]

**Hunger, Franziska; Zulkifli, Meor F.; Williams, Benjamin A. O.; Beyrau, Frank; Hasse, Christian**

Comparative flame structure investigation of normal and inverse turbulent non-premixed oxy-fuel flames using experimentally recorded and numerically predicted Rayleigh and OH-PLIF signals

In: Proceedings of the Combustion Institute - Amsterdam [u.a.]: Elsevier, Bd. 36.2017, 2, S. 1713-1720

[Imp.fact.: 3,214]

**Janiga, Gábor; Stucht, Daniel; Bordás, Róbert; Temmel, Erik; Seidel-Morgenstern, Andreas; Thévenin, Dominique; Speck, Oliver**

Noninvasive 4D flow characterization in a stirred tank via phase-contrast magnetic resonance imaging

In: Chemical engineering & technology: industrial chemistry, plant equipment, process engineering, biotechnology - Weinheim: Wiley-VCH Verl.-Ges, Bd. 40.2017, 7, S. 1370-1327

[Imp.fact.: 2,051]

**Jokiel, Michael; Wagner, Lisa-Maria; Mansour, Michael; Kaiser, Nicolas Maximilian; Zähringer, Katharina; Janiga, Gábor; Nigam, Krishna D. P.; Thévenin, Dominique; Sundmacher, Kai**

Measurement and simulation of mass transfer and backmixing behavior in a gas-liquid helically coiled tubular reactor

In: Chemical engineering science - Amsterdam [u.a.]: Elsevier Science, Bd. 170.2017, S. 410-421

**Karali, Mohamed A.; Specht, Eckehard; Herz, Fabian; Mellmann, Jochen**

Different camera and light positions to facilitate image analysis processing in rotary drums studies

In: Powder technology: an international journal on the science and technology of wet and dry particulate systems - Amsterdam [u.a.]: Elsevier Science, Bd. 306.2017, S. 55-60

[Imp.fact.: 0,991]

**Kerst, Kristin; Roloff, Christoph; Medeiros de Souza, Luis G.; Bartz, Antje; Seidel-Morgenstern, Andreas; Thévenin, Dominique; Janiga, Gábor**

CFD-DEM simulations of a fluidized bed crystallizer

In: Chemical engineering science - Amsterdam [u.a.]: Elsevier Science, Bd. 165.2017, S. 1-13

[Imp.fact.: 2,750]

**Kováts, Péter; Thévenin, Dominique; Zähringer, Katharina**

Characterizing fluid dynamics in a bubble column aimed for the determination of reactive mass transfer

In: Heat and mass transfer: research journal - Berlin: Springer, insges. 9 S., 2017

[Imp.fact.: 1,233]

**Kováts, Péter; Thévenin, Dominique; Zähringer, Katharina**

Investigation of mass transfer and hydrodynamics in a model bubble column

In: Chemical engineering & technology: industrial chemistry, plant equipment, process engineering, biotechnology  
- Weinheim: Wiley-VCH Verl.-Ges, Bd. 40.2017, 8, S. 1434-1444  
[Imp.fact.: 2,051]

**Liu, Xiaoyan; Hu, Zhou; Wu, Weining; Zhan, Jiesi; Herz, Fabian; Specht, Eckeard**

DEM study on the surface mixing and whole mixing of granular materials in rotary drums  
In: Powder technology: an international journal on the science and technology of wet and dry particulate systems  
- Amsterdam [u.a.]: Elsevier Science, Bd. 315.2017, S. 438-444  
[Imp.fact.: 0,991]

**Mansour, M.; Liu, Z.; Janiga, Gabor; Nigam, K. D. P.; Sundmacher, Kai; Thévenin, Dominique; Zähringer, Katharina**

Numerical study of liquid-liquid mixing in helical pipes  
In: Chemical engineering science - Amsterdam [u.a.]: Elsevier Science, Bd. 172.2017, S. 250-261  
[Imp.fact.: 2,750]

**Medeiros DeSouza, Luís G.; Janiga, Gábor; Thévenin, Dominique**

Multi-objective optimisation of the model parameters for the realisable k-[epsilon] turbulence model  
In: Progress in computational fluid dynamics: PCFD; an international journal - Milton Keynes: Inderscience Enterprises,  
Bd. 17.2017, 2, S. 90  
[Imp.fact.: 0,228]

**Meißner, Christian; Tröger, Johannes W.; Kozlov, Dimitrii N.; Beyrau, Frank; Seeger, Thomas**

Comparison of Raman-active crystals as a narrowband probe light source for picosecond three-color vibrational CARS thermometry  
In: Journal of Raman spectroscopy: JRS; an international journal for original work in all aspects of Raman Spectroscopy, including higher order processes and also Brillouin- and Rayleigh scattering - Chichester [u.a.]: Wiley, Bd. 48.2017, 8, S. 1026-1032  
[Imp.fact.: 2,969]

**Meißner, Christian; Tröger, Johannes W.; Kozlov, Dimitrii N.; Beyrau, Frank; Seeger, Thomas**

Three-color vibrational CARS thermometry of fuel-rich ethylene/air flames using a potassium gadolinium tungstate Raman-active crystal as a source of narrowband probe radiation  
In: Applied optics - Washington, DC: Optical Soc. of America, Vol. 56.2017, 11, S. E77-E83  
[Imp.fact.: 1,650]

**Meuschke, Monique; Voß, Samuel; Beuing, Oliver; Preim, Bernhard; Lawonn, Kai**

Combined visualization of vessel deformation and hemodynamics in cerebral aneurysms  
In: IEEE transactions on visualization and computer graphics: TVCG - New York, NY: IEEE, Bd. 23.2017, 1, S. 761-770  
[Imp.fact.: 2,840]

**Meuschke, Monique; Voß, Samuel; Beuing, Oliver; Preim, Bernhard; Lawonn, Kai**

Glyph-based comparative stress tensor visualization in cerebral aneurysms  
In: Computer graphics forum: the international journal of the Eurographics Association - Oxford: Wiley-Blackwell, Bd. 36.2017, 3, S. 99-108  
[Imp.fact.: 1,611]

**Meyer, Jan; Daróczy, L.; Thévenin, Dominique**

Shape optimization of the pick-up tube in a pitot-tube jet pump  
In: Journal of fluids engineering - New York, NY: ASME, Vol. 139.2017, 2, Art. FE-16-1089, insgesamt 11 S.  
[Imp.fact.: 1,437]

**Mohammadpour, Kamyar; Woche, Hermann; Specht, Eckeard**

CFD Simulation of parallel flow mixing in a packed bed using porous media model and experiment validation  
In: Journal of chemical technology and metallurgy: JCTM - Sofia: University of Chemical Technology and Metallurgy, Bd.

52.2017, 3, S. 475-484

**Nafsun, Aainaa Izyan Binti; Herz, Fabian; Specht, Eckeard; Komossa, H.; Wirtz, S.; Scherer, Viktor**

Thermal bed mixing in rotary drums for different operational parameters

In: Chemical engineering science - Amsterdam [u.a.]: Elsevier Science, Bd. 160.2017, S. 346-353

[Imp.fact.: 1,073]

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

Thermographic laser Doppler velocimetry using the phase-shifted luminescence of BAM:Eu 2+ phosphor particles for thermometry

In: Optics express: the international electronic journal of optics - Washington, DC: Soc, Bd. 25.2017, 10, S. 11833-11843

[Imp.fact.: 3,148]

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

Heat release rate variations in high hydrogen content premixed syngas flames at elevated pressures - effect of equivalence ratio

In: International journal of hydrogen energy: official journal of the International Association for Hydrogen Energy - New York, NY [u.a.]: Elsevier, Bd. 42.2017, 10, S. 7029-7044

[Imp.fact.: 3,582]

**Redemann, Tino; Specht, Eckeard**

Mathematical model to investigate the influence of circulation systems on the firing of ceramics

In: Energy procedia - Amsterdam [u.a.]: Elsevier, Bd. 120.2017, S. 620-627

**Rzehak, Roland; Krauß, Manuel; Kováts, Péter; Zähringer, Katharina**

Fluid dynamics in a bubble column: New experiments and simulations

In: International journal of multiphase flow - Oxford: Pergamon Press, Bd. 89.2017, S. 299-312

[Imp.fact.: 2,509]

**Saalfeld, Patrick; Luz, Maria; Berg, Philipp; Preim, Bernhard; Saalfeld, Sylvia**

Guidelines for quantitative evaluation of medical visualizations on the example of 3D aneurysm surface comparisons

In: Computer graphics forum: the international journal of the Eurographics Association - Oxford: Wiley-Blackwell, 2017;

<http://dx.doi.org/10.1111/cgf.13262>

[Imp.fact.: 1,611]

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

Virtual inflation of the cerebral artery wall for the integrated exploration of OCT and histology data

In: Computer graphics forum: the international journal of the Eurographics Association - Oxford: Wiley-Blackwell, Bd.

36.2017, 8, S. 57-68

[Imp.fact.: 1,611]

**Sandaka, Gourisankar; Al-Karawi, Janan; Specht, Eckeard; Silva, Monica**

Thermophysical properties of lime as a function of origin (Part 4): Thermal conductivity

In: Cement, lime, gypsum: ZKG international - Gütersloh: Bauverl. BV, Bd. 52.2017, 1, S. 36-41

[Imp.fact.: 0,187]

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

Implementing multi-directional molecular diffusion terms into Reaction Diffusion Manifolds (REDIMs)

In: Proceedings of the Combustion Institute - Amsterdam [u.a.]: Elsevier, Bd. 36.2017, 1, S. 673-679

[Imp.fact.: 3,214]

**Schulz, Florian; Beyrau, Frank**

The influence of flash-boiling on spray-targeting and fuel film formation

In: Fuel: the science and technology of fuel and energy - New York, NY [u.a.]: Elsevier, Bd. 208.2017, S. 587-594

[Imp.fact.: 4,601]

**Thévenin, Dominique; Janiga, Gábor; Berg, Philipp**

Comparison of pressure reconstruction approaches based on measured and simulated velocity fields  
In: Current directions in biomedical engineering - Berlin: De Gruyter, Bd. 3.2017, 2, S. 309-312

**Török, János; Lévy, Sára; Szabó, Balázs; Somfai, Ellák; Wegner, Sandra; Stannarius, Ralf; Börzsönyi, Tamás**

Arching in three-dimensional clogging

In: The European physical journal / Web of Conferences - Les Ulis: EDP Sciences, Vol. 140, Section Granular flow, Art. 03076, insgesamt 4 S., 2017

[Konferenz: 8th International Conference on Micromechanics on Granular Media, Powders and Grains 2017, Montpellier, France, July 3-7, 2017]

**Tuaamah Al-Hasnawi, Adnan Ghareeb; Qayyum, Abdul; Specht, Eckehard**

Flow mixing in the gap between the cars in tunnel kilns

In: Energy procedia - Amsterdam [u.a.]: Elsevier, Bd. 120.2017, S. 635-642

**Yin, Zhiyao; Fond, Benoit; Eckel, Georg; Abram, Christopher; Meier, Wolfgang; Boxx, Isaac; Beyrau, Frank**

Investigation of BAM - Eu 2+ particles as a tracer for temperature imaging in flames

In: Combustion and flame: the journal of the Combustion Institute - Amsterdam [u.a.]: Elsevier Science, Bd. 184.2017, S. 249-251

[Imp.fact.: 3,663]

**Yu, Hai; Engel, Sebastian; Janiga, Gábor; Thévenin, Dominique**

A review of hemolysis prediction models for computational fluid dynamics

In: Artificial organs: official journal of the International Federation for Artificial Organs and the International Faculty for Artificial Organs - Oxford [u.a.]: Wiley-Blackwell, Bd. 41.2017, 7, S. 603-621

[Imp.fact.: 2,403]

**Zähringer, Katharina; Wagner, Lisa-Maria; Thévenin, Dominique; Siegmund, Patrick; Sundmacher, Kai**

Particle-image-velocimetry measurements in organic liquid multiphase systems for an optimal reactor design and operation

In: Journal of visualization - Berlin: Springer, insges. 13 S., 2017

[Imp.fact.: 0,950]

**Begutachtete Buchbeiträge**

**Abdelsamie, Abouelmagd; Janiga, Gábor; Chi, Cheng; Thévenin, Dominique**

Turbulence structure analysis of DNS data using DMD and SPOD - mixing jet and channel flow

In: Progress in Turbulence VII: Proceedings of the iTi Conference in Turbulence 2016 - Cham: Springer International Publishing, S. 199-204, 2017 - (Springer Proceedings in Physics; 196)

[Konferenz: iTi Conference in Turbulence 2016, Bertinoro, Italy, 7. - 9. September, 2016]

**Behrendt, Benjamin; Berg, Philipp; Preim, Bernhard; Saalfeld, Sylvia**

Combining pseudo chroma depth enhancement and parameter mapping for vascular surface models

In: VCBM 2017: Eurographics Workshop on Visual Computing for Biology and Medicine - Eurographics Ass.; <https://diglib.org/443/handle/10.2312/vcbm20171250>

[Workshop: Eurographics Workshop on Visual Computing for Biology and Medicine, VCBM 2017, Bremen, Germany, Bremen, Germany, September 07-08, 2017]

**Berg, Philipp; Daróczy, L.; Janiga, Gabor**

Virtual stenting for intracranial aneurysms

In: Computing and visualization for intravascular imaging and computer-assisted stenting - Amsterdam, [Netherlands]: Academic Press, S. 371-411, 2017

**Butscher, Daniel; Sauerhering, Jörg; Beyrau, Frank; Schmidt, Jürgen**

Untersuchung der Spraycharakteristik für die Effizienzsteigerung von rücklaufgeregelten Dralldruckdüsen



In: 13. Magdeburger Maschinenbau-Tage 2017: autonom - vernetzt - nachhaltig, 27. und 28. September 2017:  
Tagungsband - Magdeburg: Universitätsbibliothek, S. 255-264  
[Konferenz: MMT2017]

**Cheng, Chi; Janiga, Gabor; Zähringer, Katharina; Thévenin, Dominique**

Indirect measurement of heat release in hydrogen flames using species correlations

In: Verbrennung und Feuerung: 28. Deutscher Flammentag, Darmstadt, 06. und 07. September 2017 - Düsseldorf: VDI Verlag, S. 625-636 - (VDI-Berichte; 2302)

[Tagung: 28. Deutscher Flammentag, Darmstadt, 06. und 07. September 2017]

**Cleynen, Olivier; Kerikous, Emeel; Hoerner, Stefan; Thévenin, Dominique**

Influence of flotation bodies in the power characteristics of a free-stream water wheel

In: Computational & experimental methods in multiphase & complex flow IX - Southampton [u.a.]: WIT Press, S. 55-60, 2017

**Hellmann, Robin; Jochmann, Paul; Stapf, Karl Georg; Schuenemann, Erik; Daróczy, László; Thévenin, Dominique**

Towards design optimization of high-pressure gasoline injectors using Genetic Algorithm coupled with Computational Fluid Dynamics (CFD)

In: 28th European Conference Liquid Atomization and Spray Systems: 6th-8th September 2017, Valencia, Spain: ILASS 2017 - València: Editorial Universitat Politècnica de València, insges. 8 S.

[Konferenz: 28th European Conference Liquid Atomization and Spray Systems, Valencia, Spain, 6th - 8th September 2017]

**Roloff, Christoph; Berg, Philipp; Redel, Thomas; Janiga, Gábor; Thevenin, Dominique**

Tomographic particle image velocimetry for the validation of hemodynamic simulations in an intracranial aneurysm

In: 2017 39th Annual International Conference of the IEEE Engineering in Medicine and Biology Society (EMBC): July 11-15, 2017, International Convention Center (ICC), Jeju Island, Korea - Piscataway, NJ: IEEE, S. 1340-1343

[Konferenz: 2017 39th Annual International Conference of the IEEE Engineering in Medicine and Biology Society (EMBC), Jeju Island, Korea, July 11-15, 2017]

**Rottengruber, Hermann; Wagner, Thilo; Beyrau, Frank; Dragomirov, Plamen; Schaub, Maximilian**

Sprayvermessung einer Benzin-Wasser-Emulsion

In: 10. Tagung Diesel- und Benzindirekteinspritzung 2016: Inklusive Gaseinblasung - Wiesbaden: Springer Fachmedien Wiesbaden, S. 381-402, 2017

[Kongress: 10. Tagung Diesel- und Benzindirekteinspritzung 2016, 24. - 25. November, Berlin]

**Saalfeld, Sylvia; Berg, Philipp; Hirsch, Jan; Preim, Bernhard**

Uncertainty visualization of ensemble hemodynamic simulations for a cerebral bifurcation aneurysm

In: CURAC 2017 Tagungsband: 16. Jahrestagung der Deutschen Gesellschaft für Computer- und Roboterassistierte Chirurgie (CURAC): 5.-7. Oktober 2017, Hannover - Garbsen: PZH Verlag, S. 95-100

[Tagung: 16. Jahrestagung der Deutschen Gesellschaft für Computer- und Roboterassistierte Chirurgie (CURAC), Hannover, 5.-7. Oktober 2017]

## **Abstracts**

**Berg, Philipp; Daróczy, László; Janiga, Gábor; Beuing, Oliver**

A semi-automatic simulation environment for the identification of a patient-specific aneurysm treatment

In: Recent progress and developments: 3rd Conference on Image-Guided Interventions & Focus Neuroradiologie, November 6 and 7, 2017, Magdeburg, Germany: abstract book - Magdeburg, 2017, Abs. ID 29, Seite 5

[Konferenz: 3rd Conference on Image-Guided Interventions & Focus Neuroradiologie, Magdeburg, Germany, November 6 and 7, 2017]

**Voß, Samuel; Berg, Philipp; Janiga, Gábor; Beuing, Oliver**

Impact of stent-induced vessel deformation on the hemodynamic of intracranial aneurysms

In: Recent progress and developments: 3rd Conference on Image-Guided Interventions & Focus Neuroradiologie,

November 6 and 7, 2017, Magdeburg, Germany: abstract book - Magdeburg, 2017, Abs. ID 19, Seite 5  
[Konferenz: 3rd Conference on Image-Guided Interventions & Focus Neuroradiologie, Magdeburg, Germany, November 6 and 7, 2017]

**Voss, Samuel; Chavalla, Sharath; Juhre, Daniel; Janiga, Gábor; Beuing, Oliver**

Concept for a comprehensive simulation based tool to assist intracranial aneurysm treatment

In: International Healthcare Vision 2037: new technologies, educational goals and entrepreneurial challenges; proceedings + summary of the 5th BME-IDEA EU Conference; 11 - 13 June 2017, Magdeburg, Germany - Magdeburg: Universitätsbibliothek, S. 123-124

### **Andere Materialien**

**Chi, Cheng; Janiga, Gábor; Abdelsamie, Abouelmagd; Zähringer, Katharina; Turányi, Tamás; Thévenin, Dominique**

DNS study of the optimal chemical markers for heat release in syngas flames

In: Flow, turbulence and combustion: an international journal published in association with ERCOFTAC - Dordrecht [u.a.]: Springer Science + Business Media B.V, Bd. 98.2017, 8, S. 1117-1132  
[Imp.fact.: 1,775]

**Eger, Toni; Bol, Thomas; Thanu, Ayothi; Daróczy, László; Janiga, Gábor; Schroth, Rüdiger; Thévenin, Dominique**

Application of entropy generation to improve heat transfer of heat sinks in electric machines

In: Entropy: an international and interdisciplinary journal of entropy and information studies - Basel: MDPI, Vol. 19.2017, 4, Art. 255, insgesamt 15 S.  
[Imp.fact.: 1,821]

**Misra, Anurag; Meideiros de Souza, Luis; Illner, M.; Hohl, L.; Kraume, M.; Repke, J.-U.; Thévenin, Dominique**

Simulating separation of a multiphase liquid-liquid system in a horizontal settler by CFD

In: Chemical engineering science - Amsterdam [u.a.]: Elsevier Science, Bd. 167.2017, S. 242-250  
[Imp.fact.: 2,750]

### **Dissertationen**

**Abdelsamie, Abouelmagd; Thévenin, Dominique [GutachterIn]**

Direct numerical simulations of turbulent flow and spray combustion. - Magdeburg, 2017, xxv, 165 Seiten, Illustrationen  
[Literaturverzeichnis: Seite 151-165]

**Abdelwahab, Abdulkadir Ahmed Alnour A.; Specht, Eckehard [GutachterIn]; Herz, Fabian [GutachterIn]**

Modeling of solid reaction behavior in direct heated rotary kilns. - Magdeburg, 2017, X, 133 Seiten, Illustrationen  
[Literaturverzeichnis: Seite 111-116]

**Al-Khalaf, Ali Mohammed Ridha; Specht, Eckehard [GutachterIn]; Thévenin, Dominique [GutachterIn]**

Experimental and numerical analysis of flow mixing in packed beds. - Magdeburg, 2017, viii, 131 Seiten, Illustrationen, 30 cm  
[Literaturverzeichnis: Seite 127-129]

**Eger, Toni; Specht, Eckehard [AkademischeR BetreuerIn]; Thévenin, Dominique [AkademischeR BetreuerIn]**

Zur Analyse und Bewertung der Wärmeübertragung am Beispiel von elektrischen Generatoren. - Aachen Shaker Verlag, 2017, 1. Auflage, ix, 210 Seiten, 58 Illustrationen, Diagramme, 21 cm, 333 g - (Berichte aus der Strömungstechnik), ISBN 978-3-8440-5470-5

**Eshghinejadfard, Amir; Thévenin, Dominique [AkademischeR BetreuerIn]**

Lattice Boltzmann simulation of laminar and turbulent two-phase flows. - Magdeburg, 2017, xx, 144 Seiten, Illustrationen  
[Literaturverzeichnis: Seite 122-136]

**Moghaddam, Alireza Attari; Tsotsas, Evangelos [AkademischeR BetreuerIn]; Thévenin, Dominique [AkademischeR BetreuerIn]**

Parameter estimation and assessment of continuum models of drying on the basis of pore network simulations.

- Barleben docupoint Verlag, 2017, xiii, 129 Seiten, Diagramme, 21 cm - (Docupoint Wissenschaft; Micro-macro transactions; Volume 27), ISBN 978-3-86912-130-7

**Rein, Carsten; Specht, Ekehard [AkademischeR BetreuerIn]; Herz, Fabian [AkademischeR BetreuerIn]**

Analyse und Optimierung von wassergekühlten Transportrollen in Vorwärmöfen von Bandverzinkungsanlagen.

- Magdeburg, 2017, XII, 108, XIII - XXVIII Seiten, Illustrationen

[Literaturverzeichnis: Seite XIII-XVII]

**Wegner, Sandra; Stannarius, Ralf [GutachterIn]**

Experimentelle Untersuchung formanisometrischer Granulate im Scherfluss - Partikel im Split-Bottom-Schercontainer und im Silo. - Magdeburg, 2017, v, 127 Seiten, Illustrationen

# INSTITUT FÜR VERFAHRENSTECHNIK

Universitätsplatz 2, 39106 Magdeburg  
Tel. +49 (0)391 67 58402, Fax +49 (0)391 67 11209  
udo.reichl@ovgu.de

## 1. Leitung

Prof. Dr.-Ing. Udo Reichl (geschäftsführender Leiter)  
Prof. Dr.-Ing. habil. Dr.h.c. Andreas Seidel-Morgenstern  
Prof. Dr.-Ing. habil. Martin Sommerfeld  
Prof. Dr.-Ing. habil. Kai Sundmacher  
Prof. Dr.-Ing. habil. Evangelos Tsotsas  
Prof. Dr. Ir. Berend van Wachem

## 2. HochschullehrerInnen

Prof. Dr.-Ing. Udo Reichl  
Prof. Dr.-Ing. habil. Dr.h.c. Andreas Seidel-Morgenstern  
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  
apl. Prof. Dr. rer. nat. habil. Heike Lorenz  
Hon.-Prof. Dr.-Ing. Mirko Peglow  
Jun.-Prof. Dr.-Ing. Andreas Bück  
PD Dr. rer. nat. habil. Yvonne Genzel

## 3. Forschungsprofil

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

3. Mehrphasenströmungen (Prof. Dr.-Ing. habil. Martin Sommerfeld)

- Mehrphasenströmungen
- Partikeltechnologie
- Numerische Mechanik

4. 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

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

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

6. Mechanische Verfahrenstechnik (Prof. Dr. Ir. Berend van Wachem)

- Partikeltechnologie
- Mehrphasenströmungen
- Numerische Mechanik

**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 Biologia Experimental e Tecnológica, Lissabon (Portugal)
- IPT Pergande, Weißandt-Gölzau
- 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. Udo Reichl

**Projektbearbeitung:** Dr. Dirk Benndorf

**Förderer:** Bund; 01.12.2015 - 30.11.2018

### **Biogas-Messprogramm III - Teil 2: Systemmikrobiologie; Teilvorhaben 3: Enzymatische Biodiversität**

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

Die in Deutschland betriebenen Biomasse-Biogasanlagen wurden bereits im Rahmen der Biogas-Messprogramme I und II systematisch hinsichtlich Leistung, Funktion, Betriebszuverlässigkeit und Wirtschaftlichkeit untersucht. Jedoch fehlt bislang eine ebenso systematische Erfassung der in Praxis-Biogasanlagen beheimateten Mikroflora.

Im Rahmen des Biogas-Messprogramms III soll daher ein Fokus der Arbeiten auf die Systemmikrobiologie der Biogasanlagen in Deutschland gelegt werden. Ziel ist die Aufklärung des Einflusses abiotischer Prozessparameter auf die mikrobiellen Lebensgemeinschaften in einem Biogasreaktor und deren Stoffwandlungseigenschaften.

Die Projektaktivitäten werden koordiniert von Dr. Dirk Benndorf

(<https://forschung-sachsen-anhalt.de/pl/benndorf-84560>).

---

**Projektleitung:** Prof. Dr. Udo Reichl

**Projektbearbeitung:** Benndorf, Dr. Dirk

**Förderer:** Fördergeber - Sonstige; 01.06.2017 - 30.05.2020

### **Biokatalysatoren in Bioreaktoren: Monitoring, Regelung und multikriterielle Optimierung von Biogasprozessen**

Hauptziel des Vorhabens ist die Charakterisierung der mikrobiellen Stoffwechselaktivitäten in semi-kontinuierlich betriebenen Biogasreaktoren auf Basis vorrangig auftretender mikrobieller Proteine und Enzyme. Die Ergebnisse dieser Studie sollen zur Entwicklung von Strategien zur Unterstützung der Hydrolyse von nachwachsenden Rohstoffen (multikriterielle Optimierung) mittels der gezielten Zugabe von ergänzenden Enzymen pilzlichen Ursprungs komplementär zum bereits vorhandenen endogenen Hydrolysepotenzial dienen. Im Rahmen von Teilvorhaben II erfolgt die systemanalytische Begleitforschung zu den mikrobiellen Stoffwandlungsprozessen der im Teilvorhaben I stattfindenden Fermentationen. Ziel ist die Ermittlung der Zusammensetzung der mikrobiellen Gemeinschaften auf taxonomischer und funktioneller Ebene, das Monitoring von Veränderungen in der Struktur der mikrobiellen Gemeinschaften während der durchgeführten Fermentationen und der jeweiligen prozesstechnischen Variation sowie die Ermittlung von Veränderungen in der metabolischen Aktivität der mikrobiellen Gemeinschaft. Hierzu soll ein kombinierter Ansatz bestehend aus der kontinuierlichen Erfassung der mikrobiellen Populationsdynamik mittels DNA-basierten TRFLP-Fingerprints und punktuell erfolgreicher Charakterisierung der Zusammensetzung der mikrobiellen Lebensgemeinschaft und deren metabolischem Potential mittels hochauflösenden und kombinierten OMICS-Technologien angewandt werden. Durch den bioinformatischen Abgleich aller erhaltenen Datensätze soll ein funktionelles Netzwerk der Systemmikrobiologie erstellt werden.

---

**Projektleitung:** Prof. Dr. Udo Reichl

**Projektbearbeitung:** Dr. Dirk Benndorf

**Förderer:** Bund; 01.11.2016 - 31.10.2019

### **de.NBI-Partner: MetaProteomanalyzer Service**

Die Metaproteomik zielt auf die Erforschung zellulärer Funktionen komplexer Lebensgemeinschaften und ergänzt die Metagenomik und Metatranscriptomik als häufig eingesetzte Werkzeuge in der mikrobiellen Ökologie. Bioinformatische Werkzeuge, die für die Proteomik von Reinkulturen entwickelt wurden, können nicht zufriedenstellend als Ergebnis benutzt werden. So führen Datenbanksuchen für die Proteinidentifizierung mit Metagenomsequenzen zu einer hohen Zahl redundanten Hits in den Suchergebnissen in Bezug auf Taxonomie und Funktion identifizierter Proteine. Für eine bessere Auswertung von Metaproteomdaten wurde deshalb MetaProteomAnalyzer (MPA) Software entwickelt. Im Rahmen von MetaProtServ soll das benutzerfreundliche Programm mit einer graphischen Oberfläche als Webservice verfügbar gemacht werden, um mehr Wissenschaftler von den Vorteilen der Metaproteomik zu überzeugen. Gezieltes

Training von Anwendern und ein individueller Support sollen die Zugänglichkeit dieser Software in der wissenschaftlichen Gemeinschaft erleichtern. Die Funktionalität und die Wartungsfreundlichkeit werden für den zukünftigen Webservice sowie für eine eigenständige Version parallel basierend auf einem gemeinsamen Code und einer gemeinsamen Struktur weiterentwickelt.

Die Projektaktivitäten werden koordiniert von Dr. Dirk Benndorf (<https://forschung-sachsen-anhalt.de/pl/benndorf-84560>).

---

**Projektleitung:** Prof. Dr.-Ing. habil. Evangelos Tsotsas  
**Projektbearbeitung:** MSc. Reihaneh Pashminehazar, Dr.-Ing. Abdolreza Kharaghani  
**Kooperationen:** Dr.-Ing. Abdolreza Kharaghani  
**Förderer:** Deutsche Forschungsgemeinschaft (DFG); 01.09.2013 - 08.10.2017

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

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

---

**Projektleitung:** Prof. Dr.-Ing. habil. Evangelos Tsotsas  
**Projektbearbeitung:** Ahmad, MSc. Faez  
**Kooperationen:** Dr.-Ing. Abdolreza Kharaghani; Prof. Prat, IMFT Toulouse, Frankreich  
**Förderer:** Deutsche Forschungsgemeinschaft (DFG); 01.06.2017 - 31.05.2020

**Advanced drying theory of capillary porous media from high-performance-computing pore network simulations**

Drying of porous media is central to many environmental and engineering applications. In this context, this project aims at performing a major breakthrough in the modelling of the drying process in capillary porous media. The work is based on a combination of state of the art pore network modelling, pore network simulations and new experiments. Two- and three-equation continuum models are developed taking into account the non-local equilibrium condition of the vapour and from the distinction between the percolating and non-percolating liquid clusters. The secondary capillary structures corresponding to the liquid trapped in various geometrical singularities of the pore space is characterised experimentally and from numerical simulations and taken into account as a distinct and specific phase in the continuum models.

The pore network models are developed so as to perform high performance computing (HPC) simulations, which is necessary to meet the length scale separation constraints allowing the computation of continuum model parameters from pore network simulations.

Experiments of drying with a dissolved species (salt) are performed in order to obtain additional validation of the pore network and continuum models developed in the project, noting that situations where a dissolved species is present in the liquid are of paramount importance in many applications. In the present project, the formation and distribution of salt crystallisation spots are used as key validation factors of the models and as physical signatures of the drying process, especially as regards the impact of the secondary capillary structures developing during drying.

---

**Projektleitung:** Prof. Dr.-Ing. habil. Evangelos Tsotsas  
**Projektbearbeitung:** Msc. Yasaman Jabbari, Dr.-Ing. Abdolreza Kharaghani  
**Kooperationen:** Dr.-Ing. Abdolreza Kharaghani  
**Förderer:** Deutsche Forschungsgemeinschaft (DFG); 01.06.2016 - 31.05.2019

**Discrete-continuous transition for the wetting of porous materials**

Continuous models for the wetting of porous materials are usually oversimplified and, thus, cannot properly describe the influence of micro-structural features of the material. Goal of the project is to simulate the wetting of micro-structured porous materials in a discrete way (by pore networks) and then use the simulation results in new and superior continuous models which are easy to solve whereas preserving as more details of the structure-property relation as possible.

**Projektleitung:** Prof. Dr.-Ing. habil. Evangelos Tsotsas

**Projektbearbeitung:** Dipl.-Ing. Torsten Hoffmann

**Förderer:** Bund; 01.09.2016 - 31.08.2018

**Entwicklung einer neuartigen Wirbelschicht-Technologie zur kontinuierlichen Behandlung von Feststoffen**

Together with partners from industry, new equipment and process solutions for fluidized bed processes are developed. They should combine continuous operation with the advantages of cylindrical vessel geometry. Moreover, operation at elevated temperatures and with strongly aggregating, nano-structured materials should be possible. The challenges are addressed by lab and pilot scale experiments, CFD computations, and fluidization process models.

---

**Projektleitung:** Prof. Dr.-Ing. habil. Evangelos Tsotsas

**Projektbearbeitung:** Dr. Neli Hampel

**Förderer:** BMWi/AIF; 01.12.2016 - 30.09.2018

**Heißdampftrocknung: Kinetik, Auslegung und Wirtschaftlichkeit im Vergleich zur Heißlufttrocknung**

Superheated steam drying is investigated for the first time the whole way up, from the drying kinetics of single particles to fluidized bed drying. Biological materials are used to this purpose, namely rice and wood spheres. Single particle experiments are conducted in a magnetic suspension balance and described by advanced continuous models. Scale-up to the fluidized bed is performed by modelling and validated by experiments. Moreover, a complete benchmarking against hot air drying is conducted, so that advantages of the superheated steam process in energy consumption and economics can be reliably worked out.

---

**Projektleitung:** Prof. Dr.-Ing. habil. Evangelos Tsotsas

**Projektbearbeitung:** Roßberg, MSc. Jari

**Kooperationen:** Prof. Dr. Frank Beyrau, FVST/OVGU; Prof. Dr.-Ing. Marin Wolter, FEIT/OVGU, as leader of the SmartMES consortium

**Förderer:** Land (Sachsen-Anhalt); 01.04.2017 - 31.03.2020

**Intelligent Multi-Energy Systems (SmartMES)**

Coupling elements between power, gas and heat networks are investigated and modelled from the process engineering point of view. Embedded in a consortium with electrical engineering, we are aiming at efficient and stable networks fed with regenerative energy forms.

---

**Projektleitung:** Prof. Dr.-Ing. habil. Evangelos Tsotsas

**Projektbearbeitung:** Pramudita, MSc. Daniel

**Förderer:** Stiftungen - Sonstige; 01.03.2017 - 29.02.2020

**Intensified processes for food and other materials**

We are exploring high-temperature spray drying processes that can be used to produce various conventional products or fully new classes of dry nanoparticles. While anorganic materials are an obvious target, we are also exploring the production of organic materials (i.e. food components), which may be possible despite of high temperature due to the extremely short drying time.

---

**Projektleitung:** Prof. Dr.-Ing. habil. Evangelos Tsotsas

**Projektbearbeitung:** Singh, MSc. Abhinandan Kumar

**Förderer:** Deutsche Forschungsgemeinschaft (DFG); 01.06.2017 - 31.05.2020

**Morphology of spray fluidized bed agglomerates**

The working group was the first to develop stochastic microscale models for spray fluidized bed agglomeration. However, such models are either coarse in respect to agglomerate morphology or computationally very expensive (ballistic algorithms). This project explores new possibilities for tracking morphology at low computational cost during the process. Agglomeration is decisive for the instant properties of food and pharmaceutical products.

---

**Projektleitung:** Prof. Dr.-Ing. habil. Evangelos Tsotsas



**Projektbearbeitung:** Hafiz, MSc. Tariq Mahmood

**Kooperationen:** Dr.-Ing. Abdolreza Kharaghani

**Förderer:** Stiftungen - Sonstige; 01.10.2017 - 30.09.2020

**Pore network model for dynamic wetting of porous materials**

Goal of this project is to essentially upgrade pore networks models that the group has developed for the wetting of porous materials. Wetting is of great importance for, e.g., the application properties of food components and the operability of electrodes. Simulation studies are accompanied by microfluidic experiments.

---

**Projektleitung:** Prof. Dr.-Ing. habil. Evangelos Tsotsas

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

**Kooperationen:** Dr.-Ing. Abdolreza Kharaghani

**Förderer:** Stiftungen - Sonstige; 01.01.2014 - 28.02.2018

**Pore network modeling of superheated steam drying**

Evaporation at a hot-spot and condensation at a cold-spot can transport heat with a higher effective thermal conductivity than that of any existing material. This principle is used in so-called heat pipes. Here, a specific type of heat-pipe evaporator is considered, which involves evaporation out of a wet porous wick in contact with a hot fin into vapor transportation grooves. Pore network models are used for simulating transport phenomena and liquid distribution in the wick, aiming at the identification of optimal operating conditions and wick structures. Novel pore network models are developed for superheated steam drying. Contrary to conventional continuous approaches, such models can capture the influence of product micro-structure on the drying process. Efficient processing, which is adapted to product features and quality is the ultimate goal.

---

**Projektleitung:** Prof. Dr.-Ing. habil. Evangelos Tsotsas

**Projektbearbeitung:** Rahimi, MSc. Arman

**Förderer:** Industrie; 01.06.2017 - 31.05.2019

**Pore network models for the coating of substrates with suspensions**

New and more efficient catalysts are developed by use of novel pore network simulation tools. Such simulation tools have the ability of describing liquid infiltration and coating in dependence of given or evolving substrate structure.

---

**Projektleitung:** Prof. Dr.-Ing. habil. Evangelos Tsotsas

**Projektbearbeitung:** Lu, Xiang

**Kooperationen:** Dr.-Ing. Abdolreza Kharaghani

**Förderer:** Deutsche Forschungsgemeinschaft (DFG); 01.11.2016 - 31.10.2019

**Scale transition from discrete to continuous models for drying of porous media**

The scale transition from pore network models to continuous models (one or two equations) of drying has been pioneered in a previous project for rather uniformly structured porous media. Now this investigation is extended to porous media with specific types of micro-structure (e.g. spatially correlated systems of small and large pores). The key question is, how micro-structural features can be reflected in the parameters of continuous models, breaking path for fast but realistic and accurate process simulations. New algorithmic approaches that would accelerate computations for the underlying pore networks are also considered.

---

**Projektleitung:** Prof. Dr.-Ing. Andreas Bück

**Projektbearbeitung:** Fischer, C.; Sondej, F.; Schmidt, M.; Rieck, C.; Jiang, Z.

**Kooperationen:** Dr.-Ing. Markus Henneberg, AVA GmbH; Glatt Ingenieurtechnik Weimar; IPT Pergande, Weißandt-Gölzau; Prof. Dr.-Ing. Evangelos Tsotsas, OvGU Magdeburg; Prof. Mirko Peglow

**Förderer:** Bund; 01.04.2013 - 30.03.2018

**InnoProfile-Transfer Nachwuchsforschungsgruppe Wirbelschichttechnik - NaWiTec**

Das am Lehrstuhl für Thermische Verfahrenstechnik (Prof. Dr.-Ing. habil. E. Tsotsas) angesiedelte Projekt befasst sich mit der Entwicklung von Methoden und experimentellen Untersuchungen zur Führung und Gestaltung strukturierter Partikel in Wirbelschichtprozessen. Wirbelschichtprozesse finden zahlreiche Anwendung, u.a. in der pharmazeutischen Industrie, der Lebensmittel- und der Düngemittelindustrie. Zielstellung ist dabei stets aus einem flüssigen Ausgangsstoff ein staubfreies, frei fließendes Granulat oder Agglomerat herzustellen. Bereits während der Herstellung

sollen den Produktpartikeln bestimmte Eigenschaften aufgeprägt werden, die in der späteren Nutzung des Produktes benötigt werden, z.B. die Partikelgröße oder die Partikelfeuchte, die wichtige Eigenschaften wie das Auflösungsverhalten oder die Transport- und Lagerfähigkeit bestimmen. Bei der Partikelbildung kommt es zur Ausbildung von Strukturen, z.B. die Schichtporosität, als auch die durch den Verbund mehrerer Partikel zu Agglomeraten entstehenden Partikelstrukturen. Da die Partikelstrukturen wesentlichen Einfluss auf die Produktcharakteristik haben, ist die genaue Kenntnis der ablaufenden strukturbildenden Prozesse von großem Interesse. Die Schwerpunkte der Forschungsarbeiten sind daher die Untersuchung und Beschreibung der strukturbildenden Prozesse, die Erprobung und Weiterentwicklung von (in-situ-)Messmethoden zur Erfassung des Strukturaufbaus sowie die Entwicklung von Regelungskonzepten zur gezielten Einstellung gewünschter Strukturen in den Produkten sein.

Zur Erreichung dieses Ziels müssen wesentliche Probleme in den Bereichen

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

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

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

- + makroskopische und diskrete Populationsbilanzmodelle
- + Strömungs- und DEM-Simulation

Experimentell stehen unter anderem folgende Geräte zur Verfügung:

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

**Projektleitung:** Prof. Dr.-Ing. Andreas Bück

**Projektbearbeitung:** Hoffmann, Dr.-Ing. T.; Mielke, L.; Idakiev, V.

**Kooperationen:** Dr.-Ing. Markus Henneberg, AVA GmbH; Glatt Ingenieurtechnik Weimar; Pergande GmbH; Prof. Dr.-Ing. Evangelos Tsotsas, OvGU Magdeburg; Prof. Dr.-Ing. Lothar Mörl; Prof. Mirko Peglow

**Förderer:** Bund; 01.11.2013 - 28.02.2017

**InnoProfile-Transfer-Verbundvorhaben "Reduzierung des Energieaufwandes bei der Partikelformulierung in Wirbelschichtprozessen"**

Dieses Projekt beschäftigt sich mit Methoden zur Reduzierung der Energiebedarfe bei der trocknenden Partikelformulierung (Coating, Granulation). Auf Grundlage der Wirbelschichttechnologie werden neue Anlagenkonzepte, Energieeinbringungsverfahren, sowie Prozessführungen untersucht.

---

**Projektleitung:** Prof. Dr.-Ing. Andreas Bück

**Projektbearbeitung:** Farid, M.

**Kooperationen:** Fraunhofer IFF, Magdeburg; Prof. Dr.-Ing. Evangelos Tsotsas, OvGU Magdeburg

**Förderer:** Stiftungen - Sonstige; 31.10.2017 - 31.08.2018

**Energetische Nutzung nachwachsender Biomassen**

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

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

---

**Projektleitung:** Prof. Dr.-Ing. Andreas Bück

**Projektbearbeitung:** Friese, L.

**Kooperationen:** Dr.-Ing. Markus Henneberg, AVA GmbH; Elamont GmbH, Bitterfeld-Wolfen; Parsum GmbH, Chemnitz; Pergande GmbH; Prof. Dr.-Ing. Evangelos Tsotsas, OvGU Magdeburg

**Förderer:** Bund; 01.11.2013 - 28.02.2017

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

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

---

**Projektleitung:** Prof. Dr.-Ing. Andreas Bück

**Projektbearbeitung:** Strenzke, G.

**Kooperationen:** Prof. Dr.-Ing. Achim Kienle, Otto-von-Guericke-Universität Magdeburg; Prof. Dr.-Ing. Evangelos Tsotsas, OvGU Magdeburg

**Förderer:** Land (Sachsen-Anhalt); 01.11.2016 - 28.10.2019

#### **Kontinuierliche Wirbelschichtsprühagglomeration**

In diesem Projekt wird die kontinuierliche Sprühagglomeration in einstufigen Wirbelschichten untersucht. Ziel ist dabei die Herausarbeitung kinetischer Daten zum Prozess, sowie die Untersuchung des dynamischen Verhaltens und der erzielbaren Produktqualität in Abhängigkeit der Prozessbedingungen.

---

**Projektleitung:** Prof. Dr.-Ing. Andreas Bück

**Projektbearbeitung:** Zarekar, S.

**Kooperationen:** Glatt Ingenieurtechnik Weimar; Prof. Dr.-Ing. Evangelos Tsotsas, OvGU Magdeburg

**Förderer:** Bund; 01.11.2013 - 28.02.2017

#### **Mathematische Modellierung der Vakuumgranulation und Vergleich mit dem konventionellen atmosphärischen Wirbelschichtprozess**

Das Ziel des WIGRATEC+-Teilprojektes ist die mathematische Modellierung eines neuen Prozesses der kombinierten Granulation und Trocknung in Luftatmosphäre bei reduziertem Druck (Vakuumgranulation) unter Berücksichtigung der Produktionskapazität, der Wahrung der Produktqualität durch Vermeidung von Deaktivierung, sowie des Einflusses des reduzierten Druckes auf die Sprühwirbelschicht. Der Kern des Modells wird populationsdynamische Ansätze für das Partikelwachstum mit Trocknungsmodellen kombinieren und somit jene Prozesse erfassen, die die Produktionskapazität der Vakuumgranulation ergeben. Zur Validierung und Parametrierung des Modells werden Messdaten für die Vakuumgranulation im Batch-Betrieb eingesetzt. Darüber hinaus wird die Parametrierung des Modells durch strömungstechnische Simulationen unterstützt. Letztere betreffen druckabhängige Aspekte, wie das Fluidisationsverhalten der Wirbelschicht, die Eindüsung und die Unterteilung des Prozessraums in eine Sprüh- und eine Trocknungszone. Das Modell wird als Instrument für das Monitoring der Aktivität während des Prozesses eingesetzt und zur gleichzeitigen Optimierung von Produktionskapazität und Aktivitätserhaltung genutzt. Als Ergebnis werden neuartige Einstellungen für die kontinuierliche Vakuumgranulation mit einem deutlichen Vorteil gegenüber dem Normaldruck-Prozess erwartet.

---

**Projektleitung:** Prof. Dr.-Ing. Andreas Bück

**Projektbearbeitung:** Chen, K.

**Kooperationen:** Glatt Ingenieurtechnik Weimar; Prof. Dr.-Ing. Evangelos Tsotsas, OvGU Magdeburg

**Förderer:** Bund; 01.11.2013 - 28.02.2017

**Mathematische Modellierung und strömungstechnische Auslegung von Rinnen- und Kolonnenapparaten für das kontinuierliche, mehrstufige Wirbelschichtcoating**

Das Ziel des Teilprojektes ist die Entwicklung einer neuen Methodik zur Anschätzung aller wesentlichen Merkmale der Produktqualität (Mittelwert und Varianz der Dicke, sowie Porosität der Coatingschicht) beim Coating in unterschiedlich konfigurierten, kontinuierlich betriebenen Wirbelschichtapparaten. Diese Methodik soll die Möglichkeit für eine schnelle, zuverlässige und auf anwendungstechnische Qualitätsvorgaben zugeschnittene Auslegung von mehrstufigen Apparaten und Anlagen für das kontinuierliche Wirbelschichtcoating eröffnen.

---

**Projektleitung:** Prof. Dr.-Ing. Andreas Bück

**Projektbearbeitung:** Meyer, K.

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

**Förderer:** Deutsche Forschungsgemeinschaft (DFG); 01.07.2015 - 30.06.2017

**Modellierung des dynamischen Verhaltens der Sprühgranulation in kontinuierlich betriebenen Wirbelschichttrinnen**

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

DFG SPP 1679, 2. Förderperiode

---

**Projektleitung:** Prof. Dr.-Ing. Andreas Bück

**Projektbearbeitung:** Mielke, L.

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

**Förderer:** Deutsche Forschungsgemeinschaft (DFG); 01.07.2017 - 30.06.2019

**Modellierung des dynamischen Verhaltens der Sprühgranulation in kontinuierlich betriebenen Wirbelschichttrinnen**

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

DFG SPP 1679, 3. Förderperiode

---

**Projektleitung:** Prof. Dr.-Ing. Andreas Bück  
**Projektbearbeitung:** Du, J.  
**Kooperationen:** Prof. Dr.-Ing. Evangelos Tsotsas, OvGU Magdeburg  
**Förderer:** Fördergeber - Sonstige; 01.09.2016 - 31.08.2019

**Spray agglomeration in continuously operated horizontal fluidised beds**

The project investigates the dynamics of continuous fluidised bed spray agglomeration in a horizontal fluidised apparatus. The focus lies on the processing of materials from food and feed industry, studying the influence of process conditions and apparatus geometry (internal baffles) on process behaviour and product quality.

---

**Projektleitung:** Prof. Dr.-Ing. Andreas Bück  
**Projektbearbeitung:** Ihlow, Dr.-Ing. P.  
**Kooperationen:** Dr.-Ing. Matthias Ihlow, MIAM GmbH; Pergande GmbH; Prof. Dr.-Ing. Evangelos Tsotsas, OvGU Magdeburg; Prof. Mirko Peglow  
**Förderer:** Bund; 01.11.2013 - 28.02.2017

**Strömungstechnische Untersuchungen und Optimierung der Hochtemperaturfiltration in Wirbelschichten**

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

---

**Projektleitung:** Prof. Dr.-Ing. habil. Dr. h.c. Andreas Seidel-Morgenstern  
**Kooperationen:** ETH Zürich, Schweiz; Friedrich-Alexander Universität Erlangen-Nürnberg, Deutschland; Max-Planck-Institut für Dynamik komplexer technischer Systeme Magdeburg; Radboud University Nijmegen, Niederlande; Syncom, Niederlande; University of Manchester, Großbritannien; University of Rouen, Frankreich; University of Strathclyde, Großbritannien  
**Förderer:** EU - HORIZONT 2020; 01.10.2016 - 30.09.2020

**CORE - Continuous Resolution and Deracemization of Chiral Compounds by Crystallization  
TRAININGSNETZWERK FÜR NACHWUCHSFORSCHER UNTERSUCHT CHIRALE ARZNEISTOFFE**

Für die Auslegung, Optimierung und Regelung effizienter Prozesse zur Gewinnung hochwertiger Produkte benötigt die Industrie hochqualifizierte akademisch trainierte Experten und geeignete Werkzeuge. Das CORE-Netzwerk wird einen Beitrag zur Herstellung spezieller pharmazeutischer Wirkstoffe leisten und 15 Nachwuchsforscher ausbilden. Ziel ist es, neue Werkzeuge und Methoden zu entwickeln, um durch Einsatz kontinuierlich arbeitender Aufreinigungsverfahren (Continuous Resolution, CORE) pharmazeutisch wirksame chirale Moleküle bereitzustellen. Ziel des Netzwerks ist es, im interdisziplinären Feld der kontinuierlichen Enantiomerentrennung einen aus Wissen und organisatorischen Fähigkeiten bestehenden Kompetenzbalken aufzubauen. Die auszubildenden multidisziplinär wirkenden Naturwissenschaftler und Ingenieure werden durch ihr spezifischen Forschungsprojekte, Netzwerkveranstaltungen, Webinare, Managementaufgaben und eine Entsendung zu einer akademischen und industriellen Partnereinrichtung ein zielgerichtetes Training erfahren. Das Forschungsziel des CORE Netzwerks ist die gemeinsame Konstruktion eines CORE- Industriebaukastens für produktspezifische gezielte kontinuierliche Enantiomerentrennungen, um für die Industrie Werkzeuge der nächsten Generation, Vorgehensweisen und Methoden für die Prozessentwicklung zu erstellen. Die maßgeblich involvierten Industriepartner werden sicherstellen, dass der CORE-Industriebaukasten die Anforderungen erfüllt und Defizite der gegenwärtig eingesetzten Techniken überwindet.

CORE bringt acht akademische und sieben Industriepartner aus den Fachgebieten Verfahrenstechnik und Chemie zusammen. In Magdeburg sind Prof. Andreas Seidel-Morgenstern, Lehrstuhlinhaber Chemische Verfahrenstechnik sowie Prof. Heike Lorenz aus dem Max-Planck-Institut für Dynamik komplexer technischer Systeme im CORE-Netzwerk beteiligt. Prof. Seidel-Morgenstern wird zwei ausländische Nachwuchsforscher betreuen, die drei Jahre lang an der Universität an der praktischen Umsetzung und mathematischen Modellierung von Beispielprozessen forschen. An das MPI werden drei Nachwuchsforscher aus dem Netzwerk für zwei bis vier Monate entsendet, um für die Modellierung

erforderliche thermodynamische und kinetische Parameter zu ermitteln und Prozessvalidierungen durchzuführen.

Das Projekt wird gefördert durch das EU-Rahmenprogramm für Forschung und Innovation Horizont 2020 mit dem Marie Skłodowska-Curie Zuwendungsvertrag Nr. 722456.

---

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

**Förderer:** Deutsche Forschungsgemeinschaft (DFG); 01.11.2013 - 31.12.2017

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

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

---

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

**Förderer:** Deutsche Forschungsgemeinschaft (DFG); 01.10.2015 - 31.03.2018

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

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

---

**Projektleitung:** Prof. Dr.-Ing. Martin Sommerfeld

**Förderer:** Deutsche Forschungsgemeinschaft (DFG); 01.07.2017 - 30.06.2019

**Analyse und Modellierung der Beschichtung von Feststoffpartikeln**

Im Rahmen des Forschungsvorhabens sollen die Grundlagen und Modelle für die Kollision von Tropfen mit größeren Feststoffpartikeln und deren Beschichtung für numerische Berechnungen mit einem Euler/Lagrange Ansatz entwickelt werden. Dafür wird die Kollision von Flüssigkeitstropfen mit größeren Feststoffpartikeln experimentell durch bildgebende Messmethoden analysiert. In eine Tropfenkette werden Feststoffpartikel mit definierter Geschwindigkeit und Frequenz geschossen. Als Ergebnis einer Kollision sind Abprall, Deposition oder Zerteilen des Tropfens zu erwarten. Der Kollisionsvorgang wird mit Hochgeschwindigkeitskameras und einer kombinierten Beleuchtung bestehend aus LED-Feldern und Laser visualisiert. Die Kollisionsergebnisse werden durch Bildverarbeitungsmethoden ausgewertet.

Für alle relevanten Einflussparameter ist es erforderlich, zunächst den Ausgang der Kollision festzustellen und mit Hilfe der dimensionslosen Kennzahlen zusammenzufassen, z.B. durch den Zusammenhang zwischen Ohnesorge-Zahl und Auftreff-Reynolds-Zahl. Die zu untersuchenden Einflussgrößen sind das Größenverhältnis (Tropfen/Partikel), Tropfeneigenschaften (Viskosität, Oberflächenspannung), Partikeleigenschaften (Temperatur und Oberflächenrauigkeit), Auftreffgeschwindigkeit und insbesondere der Auftreffort des Tropfen auf dem Partikel (zentrischer und lateraler Aufprall). Bei den hier vorgesehenen Untersuchungen sind die Tropfen kleiner als die zu beschichtenden Partikel und die Flüssigkeit ist benetzend. All diese Einflüsse gilt es bei der Abgrenzung der Kollisionsregime zu berücksichtigen und entsprechende physikalisch basierte Korrelationen zu entwickeln. Für das Regime Zerteilen muss auch die entstehende Größenverteilung der erzeugten Feintropfen modelliert werden.

Als nächster Schritt wird die auf dem Partikel entstehende Flüssigkeitsschicht, also Endfilmdicke und Ausdehnungsbereich, untersucht. Dazu wird die Beschichtungsflüssigkeit mit Farbstoff dotiert um eine bessere Unterscheidung von den Partikeln zu ermöglichen. Für die Entwicklung des Beschichtungsmodells müssen diese Größen in Abhängigkeit der Aufprallbedingungen, bzw. den relevanten dimensionslosen Kennzahlen, zusammengefasst und physikalisch basierte Korrelationen entwickelt werden.

Weiterhin werden theoretische Untersuchungen, basierend auf Energiebilanzen durchgeführt um den Kollisionsausgang beschreiben zu können. Die Ausbreitung des Flüssigkeitsfilms auf der Partikeloberfläche wird durch die Verwendung der Filmtheorie theoretisch analysiert.

Die erhaltenen Modelle, welche einen umfangreichen Parameterbereich und erstmalig auch einen lateralen Aufprall berücksichtigen, sollen so aufbereitet werden, dass sie für eine Lagrangesche Berechnung von technischen Beschichtungsprozessen genutzt werden können.

---

**Projektleitung:** Prof. Dr.-Ing. Martin Sommerfeld

**Förderer:** Deutsche Forschungsgemeinschaft (DFG); 01.09.2017 - 31.08.2020

**Modellierung des Einflusses der Blasendynamik auf Bewegung, Stoffaustausch und chemische Reaktion**

Im Rahmen des beantragten Forschungsvorhabens soll die Blasendynamik, also Formoszillationen und Taumbewegung, bei der Beschreibung von Blasenbewegung, Stoffaustausch und chemischer Reaktion in Euler/Lagrange-Berechnungen von Blasenströmungen modelliert und validiert werden. Aufgrund der Blasendynamik vollführen die Blasen eine Taumbewegung und die Phasengrenzfläche als auch die Strömungsverhältnisse in der Blasenumgebung werden kontinuierlich verändert. Dies erhöht schließlich auch die Verweilzeit der Blasen im Reaktor. Dadurch werden natürlich Stoffaustausch und Reaktionsraten deutlich verbessert. Bisher wurde der Einfluss der Blasendynamik weder bei Euler/Euler- noch bei Euler/Lagrange-Berechnungen von Blasenströmungen berücksichtigt. Derartige Modelle sollen daher im beantragten Vorhaben entwickelt werden. Damit wird das beantragte Forschungsvorhaben einen maßgeblichen Beitrag zur verbesserten numerischen Berechnung von reaktiven Blasenströmungen liefern.

Die Berechnungen der Fluidströmung wird mit einer Grobstruktursimulation (LES: large eddy simulations) unter Verwendung eines dynamischen Feinstrukturmodells (SGS: sub-grid-scale) durchgeführt. Dabei wird der Einfluss der Blasen sowohl in den Impulsgleichungen als auch bei der Modellierung der Feinstruktur turbulenz berücksichtigt (Turbulenzdämpfung und blaseninduzierte Turbulenz, BIT). Die Berechnung der Blasenbewegung erfolgt unter Berücksichtigung aller relevanten Kräfte ("Basismodell siehe Liao et al. 2015) und des Einflusses der Feinstruktur turbulenz auf den Blasen transport. Zusätzlich werden die Bedeutung der Basset-Kraft untersucht und verbesserte Wandwechselwirkungsmodelle entwickelt. Die Blasendynamik wird auf allen drei Ebenen der Modellentwicklung berücksichtigt, nämlich bei Blasenbewegung, Stoffaustausch und chemischer Reaktion. Die Dynamik der Blasen bei deren Bewegung wird durch die stochastische Variation der Exzentrizität und der Orientierung modelliert, wobei eine theoretisch entwickelte Oszillationszeit einfließt. Beim Stoffaustausch und der chemischen Reaktion wird die Blasendynamik (bzw. die Blasenform) in den Beziehungen für die Sherwood-Zahl und dem Verstärkungsfaktor berücksichtigt. Neben theoretischen Arbeiten werden diese Korrelationen durch Kooperation mit der AG Prof. Bothe (TU Darmstadt) auf der Grundlage von direkten numerischen Simulationen entwickelt. Durch Lagrangesche Simulationen soll weiterhin die Euler-Modellierung der Blasendynamik in der AG Dr. Rzehak (HZD-Rossendorf) unterstützt werden.

Die Dynamikmodelle für Blasenbewegung, Stoffaustausch und chemische Reaktion (unter anderen für das System Fe-NO) sollen schrittweise entwickelt und in OpenFOAM implementiert werden. In jedem Arbeitsschritt wird eine detaillierte Validierung der Simulationen anhand von experimentellen Daten aus dem SPP 1740 durchgeführt (z.B. AG Prof. Schlüter TU Hamburg-Harburg, AG Prof. Kraume TU Berlin, AG Prof. Hampel TU Dresden).

---

**Projektleitung:** Prof. Dr.-Ing. habil. Kai Sundmacher

**Projektbearbeitung:** Dipl.-Ing. Alexander Zinser

**Kooperationen:** Leibniz Universität Hannover, Prof. Dr.-Ing. Hanke-Rauschenbach

**Förderer:** Deutsche Forschungsgemeinschaft (DFG); 01.05.2016 - 30.04.2018

**Einfluss von mehrphasigen Stoff- und Energietransportprozessen auf die Wasserelektrolyse**

Das Upscaling von PEM-Elektrolyseuren (PEM = Polymer-Elektrolyt-Membran) setzt ein umfangreiches Verständnis der Phasen- und Temperaturverhältnisse in den Kanalstrukturen der Elektroden und deren Wirkung auf das Stromdichteprofil voraus.

Die Zielsetzung des Projektes ist die Aufklärung und Quantifizierung der Wirkung der unter zweiphasigen Bedingungen ablaufenden Stoff- und Energietransportprozesse auf das Betriebsverhalten von PEM-Elektrolyseuren.

---

**Projektleitung:** Prof. Dr.-Ing. habil. Kai Sundmacher

**Förderer:** Bund; 04.06.2014 - 31.05.2017

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

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

---

**Projektleitung:** Prof. Dr.-Ing. habil. Kai Sundmacher

**Projektbearbeitung:** Wiedmeyer, Viktoria; Voigt, Dr. Andreas

**Kooperationen:** TU Hamburg-Harburg; Weierstraß-Institut, Berlin

**Förderer:** Deutsche Forschungsgemeinschaft (DFG); 01.10.2017 - 30.09.2019

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

Feststoffprozesse in der Verfahrenstechnik lassen sich durch Populationsbilanzsysteme beschreiben. Hierbei handelt es sich im Allgemeinen um ein gekoppeltes System von partiellen Differential-gleichungen zur Charakterisierung der kontinuierlichen Phase, und einer Populationsbilanzgleichung zur Beschreibung der Feststoffphase. Im Rahmen dieses Projektes sollen in Kooperation mit dem WIAS-Berlin, sowie der TU Hamburg Harburg neue Verfahren zur effizienten und akkuraten Lösung solcher Populationsbilanzsysteme entwickelt werden. Dies soll am Beispiel der formselektiven Kristallisation erfolgen. Zur Simulation der formselektiven Kristallisation werden neben geeigneten Lösungsverfahren auch formspezifische Kristallisationskinetiken, wie z.B. Wachstums- oder Agglomerationsraten benötigt, welche in verschiedenen Versuchsanlagen bestimmt werden sollen. Mit Hilfe der gewonnenen Kinetiken, sowie der entwickelten numerischen Lösungsverfahren, soll abschließend ein Prozess zur kontinuierlichen formselektiven Kristallisation entworfen und optimiert werden.

---

**Projektleitung:** Prof. Dr.-Ing. habil. Kai Sundmacher

**Projektbearbeitung:** Voigt, Dr. Andreas

**Förderer:** Industrie; 01.01.2017 - 31.12.2018

**"Modellgestützte Reaktoroptimierung für eine Gasphasensynthese"**

Für eine Gasphasensynthese werden Modelle entwickelt, die die Reaktions- und Transportmechanismen in einem Rohrreaktor verbinden. Durch die Simulation soll ein verbessertes Design und eine optimale Betriebsweise des Reaktors entwickelt werden.

---

**Projektleitung:** Prof. Dr.-Ing. habil. Kai Sundmacher

**Förderer:** Deutsche Forschungsgemeinschaft (DFG); 01.01.2014 - 31.12.2017

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

Das Teilprojekt B1 hat zum Ziel, Methoden zur Ermittlung der optimalen Reaktionsführung für flüssige Mehrphasensysteme zu entwickeln und exemplarisch auf die Hydroformylierung langkettiger Alkene anzuwenden. Dabei übernimmt es wichtige Funktionen innerhalb des SFB/TR. Zum Einen wird eine Methodik für die optimale Reaktionsführung und die ideale Reaktorgestaltung als generische Fragestellung entwickelt. Zum Anderen werden konkrete Reaktorkonzepte für den im SFB/TR behandelten Hydroformylierungsprozess langkettiger Alkene in temperaturgesteuerten Lösungsmittelsystemen entworfen. Diese werden apparativ realisiert und hinsichtlich ihres



reaktionstechnischen und strömungstechnischen Realverhaltens charakterisiert. Danach wird der resultierende optimale Reaktor in Kooperation mit dem Teilprojekt B5 in eine Mini-plant integriert, um das Reaktorverhalten im Gesamtprozess mit geschlossenen Rückführungsströmen zu untersuchen und robust auszulegen. Das Teilprojekt B1 übernimmt dabei eine wichtige Brückenfunktion für den SFB/TR, indem es alle drei Projektbereiche miteinander verknüpft.

---

**Projektleitung:** Prof. Dr.-Ing. habil. Kai Sundmacher

**Projektbearbeitung:** Voigt, rer.nat. Andreas

**Förderer:** Industrie; 01.01.2017 - 31.12.2017

**Untersuchungen zur formgestalteten Aminosäurekristallisation**

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

---

**Projektleitung:** Prof. Dr. Berend van Wachem

**Projektbearbeitung:** Dr.-Ing. Peter Müller

**Förderer:** Haushalt; 13.01.2013 - 13.01.2018

**Druck-, Stoß- und Bruchverhalten feuchter kugelförmiger Granulate**

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

---

**Projektleitung:** Prof. Dr. Berend van Wachem

**Projektbearbeitung:** Schlinkert, Dr.-Ing. Andreas

**Förderer:** Fördergeber - Sonstige; 01.01.2014 - 31.12.2018

**Forschungs- und Entwicklungsprojekt zur Herstellung eines Katalysatorproduktes**

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

---

**Projektleitung:** Prof. Dr. Berend van Wachem

**Förderer:** Deutsche Forschungsgemeinschaft (DFG); 30.04.2014 - 31.03.2019

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

Many materials or media in nature and technology possess a microstructure, which determines their macro behaviour. Despite of possible difficulties to describe the morphology of this structure, the knowledge of the relevant mechanisms is

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

---

**Projektleitung:** Prof. Dr. Berend van Wachem

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

**Förderer:** Fördergeber - Sonstige; 01.10.2014 - 30.09.2018

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

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

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

---

**Projektleitung:** Prof. Dr. Berend van Wachem

**Projektbearbeitung:** Kamran Khalid, M.Sc. Muhammad

**Förderer:** Haushalt; 01.01.2015 - 31.12.2018

**Maßgeschneiderte superparamagnetische Nanopartikel für Anwendungen in Medizin und Pharmazie**

Superparamagnetische Eisenoxid-Nanopartikel (SPIO-NP), wie Magnetit  $\text{Fe}_3\text{O}_4$  und Maghemit  $-\text{Fe}_2\text{O}_3$ , zählen zu den am häufigsten angewendeten biokompatiblen Partikelsystemen in der Biomedizin. Diese Nanopartikel bieten durch ihre physikalischen Eigenschaften (u.a. die Partikelgröße) vielfältige Vorteile bei diagnostischen und therapeutischen Anwendungen in der Medizin (gezielte Freisetzung von Wirkstoffen in den Organen, eine verbesserte Pharmakinetik und -dynamik, lokale Verabreichungsmöglichkeiten). Obwohl beträchtliche Fortschritte bei der Untersuchung der Partikelbildungsprozesse magnetischer Nanopartikel erzielt wurden, bleibt die Notwendigkeit bestehen, fundamentale Aspekte der Herstellung magnetischer Fluide zu lösen und zu optimieren (größenkontrollierte Synthese und Stabilität der Nanopartikel, enge Partikelgrößenverteilungen, Biokompatibilität der Beschichtungen, Bindung des Wirkstoffes und physiologische Parameter). Zwar steht heute bereits eine Anzahl von biokompatiblen superparamagnetischen Eisenoxid-Nanopartikel als sogenannte Einzeldomänen-Partikel mit hoher Magnetisierbarkeit zur Verfügung, deren Primärpartikelgrößen liegen aber nur zwischen 3 und 15 nm (einzelne Partikel). Bei Agglomeraten bzw. Aggregaten in Form von Multidomänen-Partikeln werden Durchmesser von bis zu 100 nm erreicht, diese Partikel haben zwar eine relativ hohe Magnetisierbarkeit, die sich aber nur aus der Summation der im Aggregat enthaltenen Partikel ergibt. Größere Eindomäne-Partikel hätten den Reiz, aufgrund der volumenproportionalen Magnetisierbarkeit zur dritten Potenz zu skalieren, aber trotzdem die schaltbaren superparamagnetischen Eigenschaften und die Suspensionsstabilität zu behalten. Aufgrund der Agglomeration ist die Anwendbarkeit in der Biomedizin eingeschränkt. Die Herstellungsprozesse in flüssiger Phase laufen als komplexe, wechselseitig verschaltete Mikroprozesse ab und sind noch nicht umfassend erforscht.

---

**Projektleitung:** Prof. Dr. Berend van Wachem

**Förderer:** Deutsche Forschungsgemeinschaft (DFG); 01.01.2015 - 31.12.2017

**Statische und dynamische Beanspruchung elastischer, plastischer und viskoser Granulate**

Ziel dieses Projektes ist die Modellierung der verteilten mechanischen Eigenschaften von inhomogenen Feststoffen, wie z.B. Agglomerate. Es soll ein Master-Modell für die Beschreibung der zeitunabhängigen und zeitabhängigen

Deformation gefunden werden, um so die Herstellung von feuchten Granulaten zu optimieren. letztendlich werden Methoden gefunden, um Designergranulate herstellen zu können. Somit ist eine qualitative Analyse der Einflüsse von Prozess- u. Umweltbedingungen auf Agglomerate und die Produktqualität möglich.

---

**Projektleitung:** Prof. Dr. Berend van Wachem

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

**Förderer:** Deutsche Forschungsgemeinschaft (DFG); 01.01.2015 - 31.12.2017

**Untersuchung, Modellierung und Simulation der quasistatischen Druckbeanspruchung gebundener Modellpellets**

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

---

**Projektleitung:** Dr.-Ing. Abdolreza Kharaghani

**Projektbearbeitung:** Pham Thai Son, Prof. Evangelos Tsotsas

**Förderer:** Stiftungen - Sonstige; 01.06.2015 - 31.05.2019

**Thermo-mechanical behavior of polydisperse particle aggregates: a pore-scale modeling approach**

Discrete network models provide an efficient pore-scale approach to explore the role of individual transport phenomena in deformable particle aggregates made from particles with a multimodal size distribution. During drying, mass transfer (liquid flow and vapor diffusion) is obtained from pore-scale finite volume (PFV) model, whereas the mechanical response (cracks and shrinkage) of the solid to compressive capillary forces is computed by discrete element method (DEM). The DEM-PFV coupled model permits to study the influence of physical properties of liquid, mechanical properties of solid, and rate of drying on the degree of mechanical response.

---

**Projektleitung:** Dr.-Ing. Robert Heyer

**Projektbearbeitung:** Schlegel, M.Sc. Theresa

**Förderer:** Deutsche Forschungsgemeinschaft (DFG); 01.10.2017 - 30.09.2018

**Inflammatory Systems-Microbiome: Systemdiagnostik des menschlichen Darmmikrobioms bei entzündungsbedingten Erkrankungen mittels Metaproteomeanalyse**

Das menschliche Darmsystem zählt zu den größten Organsystemen. Es wird von mehreren chronisch-entzündlichen Darmerkrankungen (IBD) mit teilweise unbekannter Pathogenese, wie Morbus Crohn oder Colitis ulcerosa, befallen. Diese begünstigen wiederum die Entwicklung von Tumoren. Darüber hinaus scheinen Aberrationen im Darmmikrobiom mit einem breiten Spektrum von Entzündungskrankheiten zusammenzuhängen, einschließlich allergischer Erkrankungen, Asthma und Reizdarmerkrankungen. Die Pathogenese von IBD, insbesondere der Einfluss des Mikrobioms auf das Darmsystem und umgekehrt, ist kaum verstanden. Ein Grund dafür ist der Mangel an geeigneten Methoden für die umfassende Untersuchung des Darmmikrobioms und dessen Funktion bei Gesundheit und Krankheit. Bisher befassen sich die Methoden zur Untersuchung von Fäkalproben nur mit einzelnen Parametern, z.B. erhöhte Spiegel von Calprotectin und Lactoferrin als Marker für Schleimhautentzündungen oder die Menge an Elastase 1 als

Marker für chronische Pankreatitis und Pankreaskrebs. Durch die Entwicklung von Hochdurchsatzverfahren zur Identifizierung von Genen (Metagenomik / Metatranskriptomik) und Proteinen (Metaproteomik) kann das Mikrobiom jedoch in seiner Gesamtheit untersucht werden.

## 6. Veröffentlichungen

### **Begutachtete Zeitschriftenaufsätze**

#### **Alvarado Perea, L.; Wolff, T.; Hamel, C.; Seidel-Morgenstern, Andreas**

Experimental study of the deactivation of Ni/AlMCM-41 catalyst in the direct conversion of ethene to propene

In: Applied catalysis / A: an international journal devoted to catalytic science and its applications - Amsterdam [u.a.]: Elsevier Science, Bd. 533.2017, S. 121-131

[Imp.fact.: 4,012]

#### **Alvarado Perea, Leo; Felischak, Matthias; Wolff, Tanya; Hamel, Christof; Seidel-Morgenstern, Andreas**

Experimental investigation of the reaction network of ethene to propene over Ni/AlMCM-41 catalysts

In: Chemie - Ingenieur - Technik: CIT - Weinheim: Wiley-VCH Verl, Bd. 89.2017, 7, S. 903-914

[Dedicated to Prof. Dr. Wilhelm Schwieger on the occasion of his 65th birthday]

[Imp.fact.: 0,877]

#### **Aman, Sergej; Aman, Alexander; Hintz, Werner; Trüe, Michael; Veit, Peter; Hirsch, Sören**

The exfoliation of graphite particles in the vibratory disk mill

In: Chemie - Ingenieur - Technik: CIT - Weinheim: Wiley-VCH Verl, Bd. 89.2017, 9, S. 1185-1191

[Imp.fact.: 0,877]

#### **Aydin, Erdal; Bonvin, Dominique; Sundmacher, Kai**

Dynamic optimization of constrained semi-batch processes using Pontryagins minimum principle - an effective quasi-Newton approach

In: Computers & chemical engineering: an international journal of computer applications in chemical engineering - Amsterdam [u.a.]: Elsevier Science, Bd. 99.2017, S. 135-144

[Imp.fact.: 2,581]

#### **Bachmann, Philipp; Bück, Andreas; Tsotsas, Evangelos**

Experimental investigation and correlation of the Bodenstein number in horizontal fluidized beds with internal baffles

In: Powder technology: an international journal on the science and technology of wet and dry particulate systems - Amsterdam [u.a.]: Elsevier Science, Bd. 308.2017, S. 378-387

[Imp.fact.: 2,759]

#### **Bashir, Seemab; Qamar, Shamsul; Perveen, Sadia; Seidel-Morgenstern, Andreas**

Analysis of linear reactive general rate model of liquid chromatography considering irreversible and reversible reactions

In: Chemical engineering research and design: CERD - Amsterdam: Elsevier, Bd. 119.2017, S. 140-159

[Imp.fact.: 2,525]

#### **Börner, Matthias; Bück, Andreas; Tsotsas, Evangelos**

DEM-CFD investigation of particle residence time distribution in top-spray fluidised bed granulation

In: Chemical engineering science - Amsterdam [u.a.]: Elsevier Science, Bd. 161.2017, S. 187-197

[Imp.fact.: 1,073]

#### **Bremer, Jens; Goyal, Pawan; Feng, Lihong; Benner, Peter; Sundmacher, Kai**

POD-DEIM for efficient reduction of a dynamic 2D catalytic reactor model

In: Computers & chemical engineering: an international journal of computer applications in chemical engineering - Amsterdam [u.a.]: Elsevier Science, Bd. 106.2017, S. 777-784

[Imp.fact.: 3,024]

#### **Bremer, Jens; Rätze, Karsten H. G.; Sundmacher, Kai**

CO 2 methanation - optimal start-up control of a fixed-bed reactor for power-to-gas applications

In: AIChE journal - Hoboken, NJ: Wiley, Bd. 63.2017, 1, S. 23-31

[Imp.fact.: 2,980]

**Buchholz, Hannes; Seidel-Morgenstern, Andreas; Lorenz, Heike**

A contribution to the solution thermodynamics of chiral lactide

In: Chemical engineering & technology: industrial chemistry, plant equipment, process engineering, biotechnology - Weinheim: Wiley-VCH Verl.-Ges, Bd. 40.2017, 7, S. 1268-1275

[Imp.fact.: 2,051]

**Chen, Kaicheng; Bachmann, Philipp; Bück, Andreas; Jacob, Michael; Tsotsas, Evangelos**

Experimental study and modeling of particle drying in a continuously-operated horizontal fluidized bed

In: Particuology - Amsterdam: Elsevier, Bd. 34.2017, S. 134-146

[Imp.fact.: 2,621]

**Eisenschmidt, Holger; Soumaya, M.; Bajcinca, N.; Le Borne, S.; Sundmacher, Kai**

Estimation of aggregation kernels based on Laurent polynomial approximation

In: Computers & chemical engineering: an international journal of computer applications in chemical engineering - Amsterdam [u.a.]: Elsevier Science, Bd. 103.2017, S. 210-217

[Imp.fact.: 2,581]

**El Sibai, Ali; Rihko Struckmann, Liisa K.; Sundmacher, Kai**

Model-based optimal sabatier reactor design for power-to-gas applications

In: Energy technology: generation, conversion, storage, distribution - Weinheim [u.a.]: Wiley-VCH, Bd. 5.2017, 6, S. 911-921

[Special Issue: Carbon Dioxide Utilization]

[Imp.fact.: 2,789]

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

Carotenoid production process using green microalgae of the dunalialla genus - model-based analysis of interspecies variability

In: Industrial & engineering chemistry research - Columbus, Ohio: American Chemical Society, 2017; <http://dx.doi.org/10.1021/acs.iecr.7b01423>

[Imp.fact.: 2,930]

**Farid, Muhammad Usman; Bück, Andreas; Heineken, Wolfram; Gohla, Matthias; Zobel, Nico**

Study on nozzle design for combustion of solid materials with low melting points

In: Applied thermal engineering: design, processes, equipment, economics - Amsterdam [u.a.]: Elsevier Science, Bd. 115.2017, S. 832-859

[Imp.fact.: 3,043]

**Fischer, Christian; Jaskulski, Maciej; Tsotsas, Evangelos**

Inline method of droplet and particle size distribution analysis in dilute disperse systems

In: Advanced powder technology: the international journal of the Society of Powder Technology, Japan - Amsterdam [u.a.]: Elsevier, Bd. 28.2017, 11, S. 2820-2829

[Imp.fact.: 2,659]

**Gaide, T.; Jörke, Andreas; Schlipköter, K. E.; Hamel, Christof; Seidel-Morgenstern, Andreas; Behr, A.; Vorholt, A. J.**

Isomerization/hydroformylation tandem reaction of a decene isomeric mixture with subsequent catalyst recycling in thermomorphic solvent systems

In: Applied catalysis / A: an international journal devoted to catalytic science and its applications - Amsterdam [u.a.]: Elsevier Science, Bd. 532.2017, S. 50-56

[Imp.fact.: 4,012]

**Gerlach, Martin; Abdul Wajid, D.; Hilfert, Liane; Edelmann, Frank T.; Seidel-Morgenstern, Andreas; Hamel, Christof**

Impact of minor amounts of hydroperoxides on rhodium-catalyzed hydroformylation of long-chain olefins  
In: Catalysis science & technology: a multidisciplinary journal focussing on all fundamental science and technological aspects of catalysis - London: RSC Publ, 7, S. 1465-1469, 2017  
[Imp.fact.: 5,287]

**Geyyer, Rostyslav; Dürr, Robert; Temmel, Erik; Li, Tao; Lorenz, Heike; Palis, Stefan; Seidel-Morgenstern, Andreas; Kienle, Achim**

Control of continuous mixed-solution mixed-product removal crystallization processes  
In: Chemical engineering & technology: industrial chemistry, plant equipment, process engineering, biotechnology - Weinheim: Wiley-VCH Verl.-Ges, Bd. 40.2017, 7, S. 1362-1369  
[Special issue: Industrial crystallization]

**Hämmerlein, Frank; Pieler, Michael M.; Hennig, René; Serve, Anja; Rapp, Erdmann; Wolff, Michael W.; Reichl, Udo; Hubbuch, Jürgen**

Influence of the production system on the surface properties of influenza A virus particles  
In: Engineering in life sciences - Weinheim: Wiley-VCH, Bd. 17.2017, 10, S. 1071-1077  
[Imp.fact.: 1,698]

**Heyer, Robert; Schallert, Kay; Zoun, Roman; Becher, Beatrice; Saake, Gunter; Benndorf, Dirk**

Challenges and perspectives of metaproteomic data analysis  
In: Journal of biotechnology - Amsterdam [u.a.]: Elsevier Science, Bd. 261.2017, S. 24-36  
[Imp.fact.: 2,599]

**Hiep, Le Kieu; Kharaghani, Abdolreza; Kirsch, Christoph; Tsotsas, Evangelos**

Discrete pore network modeling of superheated steam drying  
In: Drying technology: an international journal - Philadelphia, Pa: Taylor & Francis, Bd. 35.2017, 13, S. 1584-1601  
[Imp.fact.: 1,856]

**Hofmann, S.; Bajcinca, N.; Raisch, J.; Sundmacher, Kai**

Optimal control of univariate and multivariate population balance systems involving external fines removal  
In: Chemical engineering science - Amsterdam [u.a.]: Elsevier Science, Bd. 168.2017, S. 101-123  
[Imp.fact.: 2,895]

**Holze, Susann; Krüger, Benjamin; Hoffmann, Torsten; Bück, Andreas; Schwidder, Michael**

Influence of TiO<sub>2</sub>-layer thickness of spray-coated glass beads on their photocatalytic performance  
In: Chemical engineering & technology: industrial chemistry, plant equipment, process engineering, biotechnology - Weinheim: Wiley-VCH Verl.-Ges, 2017; <http://dx.doi.org/10.1002/ceat.201600432>  
[Imp.fact.: 2,385]

**Idakiev, Vesselin V.; Graner, Sebastian; Bück, Andreas; Tsotsas, Evangelos; Mörl, Lothar**

Wärmeübergangsuntersuchung in einer induktiv beheizten Wirbelschicht mit heterogener Schichtzusammensetzung  
In: Chemie - Ingenieur - Technik: CIT - Weinheim: Wiley-VCH Verl, Bd. 89.2017, 6, S. 772-784  
[Imp.fact.: 0,877]

**Idakiev, Vesselin V.; Lazarova, Pavleta V.; Bück, Andreas; Tsotsas, Evangelos; Mörl, Lothar**

Inductive heating of fluidized beds - drying of particulate solids  
In: Powder technology: an international journal on the science and technology of wet and dry particulate systems - Amsterdam [u.a.]: Elsevier Science, Bd. 306.2017, S. 26-33  
[Imp.fact.: 2,759]

**Janiga, Gábor; Stucht, Daniel; Bordás, Róbert; Temmel, Erik; Seidel-Morgenstern, Andreas; Thévenin, Dominique; Speck, Oliver**

Noninvasive 4D flow characterization in a stirred tank via phase-contrast magnetic resonance imaging  
In: Chemical engineering & technology: industrial chemistry, plant equipment, process engineering, biotechnology

- Weinheim: Wiley-VCH Verl.-Ges, Bd. 40.2017, 7, S. 1370-1327  
[Imp.fact.: 2,051]

**Jaskulski, Maciej; Atuonwu, James C.; Tran, Thi Thu Hang; Stapley, Andrew G. F.; Tsotsas, Evangelos**  
Predictive CFD modeling of whey protein denaturation in skim milk spray drying powder production  
In: Advanced powder technology: the international journal of the Society of Powder Technology, Japan - Amsterdam [u.a.]: Elsevier, Bd. 28.2017, 12, S. 3140-3147

**Jiang, Zhaochen; Hagemeyer, Thomas; Bück, Andreas; Tsotsas, Evangelos**  
Experimental measurements of particle collision dynamics in a pseudo-2D gas-solid fluidized bed  
In: Chemical engineering science - Amsterdam [u.a.]: Elsevier Science, Bd. 167.2017, S. 297-316  
[Imp.fact.: 2,750]

**Jokiel, Michael; Wagner, Lisa-Maria; Mansour, Michael; Kaiser, Nicolas Maximilian; Zähringer, Katharina; Janiga, Gábor; Nigam, Krishna D. P.; Thévenin, Dominique; Sundmacher, Kai**  
Measurement and simulation of mass transfer and backmixing behavior in a gas-liquid helically coiled tubular reactor  
In: Chemical engineering science - Amsterdam [u.a.]: Elsevier Science, Bd. 170.2017, S. 410-421

**Jörke, Andreas; Gaide, Tom; Behr, Arno; Vorholt, Andreas; Seidel-Morgenstern, Andreas; Hamel, Christof**  
Hydroformylation and tandem isomerization-hydroformylation of n-decenes using a rhodium-BiPhePhos catalyst - kinetic modeling, reaction network analysis and optimal reaction control  
In: The chemical engineering journal - Amsterdam: Elsevier, Bd. 313.2017, S. 382-397  
[Imp.fact.: 5,310]

**Jörke, Andreas; Seidel-Morgenstern, Andreas; Hamel, Christof**  
Rhodium-BiPhePhos catalyzed hydroformylation studied by operando FTIR spectroscopy - catalyst activation and rate determining step  
In: Journal of molecular catalysis / A - Amsterdam [u.a.]: Elsevier Science, Vol. 426.2017, Part A, S. 10-14

**Kaiser, Nicolas M.; Jokiel, Michael; McBride, Kevin; Flassig, Robert J.; Sundmacher, Kai**  
Optimal reactor design via flux profile analysis for an integrated hydroformylation process  
In: Industrial & engineering chemistry research - Columbus, Ohio: American Chemical Society, Bd. 56.2017, 40, S. 11507-11518  
[Imp.fact.: 2,930]

**Kerst, Kristin; Roloff, Christoph; Medeiros de Souza, Luís G.; Bartz, Antje; Seidel-Morgenstern, Andreas; Thévenin, Dominique; Janiga, Gábor**  
CFD-DEM simulations of a fluidized bed crystallizer  
In: Chemical engineering science - Amsterdam [u.a.]: Elsevier Science, Bd. 165.2017, S. 1-13  
[Imp.fact.: 2,750]

**Kohrs, Fabian; Heyer, Robert; Bissinger, Thomas; Kottler, Robert; Schallert, Kay; Püttker, Sebastian; Behne, A.; Rapp, Erdmann; Benndorf, Dirk; Reichl, Udo**  
Proteotyping of laboratory-scale biogas plants reveals multiple steady-states in community composition  
In: Anaerobe: the official journal of the Anaerobe Society of the Americas - London: Academic Press, Bd. 46.2017, S. 56-68  
[Imp.fact.: 2,278]

**Kova evi, Tijana; Wiedmeyer, Viktoria; Schock, Jonathan; Voigt, Andreas; Pfeiffer, Franz; Sundmacher, Kai; Briesen, Heiko**  
Disorientation angle distribution of primary particles in potash alum aggregates  
In: Journal of crystal growth - Amsterdam [u.a.]: Elsevier, Bd. 467.2017, S. 93-106  
[Imp.fact.: 1,462]

**Lemberg, Max; Sadowski, Gabriele; Gerlach, Martin; Kohls, Emilija; Stein, Matthias; Hamel, Christof; Seidel-**

**Morgenstern, Andreas**

Predicting solvent effects on the 1-dodecene hydroformylation reaction equilibrium

In: AIChE journal - Hoboken, NJ: Wiley, Bd. 63.2017, 10, S. 4576-4585

[Imp.fact.: 2,980]

**Li, Tao; Lorenz, Heike; Seidel-Morgenstern, Andreas**

Solubility study and thermal stability analysis of calcium propionate

In: Chemical engineering & technology: industrial chemistry, plant equipment, process engineering, biotechnology - Weinheim: Wiley-VCH Verl.-Ges, Bd. 40.2017, 7, S. 1221-1230

[Imp.fact.: 2,051]

**Mader-Arndt, Katja; Aman, Sergej; Fuchs, Regina; Tomas, Jürgen**

Contact properties determination of macroscopic fine disperse glass particles via compression tests in normal direction

In: Advanced powder technology: the international journal of the Society of Powder Technology, Japan - Amsterdam

[u.a.]: Elsevier, Bd. 28.2017, 1, S. 101-114

[Imp.fact.: 2,659]

**Mader-Arndt, Katja; Aman, Sergej; Fuchs, Regina; Tomas, Jürgen**

Contact properties determination of macroscopic fine disperse glass particles via compression tests under cyclic loading/unloading

In: Advanced powder technology: the international journal of the Society of Powder Technology, Japan - Amsterdam

[u.a.]: Elsevier, Bd. 28.2017, 3, S. 687-696

[Imp.fact.: 2,659]

**Mangold, Michael; Khlopov, Dmytro; Temmel, Erik; Lorenz, Heike; Seidel-Morgenstern, Andreas**

Modelling geometrical and fluid-dynamic aspects of a continuous fluidized bed crystallizer for separation of enantiomers

In: Chemical engineering science - Amsterdam [u.a.]: Elsevier Science, Bd. 160.2017, S. 281-290

[Imp.fact.: 2,750]

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

Model-based experimental data evaluation of separation efficiency of multistage coarse particle classification in a zigzag apparatus

In: Powder technology: an international journal on the science and technology of wet and dry particulate systems

- Amsterdam [u.a.]: Elsevier Science, Bd. 313.2017, S. 145-160

[Imp.fact.: 2,759]

**Mansour, M.; Liu, Z.; Janiga, Gabor; Nigam, K. D. P.; Sundmacher, Kai; Thévenin, Dominique; Zähringer, Katharina**

Numerical study of liquid-liquid mixing in helical pipes

In: Chemical engineering science - Amsterdam [u.a.]: Elsevier Science, Bd. 172.2017, S. 250-261

[Imp.fact.: 2,750]

**Marichal-Gallardo, Pavel; Pieler, Michael M.; Wolff, Michael W.; Reichl, Udo**

Steric exclusion chromatography for purification of cell culture-derived influenza A virus using regenerated cellulose membranes and polyethylene glycol

In: Journal of chromatography / A: including electrophoresis, mass spectrometry and other separation and detection methods - New York, NY [u.a.]: Science Direct, Bd. 1483.2017, S. 110-119

[Imp.fact.: 3,926]

**McBride, Kevin; Kaiser, Nicolas Maximilian; Sundmacher, Kai**

Integrated reaction-extraction process for the hydroformylation of long-chain alkenes with a homogeneous catalyst

In: Computers & chemical engineering: an international journal of computer applications in chemical engineering

- Amsterdam [u.a.]: Elsevier Science, Bd. 105.2017, S. 212-223

[Imp.fact.: 3,024]

**Meyer, Katja; Bück, Andreas; Tsotsas, Evangelos**



Determination of particle exchange rates at over-flow weirs in horizontal fluidised beds by particle tracking velocimetry  
In: Particuology - Amsterdam: Elsevier, Bd. 32.2017, S. 1-9  
[Imp.fact.: 2,280]

**Moghaddam, Alireza Attari; Kharaghani, Abdolreza; Tsotsas, Evangelos; Prat, Marc**

Kinematics in a slowly drying porous medium - reconciliation of pore network simulations and continuum modeling  
In: Physics of fluids: devoted to the publication of original theoretical, computational, and experimental contributions to the dynamics of gases, liquids, and complex or multiphase fluids - [S.I.]: American Institute of Physics, Vol. 29.2017, 2, Art. 022102  
[Imp.fact.: 2,017]

**Neugebauer, Christoph; Palis, Stefan; Bück, Andreas; Tsotsas, Evangelos; Heinrich, Stefan; Kienle, Achim**

A dynamic two-zone model of continuous fluidized bed layering granulation with internal product classification  
In: Particuology - Amsterdam: Elsevier, Bd. 31.2017, S. 8-14  
[Imp.fact.: 2,280]

**Peña Arias, Ivonne Karina; Sundmacher, Kai; Hanke-Rauschenbach, Richard**

Influence of the autonomous oscillations and the CO concentration on the performance of an ECPrOx reactor  
In: Electrochimica acta: the journal of the International Society of Electrochemistry (ISE) - New York, NY [u.a.]: Elsevier, Bd. 251.2017, S. 602-612  
[Imp.fact.: 4,798]

**Peña Arias, Ivonne Karina; Trinke, Patrick; Hanke-Rauschenbach, Richard; Sundmacher, Kai**

Understanding PEM fuel cell dynamics - the reversal curve  
In: International journal of hydrogen energy: official journal of the International Association for Hydrogen Energy - New York, NY [u.a.]: Elsevier, Bd. 42.2017, 24, S. 15818-15827  
[Imp.fact.: 3,582]

**Pieler, Michael Martin; Heyse, Anja; Wolff, Michael Werner; Reichl, Udo**

Specific ion effects on the particle size distributions of cell cultured derived influenza A virus particles within the Hofmeister series  
In: Engineering in life sciences - Weinheim: Wiley-VCH, Bd. 17.2017, 5, S. 470-478  
[Imp.fact.: 1,698]

**Pischel, Dennis; Sundmacher, Kai; Flassig, Robert J.**

Efficient simulation of intrinsic, extrinsic and external noise in biochemical systems  
In: Bioinformatics - Oxford: Oxford Univ. Press, Vol. 33.2017, 14, S. i319-i324  
[Imp.fact.: 7,307]

**Pralow, Alexander; Hoffmann, Marcus; Nguyen-Khuong, Terry; Rapp, Erdmann; Reichl, Udo**

Improvement of the glycoproteomic toolbox with the discovery of a unique C-terminal cleavage specificity of flavastacin for N-glycosylated asparagine  
In: Scientific reports - [London]: Macmillan Publishers Limited, part of Springer Nature, Bd. 7.2017, Art.-Nr. 11419, insgesamt 9 Seiten  
[Imp.fact.: 4,259]

**Qamar, Shamsul; Bibi, Sameena; Akaram, Noreen; Seidel-Morgenstern, Andreas**

Analysis of two-component non-equilibrium model of linear reactive chromatography  
In: Chromatographia: an international journal for rapid communication in chromatography and related techniques - Wiesbaden: Vieweg, Bd. 80.2017, 3, S. 383-400  
[Imp.fact.: 1,402]

**Qamar, Shamsul; Sattar, Fouzia Abdul; Batool, Iqra; Seidel-Morgenstern, Andreas**

Theoretical analysis of the influence of forced and inherent temperature fluctuations in an adiabatic chromatographic

column

In: Chemical engineering science - Amsterdam [u.a.]: Elsevier Science, Bd. 161.2017, S. 249-264  
[Imp.fact.: 1,073]

**Oamar, Shamsul; Uche, David U.; Khan, Farman U.; Seidel-Morgenstern, Andreas**

Analysis of linear two-dimensional general rate model for chromatographic columns of cylindrical geometry  
In: Journal of chromatography / A: including electrophoresis, mass spectrometry and other separation and detection methods - New York, NY [u.a.]: Science Direct, Bd. 1496.2017, S. 92-104  
[Imp.fact.: 3,981]

**Rekis, Toms; B rzi s, Agris; Orola, Li na; Holczbauer, Tamás; Acti Š, Andris; Seidel-Morgenstern, Andreas; Lorenz, Heike**

Single enantiomers urge to crystallize in centrosymmetric space groups - solid solutions of phenylpiracetam  
In: Crystal growth & design - Washington, DC: ACS Publ, Bd. 17.2017, 3, S. 1411-1418  
[Imp.fact.: 4,055]

**Ricken, Benjamin; Kolvenbach, Boris A.; Bergesch, Christian; Benndorf, Dirk; Kroll, Kevin; Strnad, Hynek; Vlček, C estmr; Adaixo, Ricardo; Hammes, Frederick; Shahgaldian, Patrick; Schäffer, Andreas; Kohler, Hans-Peter E.; Corvini, Philippe F.- X.**

FMNH2-dependent monooxygenases initiate catabolism of sulfonamides in Microbacterium sp. strain BR1 subsisting on sulfonamide antibiotics  
In: Scientific reports - [London]: Macmillan Publishers Limited, part of Springer Nature, Bd. 7.2017, Art.-Nr. 15783, insgesamt 11 Seiten  
[Imp.fact.: 4,259]

**Rihko-Struckmann, Liisa K.; Molnar, Mark; Pirwitz, Kristin; Facht, Melanie; McBride, Kevin; Zinser, Alexander; Sundmacher, Kai**

Recovery and separation of carbohydrate derivatives from the lipid extracted alga dunalialla by mild liquefaction  
In: ACS sustainable chemistry & engineering - Washington, DC: ACS Publ, Bd. 5.2017, 1, S. 588-595  
[Imp.fact.: 5,267]

**Schmidt, Martin; Bück, Andreas; Tsotsas, Evangelos**

Experimental investigation of the influence of drying conditions on process stability of continuous spray fluidized bed layering granulation with external product separation  
In: Powder technology: an international journal on the science and technology of wet and dry particulate systems - Amsterdam [u.a.]: Elsevier Science, Bd. 320.2017, S. 474-482  
[Imp.fact.: 2,942]

**Schmidt, Martin; Bück, Andreas; Tsotsas, Evangelos**

Shell porosity in spray fluidized bed coating with suspensions  
In: Advanced powder technology: the international journal of the Society of Powder Technology, Japan - Amsterdam [u.a.]: Elsevier, Bd. 28.2017, 11, S. 2921-2928  
[Imp.fact.: 2,659]

**Seidel, Carsten; Jörke, A.; Vollbrecht, B.; Seidel-Morgenstern, Andreas; Kienle, Achim**

Kinetic modeling of methanol synthesis from renewable resources  
In: Chemical engineering science - Amsterdam [u.a.]: Elsevier Science, Bd. 175.2018, S. 130-138  
[Online first]  
[Imp.fact.: 2,895]

**Shamaei, Samira; Seiedlou, Seyed Sadegh; Aghbashlo, Mortaza; Tsotsas, Evangelos; Kharaghani, Abdolreza**

Microencapsulation of walnut oil by spray drying - effects of wall material and drying conditions on physicochemical properties of microcapsules  
In: Innovative food science & emerging technologies: the official journal of the European Federation of Food Science and Technology - New York, NY [u.a.]: Elsevier Science, Bd. 39.2017, S. 101-112  
[Imp.fact.: 2,997]

**Song, Zhen; Zhou, Teng; Qi, Zhiwen; Sundmacher, Kai**

Systematic method for screening ionic liquids as extraction solvents exemplified by an extractive desulfurization process  
In: ACS sustainable chemistry & engineering - Washington, DC: ACS Publ, Bd. 5.2017, 4, S. 3382-3389  
[Imp.fact.: 5,267]

**Sorrentino, Antonio; Vidakovic-Koch, Tanja; Hanke-Rauschenbach, Richard; Sundmacher, Kai**

Concentration-alternating frequency response - a new method for studying polymer electrolyte membrane fuel cell dynamics  
In: Electrochimica acta: the journal of the International Society of Electrochemistry (ISE) - New York, NY [u.a.]: Elsevier, Bd. 243.2017, S. 53-64  
[Imp.fact.: 4,803]

**Tada, Érika Fernanda Rezendes; Bück, Andreas; Casciotori, Fernanda; Tsotsas, Evangelos; Thoméo, João Cláudio**

Investigation of heat transfer in partially filled horizontal drums  
In: The chemical engineering journal - Amsterdam: Elsevier, Bd. 316.2017, S. 988-1003  
[Imp.fact.: 5,310]

**Tapia, Felipe; Jordan, Ingo; Genzel, Yvonne; Reichl, Udo**

Efficient and stable production of Modified Vaccinia Ankara virus in two-stage semi-continuous and in continuous stirred tank cultivation systems  
In: PLoS one - Lawrence, Kan: PLoS, Bd. 12.2017, 8, Art.-Nr. e0182553, insges. 17 Seiten  
[Imp.fact.: 2,806]

**Tran, Thi Thu Hang; Jaskulski, Maciej; Avila-Acevedo, Juan G.; Tsotsas, Evangelos**

Model parameters for single-droplet drying of skim milk and its constituents at moderate and elevated temperatures  
In: Drying technology: an international journal - Philadelphia, Pa: Taylor & Francis, Bd. 35.2017, 4, S. 444-464  
[Imp.fact.: 1,856]

**Tran, Thi Thu Hang; Jaskulski, Maciej; Tsotsas, Evangelos**

Reduction of a model for single droplet drying and application to CFD of skim milk spray drying  
In: Drying technology: an international journal - Philadelphia, Pa: Taylor & Francis, Bd. 35.2017, 13, S. 1571-1583  
[Imp.fact.: 1,856]

**Wasik, Milena A.; Eichwald, Luca; Genzel, Yvonne; Reichl, Udo**

Cell culture-based production of defective interfering particles for influenza antiviral therapy  
In: Applied microbiology and biotechnology - Berlin: Springer, insges. 11 S., 2017  
[Online first]  
[Imp.fact.: 3,420]

**Wenzel, Marcus; Aditya Dharanipragada, N. V. R.; Galvita, Vladimir V.; Poelman, Hilde; Marin, Guy B.; Rihko-Struckmann, Liisa; Sundmacher, Kai**

CO production from CO<sub>2</sub> via reverse water-gas shift reaction performed in a chemical looping mode - Kinetics on modified iron oxide  
In: Journal of CO<sub>2</sub> utilization - Amsterdam [u.a.]: Elsevier, Bd. 17.2017, S. 60-68  
[Imp.fact.: 4,764]

**Wenzel, Marcus; Rihko-Struckmann, Liisa; Sundmacher, Kai**

Thermodynamic analysis and optimization of RWGS processes for solar syngas production from CO<sub>2</sub>  
In: AIChE journal - Hoboken, NJ: Wiley, Bd. 63.2017, 1, S. 15-22  
[Imp.fact.: 2,980]

**Wiedmeyer, Viktoria; Anker, Felix; Bartsch, Clemens; Voigt, Andreas; John, Volker; Sundmacher, Kai**

Continuous crystallization in a helically coiled flow tube - analysis of flow field, residence time behavior, and crystal growth  
In: Industrial & engineering chemistry research - Columbus, Ohio: American Chemical Society, Bd. 56.2017, 13, S. 3699-

3712

[Imp.fact.: 2930]

**Wiedmeyer, Viktoria; Voigt, Andreas; Sundmacher, Kai**

Crystal population growth in a continuous helically coiled flow tube crystallizer

In: Chemical engineering & technology: industrial chemistry, plant equipment, process engineering, biotechnology

- Weinheim: Wiley-VCH Verl.-Ges, Bd. 40.2017, 9, S. 1584-1590

[Special issue: Industrial crystallization]

**Wu, Rui; Zhao, C. Y.; Tsotsas, Evangelos; Kharaghani, Abdolreza**

Convective drying in thin hydrophobic porous media

In: International journal of heat and mass transfer - Amsterdam [u.a.]: Elsevier, Bd. 112.2017, S. 630-642

[Imp.fact.: 3,458]

**Zähringer, Katharina; Wagner, Lisa-Maria; Thévenin, Dominique; Siegmund, Patrick; Sundmacher, Kai**

Particle-image-velocimetry measurements in organic liquid multiphase systems for an optimal reactor design and operation

In: Journal of visualization - Berlin: Springer, insges. 13 S., 2017

[Imp.fact.: 0,950]

**Zhang, Yongjin; Feng, Lihong; Seidel-Morgenstern, Andreas; Benner, Peter**

Accelerating optimization and uncertainty quantification of nonlinear SMB chromatography using reduced-order models

In: Computers & chemical engineering: an international journal of computer applications in chemical engineering

- Amsterdam [u.a.]: Elsevier Science, Bd. 96.2017, S. 237-247

[Imp.fact.: 2,581]

**Zhou, Teng; Zhou, Yageng; Sundmacher, Kai**

A hybrid stochastic-deterministic optimization approach for integrated solvent and process design

In: Chemical engineering science - Amsterdam [u.a.]: Elsevier Science, Bd. 159.2017, S. 207-216

[Imp.fact.: 2,750]

**Zuyev, A.; Seidel-Morgenstern, Andreas; Benner, P.**

An isoperimetric optimal control problem for a non-isothermal chemical reactor with periodic inputs

In: Chemical engineering science - Amsterdam [u.a.]: Elsevier Science, Bd. 161.2017, S. 206-214

[Imp.fact.: 1,073]

***Begutachtete Buchbeiträge***

**Bück, Andreas; Schmidt, Martin; Neugebauer, Christoph; Palis, Stefan; Kienle, Achim; Heinrich, Stefan; Tsotsas, Evangelos**

Process dynamics of continuous fluidised bed layering granulation

In: 8th International Granulation Workshop: Sheffield, UK, June 2017 - Sheffield, Posternr. 2, paper 67, insgesamt 5 Seiten

[Beitrag auf USB-Stick]

**Butler, M.; Reichl, Udo**

Animal cell expression systems

In: Advances in biochemical engineering, biotechnology - Berlin: Springer, S. 1-36, 2017

[Online first]

**Idakiev, Vesselin; Bück, Andreas; Tsotsas, Evangelos; Mörl, Lothar**

Inductive energy input in fluidized beds and its applications

In: Second Nordic Baltic Drying Conference: 7-9 June 2017, Hamburg, Germany; proceedings - Hamburg, insges. 9 S.

[Beitrag auf USB-Stick]

**Jiang, Zhaochen; Rieck, Christian; Bück, Andreas; Tsotsas, Evangelos**

Estimation of coefficient of restitution of irregular shaped particles on horizontal substrates

In: 8th International Granulation Workshop: Sheffield, UK, June 2017 - Sheffield, oral paper 18, insgesamt 14 Seiten  
[Beitrag auf USB-Stick]

**Kaspereit, Malte; Seidel-Morgenstern, Andreas**

Process concepts in preparative chromatography

In: Liquid Chromatography: Volume 1: Fundamentals and Instrumentation - Amsterdam, Netherlands: Elsevier, S. 593-618, 2017  
[Chapter 25]

**Kharaghani, Abdolreza; Tsotsas, Evangelos; Wolf, Carolin; Beutler, Thomas; Guttzeit, Maik; Oetjen, Georg-Wilhelm**  
Freeze-Drying

In: Ullmann's encyclopedia of industrial chemistry - Chichester [u.a.]: Wiley, 2017, insgesamt 47 Seiten; [http://dx.doi.org/10.1002/14356007.h12\\_pub2](http://dx.doi.org/10.1002/14356007.h12_pub2)

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

Impact of the heating modes on the behavior of superheated steam drying in capillary porous media

In: EuroDrying'2017: 6th European Drying Conference; 19, 20, 21 June 2017, University of Liège, Belgium - Liège: University, 2017, Poster 40, insgesamt 8 Seiten  
[Beitrag auf USB-Stick]

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

Energy efficiency of fluidized bed coating processes with temporal separation of layering and particle drying

In: 8th International Granulation Workshop: Sheffield, UK, June 2017 - Sheffield, oral paper Nr. 6, insgesamt 11 Seiten  
[Beitrag auf USB-Stick]

**Moghaddam, Alireza; Kharaghani, Abdolreza; Tsotsas, Evangelos; Prat, Marc**

Insights into the velocity field in a slowly drying capillary porous medium

In: EuroDrying'2017: 6th European Drying Conference; 19, 20, 21 June 2017, University of Liège, Belgium - Liège: University, 2017, Session 2, insgesamt 8 Seiten  
[Beitrag auf USB-Stick]

**Müller, Daniel; Bück, Andreas; Tsotsas, Evangelos**

Modelling of continuous fluidized bed spray-granulation

In: 8th International Granulation Workshop: Sheffield, UK, June 2017 - Sheffield, Posternr. 13, paper 71, insgesamt 14 Seiten  
[Beitrag auf USB-Stick]

**Rieck, Christian; Bück, Andreas; Tsotsas, Evangelos**

Influence of contact liquid dispersion on fluidized bed spray agglomeration

In: 8th International Granulation Workshop: Sheffield, UK, June 2017 - Sheffield, Posternr. 11, paper 70, insgesamt 14 Seiten  
[Beitrag auf USB-Stick]

**Trüe, M.; Aman, Sergej; Müller, Peter; Hintz, Werner**

Herstellung von mehrschichtigem Graphen in einer Scheiben-Schwingmühle

In: Produktgestaltung in der Partikeltechnologie: 8. Symposium Partikeltechnologie, 22.-23. Juni 2017, Karlsruhe - Stuttgart: Fraunhofer Verlag, 2017, insgesamt 13 Seiten  
[Symposium: 8. Symposium Partikeltechnologie, 22. - 23. Juni 2017, Karlsruhe]

**Vorhauer, Nicole; Ahmad, Faez; Tretau, Anne; Bück, Andreas; Tsotsas, Evangelos; Prat, Marc**

Pore scale investigation of drying under periodic temperature variation

In: EuroDrying'2017: 6th European Drying Conference; 19, 20, 21 June 2017, University of Liège, Belgium - Liège: University, 2017, Poster 7, insgesamt 8 Seiten  
[Beitrag auf USB-Stick]

**Vorhauer, Nicole; Mirsadraee, N.; Tretau, Anne; Bück, Andreas; Tsotsas, Evangelos; Prat, Marc**

Combined convective and microwave drying of wet clay

In: Second Nordic Baltic Drying Conference: 7-9 June 2017, Hamburg, Germany; proceedings - Hamburg, insges. 15 S.  
[Beitrag auf USB-Stick]

**Zhang, Xiewai; Zhang, EQ.; Grigartzik, L.; Henrich-Noack, Petra; Hintz, Werner; Sabel, Bernhard**

Caspase-3 silence sirna modified poly (butylcyanoacrylate) nanoparticles for optic nerve protection

In: Produktgestaltung in der Partikeltechnologie: 8. Symposium Partikeltechnologie, 22.-23. Juni 2017, Karlsruhe  
- Stuttgart: Fraunhofer Verlag, 2017, insgesamt 19 Seiten  
[Symposium: 8. Symposium Partikeltechnologie, 22. - 23. Juni 2017, Karlsruhe]

**Zoun, Roman; Schallert, Kay; Broneske, David; Heyer, Robert; Benndorf, Dirk; Saake, Gunter**

Interactive chord visualization for metaproteomics

In: 28th International Workshop on Database and Expert Systems Applications: DEXA 2017: 28-31 August 2017, Lyon, France: proceedings - Piscataway, NJ: IEEE, S. 79-83  
[Workshop: 28th International Workshop on Database and Expert Systems Applications, DEXA 2017, Lyon, France, 28-31 August 2017]

### **Dissertationen**

**Alkurdi, Yaser; Warnecke, Gerald [GutachterIn]; Bück, Andreas [GutachterIn]**

Numerical simulation schemes for inhomogeneous convection-diffusion systems modeling fluidized beds.  
- Magdeburg, 2017, vi, 145 Seiten, Illustrationen  
[Literaturverzeichnis: Seite 137-143]

**Bensmann, Boris; Sundmacher, Kai [AkademischeR BetreuerIn]**

Systemanalyse der Druckwasser-Elektrolyse im Kontext von Power-to-Gas-Anwendungen. - Magdeburg, 2017, xv, 151  
Seiten, Illustrationen, Diagramme, 21 cm  
[Literaturverzeichnis: Seite 139-151]

**Do, Nga Thi Quynh; Sundmacher, Kai [GutachterIn]**

Model-based analysis of an electro-enzymatic system for glucose oxidation. - Magdeburg, 2017, vi, 136 Seiten,  
Illustrationen  
[Literaturverzeichnis: Seite 117-128]

**Fachet, Melanie; Sundmacher, Kai [AkademischeR BetreuerIn]**

Systematic analysis of carotenogenesis in microalgae for model-based process design. - Magdeburg, 2017, xviii, 165  
Seiten, Illustrationen

**Gałań, Kamila Gabriela**

Continuous preferential crystallization of enantiomers - simulation, analysis, process design and experimental  
validation. - [Barleben] Docupoint Wissenschaft [2017], xxii, 115 Seiten, Illustrationen, Diagramme, 21 cm - (Docupoint  
Wissenschaft), ISBN 978-3-86912-219-9

**Hentschel, Benjamin; Sundmacher, Kai [AkademischeR BetreuerIn]**

Optimal reaction route for hydroformylation of long-chain olefins in thermomorphic solvent systems. - Magdeburg,  
2017, xv, 150 Seiten, Illustrationen, Diagramme, 30 cm  
[Literaturverzeichnis: Seite 143-150]

**Heyer, Robert Steven; Reichl, Udo [GutachterIn]**

Charakterisierung von mikrobiellen Gemeinschaften aus Biogasanlagen mittels Metaproteomanalyse und Korrelationen  
der Ergebnisse zu den Prozessparametern. - Magdeburg, 2017, XVII, 164, xxxvii Blätter, Illustrationen

**Hoffmann, Torsten; Tsotsas, Evangelos [GutachterIn]; Peglow, Mirko [GutachterIn]; Bück, Andreas [GutachterIn]**

Experimentelle Untersuchungen des Einflusses von verschiedenen Prozessparametern auf das Partikelwachstum bei der Wirbelschicht-Sprühgranulation. - Magdeburg, 2017, XVIII, 137 Blätter, Illustrationen, Diagramme  
[Literaturverzeichnis: Blatt 115-119]

**Horváth, Zoltán; Seidel-Morgenstern, Andreas [AkademischeR BetreuerIn]**

Kontinuierliche chromatographische Trennung gekoppelt mit kontinuierlich betriebenen Reaktoren und nachgeschalteten Trennprozessen. - Aachen Shaker Verlag, 2017, 1. Auflage, 156 Seiten, Illustrationen, Diagramme, 21 cm, 264 g - (Forschungsberichte aus dem Max-Planck-Institut für Dynamik komplexer technischer Systeme; Band 48), ISBN 978-3-8440-5629-7;  
[Literaturverzeichnis: Seite 141-149]

**Kunde, Christian; Kienle, Achim [GutachterIn]; Seidel-Morgenstern, Andreas [GutachterIn]**

Global optimization in conceptual process design. - Magdeburg, 2017, i, 123 Seiten, Illustrationen  
[Literaturverzeichnis: Seite 117-123]

**McBride, Kevin; Sundmacher, Kai [AkademischeR BetreuerIn]**

Model-based process design and solvent selection for the efficient recovery of homogeneous catalyst in chemicals production. - Magdeburg, 2017, xv, 170 Seiten, Illustrationen  
[Literaturverzeichnis: Seite [157]-169]

**Moghaddam, Alireza Attari; Tsotsas, Evangelos [AkademischeR BetreuerIn]; Thévenin, Dominique [AkademischeR BetreuerIn]**

Parameter estimation and assessment of continuum models of drying on the basis of pore network simulations. - Barleben docupoint Verlag, 2017, xiii, 129 Seiten, Diagramme, 21 cm - (Docupoint Wissenschaft; Micro-macro transactions; Volume 27), ISBN 978-3-86912-130-7

**Pieler, Michael Martin; Reichl, Udo [GutachterIn]**

Investigation of influenza virus particle aggregation and purification with magnetic sulfated cellulose particles. - Magdeburg, 2017, xxv, 97 Seiten, Illustrationen  
[Literaturverzeichnis: Seite 61-72]

**Santos da Silva, Francisco Vitor; Kienle, Achim [AkademischeR BetreuerIn]; Seidel-Morgenstern, Andreas [AkademischeR BetreuerIn]**

Analysis and design of center-cut separations using 8-zone simulated moving bed chromatography. - Magdeburg, 2017, 161 Seiten, Illustrationen, Diagramme, 30 cm  
[Literaturverzeichnis: Seite 142-153]

**Tran, Thi Thu Hang; Tsotsas, Evangelos [GutachterIn]; Peglow, Mirko [GutachterIn]**

From single droplet to spray tower drying of dairy solutions. - Barleben docupoint GmbH, 2017, xiv, 136 Seiten, Illustrationen, Diagramme, 21 cm, ISBN 978-3-86912-214-4;  
[Sprache der Zusammenfassung: Deutsch; Literaturverzeichnis: Seite 100-105]

**Varnicic, Miroslava; Sundmacher, Kai [AkademischeR BetreuerIn]**

Novel electroenzymatic process for gluconic acid production. - Magdeburg, 2017, ix, 146 Seiten, Illustrationen, 30 cm  
[Literaturverzeichnis: Seite 132-146]

# INSTITUT FÜR APPARATE- UND UMWELTECHNIK

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

## 1. Leitung

Prof. Dr.-Ing. habil. Ulrich Krause (geschäftsführender Leiter)  
Prof. Dr.-Ing. habil. Dr. h. c. Lothar Mörl  
Prof. Dr.-Ing. habil. Heinz Köser

## 2. HochschullehrerInnen

Prof. Dr.-Ing. habil. Ulrich Krause  
Prof. Dr.-Ing. habil. Dr. h. c. Lothar Mörl  
Prof. Dr.-Ing. habil. Heinz Köser  
Dr.-Ing. Dieter Gabel  
Dipl.-Ing. (FH) Michael Schmidt

## 3. Forschungsprofil

### **Einsatz von verschiedenen Brennstoffen in Wirbelschichten zur Vergasung und zur emissionsarmen Verbrennung in Kooperation mit dem Fraunhofer-Institut IFF Magdeburg**

- Untersuchung des Abbrand- und Emissionsverhaltens von festen Brennstoffen in Wirbelschichtfeuerungen
- Untersuchung der Verbrennungsbedingungen, wie Brennkammertemperatur, Luftverhältnis und Luftführung, Additivzugabe und Optimierung aus verbrennungs- und emissionstechnischer Sicht
- Schadstoffbildungsmechanismen, insbesondere die NO<sub>x</sub>-Bildung
- Wirbelschichtvergasung von biogenen Brenn- und Abfallstoffen zur Erzeugung eines in Gasmotoren nutzbaren Brenngases
- Wirtschaftlichkeit der energetischen Nutzung von Biomassen

### **Experimentelle und theoretische Untersuchungen zur Wirbelschichtbehandlung (Trocknen, Granulieren, Agglomerieren, Coating, Rösten) von feststoffhaltigen Flüssigkeiten und körnigen Substanzen im Luft- und Heißdampfstrom**

- Nutzung von DEM-Simulationen zur Analyse der Fluidodynamik bei gleichzeitiger Granulation in einer blasenbildenden Wirbelschicht
- Nutzung von DEM-Simulationen zur Analyse der Fluidodynamik in der Strahlschicht
- Einsatz von faseroptischen Messverfahren in Wirbelschichten
- Nichtlineare Dynamik der kontinuierlichen Wirbelschicht-Bindestrich-Sprühgranulation
- Regelungskonzepte für kontinuierliche Wirbelschicht-Sprühgranulationsanlagen
- Deformations- und Bruchverhalten von kugelförmigen Granulaten bei Druck- und Stossbeanspruchung: Experiment und DEM-Simulation
- Modellierung der Temperatur- und Konzentrationsfelder sowie die Aufstellung von Populationsbilanzen in flüssigkeitsbedühten Wirbelschichten an Versuchsanlagen DN 1500, 400 und 200



- Modellierung diskontinuierlich ablaufender Prozesse in der Wirbelschicht (Aufheizen, Rösten, Kühlen, Trocknen) mit dem Fluidisierungsmedium Heißdampf und Luft
- Modellierung des Prozesses der SO<sub>2</sub>-Absorption in der Wirbelschicht und die experimentelle Verifizierung an der WS-Anlage DN 400
- Modellierung des Zerfallsverhaltens von Partikeln in Wirbelschichten
- Entwicklung neuer Strahlschichtapparaturen
- Wirbelschicht-Verfahren zur schonenden Gewinnung pflanzlicher Wirkstoffe durch Anwendung tiefer Temperaturen
- Untersuchungen zur Adsorption für die Trocknung temperaturempfindlicher Produkte (auch unter Vakuum)
- Wirbelschicht-Extraktion von ätherischen und fetten Ölen
- Experimentelle Untersuchung von membrangestützten Wirbelschicht-Reaktoren mit Katalysatoren
- Untersuchung von Prozessen der Kaffeeröstung, -kandierung und -kühlung in der Wirbelschicht hinsichtlich Emissionen und Anlagenoptimierung
- Durchführung von experimentellen Untersuchungen zur Trocknung, Granulation, Agglomeration und zum Coating im Industrieauftrag
- Entwicklung neuer Trocknungsverfahren mit interner Kälteerzeugung

#### **Instrumentelle Schadstoffanalytik und Emissionsmesstechnik**

- Quecksilberminderung in Rauchgasen
- Abwasserreinigung
- Luftreinhaltung

#### **Anlagensicherheit**

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

## **4. Serviceangebot**

#### **Brand- und Explosionsschutz**

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

#### **Probabilistische Sicherheits- und Risikoanalysen**

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

#### **Sicherheitstechnische Bewertung von Stoffen**

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

## 5. Methoden und Ausrüstung

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

## 6. Kooperationen

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

## 7. Forschungsprojekte

**Projektleitung:** Prof. Dr.-Ing. habil. Ulrich Krause

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

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

**Förderer:** Fördergeber - Sonstige; 01.08.2015 - 31.07.2018

### **AERIUS - Alternatives Löschmittel Druckluftschaum - komplexe Großschadenslagen vermeiden**

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

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

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

BMBF-FKZ. 13N13630 13N13633

---

**Projektleitung:** Prof. Dr.-Ing. habil. Ulrich Krause  
**Projektbearbeitung:** Wanke, Christoph  
**Förderer:** Fördergeber - Sonstige; 01.01.2015 - 31.12.2017

**EMRIS - Emerging risks of smouldering fires**

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

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

---

**Projektleitung:** Prof. Dr.-Ing. habil. Ulrich Krause  
**Förderer:** EU - Sonstige; 01.01.2013 - 31.12.2017

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

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

---

**Projektleitung:** Prof. Dr.-Ing. habil. Ulrich Krause  
**Förderer:** Industrie; 01.05.2016 - 30.04.2017

**Ermittlung von Zonen der explosionsgefährlichen Atmosphäre an Tanklagern für Kraftstoffe**

Für Tanklager sind Bereiche festzulegen, in denen mit dem Auftreten explosionsfähiger Atmosphäre zu rechnen ist, sogenannte Ex-Zonen. Aufgrund von Betriebserfahrungen ergibt sich die Vermutung, dass die Zoneneinteilung nach gegenwärtigen Regularien übermäßig konservativ ist. Neuere Überlegungen aus anderen Ländern deuten darauf hin, dass die Ex-Zonen um Tanks in ihren Abmessungen reduziert oder herabgestuft werden können.

Im Rahmen eines Forschungsvorhabens soll deshalb näher untersucht und durch entsprechende Messungen und Berechnungen abgesichert werden, welche Konturen von Ex-Zonen sich an den Tankanlagen tatsächlich ausbilden und wie diese mit den bisher unterstellten Ex-Zonen vergleichbar sind.

---

**Projektleitung:** Prof. Dr.-Ing. habil. Ulrich Krause  
**Förderer:** Bund; 19.07.2013 - 31.12.2017

**HYPOS\_Hydrogen Power and Storage Solutions**

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

Das überregionale und interdisziplinäre HYPOS-Konsortium verfolgt zur Verwirklichung seiner Vision einen

fachübergreifenden Konzept- und Projektansatz: Die vorgesehenen Forschungs- und Entwicklungsleistungen werden auf die optimale Umwandlung und Speicherung von Strommengen aus erneuerbaren Quellen in den chemischen Energieträger Wasserstoff ausgerichtet. Gleichzeitig wird die wirtschaftliche und gesellschaftlich akzeptierte Integration dieser erneuerbaren Energieträger in die Versorgungsinfrastruktur vorangetrieben.

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

---

**Projektleitung:** Prof. Dr.-Ing. habil. Ulrich Krause

**Projektbearbeitung:** Prof. Dr.-Ing. habil. U. Krause, Sarah Hahn

**Kooperationen:** BAM Bundesanstalt für Materialforschung und -prüfung; Hekatron GmbH; Minimax GmbH & Co KG; Siemens AG; Vereinigung zur Förderung des deutschen Brandschutzes e.V.; ZVEI - Zentralverband Elektrotechnik- und Elektronikindustrie e.V.

**Förderer:** Bund; 15.10.2016 - 14.10.2019

#### **TEBRAS - Techniken zur Branderkennung, Bekämpfung und Selbstrettung in der frühesten Brandphase**

In Deutschland sterben pro Jahr etwa 400 Menschen durch Brände. Der überwiegende Teil davon kommt im Privatbereich ums Leben und etwa 80 % der Brandopfer durch die Intoxikation mit den Bestandteilen von Brandrauch. Erschwerend kommt hinzu, dass Brände sich heutzutage sehr viel schneller entwickeln als noch vor 30 bis 40 Jahren.

Unter diesen Gesichtspunkten kommt der frühestmöglichen Entdeckung von Vorgängen, die zum Brand führen können, eine wachsende Bedeutung zu. Bei den vorhandenen Systemen zur Branderkennung (Rauchwarnmelder, Wärmemelder, Gasetektoren) muss bereits eine gewisse Entwicklungsphase des Brandes eingetreten sein, um die Detektion zu ermöglichen.

**Ziel 1** des Vorhabens ist deshalb die messtechnische Erkennung von Vorstufen eines Brandes. Damit soll einerseits mehr Zeit für die Selbstrettung gewonnen werden, andererseits soll die Frist bis zur Alarmierung von Einsatzkräften signifikant verkürzt werden. Auf Grundlage der gewonnenen Daten soll eine neue Generation von Branddetektoren begründet werden, die mit deutlich verkürzter Reaktionszeit arbeitet.

**Ziel 2** des Vorhabens ist die Gewinnung von Daten über den Löscherfolg von Selbsthilfemitteln in Abhängigkeit von Brandausmaß und Fertigkeiten der handelnden Personen. Brandfrühsterkennung und frühe Selbsthilfe können damit in ihrem Zusammenwirken als System zur effektiven Bekämpfung von Entstehungsbränden entwickelt werden.

Unterstützt werden die experimentellen Untersuchungen durch numerische Simulationen zur Brand- und Rauchausbreitung in Räumen, um die Strömungspfade der Brandindikatoren detailliert zu ermitteln.

---

**Projektleitung:** Prof. Dr. Heinz Köser

**Förderer:** Bund; 01.11.2014 - 28.10.2018

#### **Quecksilber Emissionen durch festen Hausbrand - Bewertung und Minderung.**

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

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

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

---

**Projektleitung:** Prof. Dr. Heinz Köser

**Kooperationen:** Öko-Institut Berlin

**Förderer:** Bund; 01.10.2017 - 01.02.2020

#### **Quecksilberemissionen aus industriellen Quellen - Status Quo und Perspektiven**

Quecksilber und seine Verbindungen haben schädliche Auswirkungen auf die menschliche Gesundheit und die Umwelt. Internationale und europäische Vereinbarungen und Richtlinien regeln die Verwendung von Quecksilber und dessen

Eintrag in die Umwelt.

Mit den heute eingesetzten Minderungsmaßnahmen wird Quecksilber in relevanten Industriesektoren wie Großfeuerungsanlagen, Metall- und Nichteisenmetallindustrie sowie Zementindustrie aus dem Prozess ausgeschleust. Allerdings werden die mit Quecksilber verunreinigten Abfälle und Nebenprodukte häufig in anderen Prozessen als Sekundärrohstoffe wieder eingesetzt. Mit diesem Vorgehen werden Quecksilberemissionen zwar lokal verringert, aber an anderer Stelle neue Emissionen erzeugt bzw. Quecksilber mit den Produkten großflächig verteilt. Echte Quecksilbersenken, mit denen das Quecksilber dauerhaft aus den Kreisläufen ausgeschleust wird, gibt es in vielen Bereichen nicht.

Aus den vorgenannten Gründen wird das spezifische Freisetzungverhalten für relevante industrielle Quellen und Sektoren unter Berücksichtigung des Quecksilbereintrags in die Produkte untersucht und dokumentiert. Beginnend mit einer Literaturrecherche wird der Stand des Wissens zu Emissionen und bereits verwendeten Minderungsmaßnahmen in verschiedenen Sektoren erhoben. Darauf aufbauend wird untersucht, ob Minderungsmaßnahmen einer Branche auf andere Branchen übertragbar sind.

Neben aktuellen Forschungsergebnissen und technischen Entwicklungen werden auch ökonomische Fragen berücksichtigt.

---

**Projektleitung:** Prof. Dr.-Ing. habil. Dr. h.c. Lothar Mörl

**Projektbearbeitung:** Idakiev, Vesselin

**Förderer:** BMWi/AIF; 01.08.2016 - 31.07.2018

**Entwicklung eines Verfahrens zur Einarbeitung von Harnstoff in eine Salbengrundlage für die Entwicklung eines Keratolytikums**

In Zusammenarbeit mit Pilot Pflanzenöltechnologie Magdeburg e. V. (PPM) und Pharmazeutisches Kontroll- und Herstellungslabor GmbH (PKH) wird ein Projekt zum Thema "Entwicklung eines Verfahrens zur Einarbeitung von Harnstoff in eine Salbengrundlage für die Entwicklung eines Keratolytikums" bearbeitet, welches durch das Bundesministerium für Wirtschaft und Energie (BMWi) im Rahmen des Programmes "Zentrales Innovationsprogramm Mittelstand" (ZIM) gefördert wird. Im Rahmen dieses Kooperationsprojektes soll ein Verfahren entwickelt werden, um Harnstoff in einer bestimmten Partikelgröße in eine wasserfreie Salbengrundlage (z. B. Vaseline) einzubringen, um diese Grundlage für die Entwicklung einer Hautsalbe zu nutzen. Der Lösungsansatz besteht darin, den Harnstoff in Lösung zu bringen und mittels unterschiedlicher Verfahren direkt in der Salbengrundlage zu mikronisieren und anschließend in Wirbelschichten mit induktiver Energieeinbringung zu trocknen.

---

**Projektleitung:** Dr.-Ing. Andrea Klippel

**Kooperationen:** BAM Bundesanstalt für Materialforschung und -prüfung; Forschungszentrum Jülich GmbH; HS Niederrhein/ SO.CON-Institut; PTV Transport Consult GmbH; Werkstatt Lebenshilfe i. Berg. Land GmbH

**Förderer:** Bund; 01.02.2016 - 31.01.2019

**Sicherheit für Menschen mit körperlicher, geistiger oder altersbedingter Beeinträchtigung (SiME)**

Die Bewältigung eines Krisen- oder Katastrophenfalls, besonders die Evakuierung von körperlich, geistig oder altersbedingt beeinträchtigten Menschen aus einer Gefahrenlage stellt für Einsatzkräfte und Pflegepersonal eine besonders hohe Anforderung dar. Eingeschränkte Mobilität oder körperliche Behinderung erschweren die Möglichkeit einer Selbstrettung erheblich. Um Evakuierungsprozesse und Abläufe bewerten und vorhersagen zu können, werden Methoden wie z. B. Evakuierungssimulationen eingesetzt. In den Computersimulationen können bestimmte Grundscenarien berücksichtigt werden, um Bewegungsabläufe und Personenströme berechnen zu können. Allerdings berücksichtigen die derzeitigen Berechnungsmodelle keine Personengruppen, in denen Menschen mit Behinderung oder altersbedingten Beeinträchtigungen enthalten sind. Durch definierte Übungsszenarien mit beeinträchtigten Personen können qualitative Aussagen und quantitative Daten zur Beschreibung von Bewegungsschemen abgeleitet werden. Diese qualitativen und quantitativen Datensätze dienen als Grundlage zur Erweiterung von Berechnungsmodellen.

In dem **Forschungsprojekt SiME** soll durch interdisziplinären Zusammenwirken von universitären und außeruniversitären Forschungseinrichtungen sowie von mittelständischen Unternehmen eine Sicherheitsstrategie geschaffen werden, die bei der Vermeidung und Bewältigung ziviler Schadensszenarien hilft. Konkret soll eine verbesserte Sicherheitsstrategie eine sichere Evakuierung beeinträchtigter Personen aus Gefahrenlagen unter

Berücksichtigung der zusätzlich benötigten Zeit und eventuell notwendiger Fluchtwegsanpassungen ermöglichen.

BMBF-FKZ: 13N13948

---

**Projektleitung:** Dr. Ronald Zinke

**Projektbearbeitung:** Florian Köhler M.Sc.

**Förderer:** Industrie; 01.06.2016 - 30.04.2017

#### **Ermittlung explosionsgefährdeter Bereiche bei Tankanlagen**

Den Bereichen an und um Tankanlagen für brennbare Flüssigkeiten werden gemäß der Technischen Regeln für Gefahrstoffe 509 (TRGS 509) explosionsgefährdete Zonen (Ex-Zonen) zugeordnet. Die Ex-Zonen selbst sind allerdings über Häufigkeitsklassen zündfähiger Freisetzungen definiert, sodass die Zoneneinteilung durch die TRGS nicht der realen Häufigkeitsverteilung unter Betriebsbedingungen entsprechen muss und die zugeordnete Zoneneinteilung i.d.R. sehr konservativ ist.

Zu den möglichen Zündquellen einer Ex-Zone sind Naturphänomene wie Blitze zu zählen, weswegen durch die TRBS 2152 und die DIN EN 62305 Ansprüche an Blitzschutzanlagen vorgegeben werden. Auf diesen Grundlagen müssten bei Beibehaltung der Zoneneinteilung an einer Vielzahl von Tankanlagen in Deutschland kostenintensive Erneuerungen und Erweiterungen hinsichtlich des Blitzschutzes durchgeführt werden.

Im Rahmen dieses Forschungsvorhabens werden reale Konzentrationsverteilungen gemessen und die daraus ermittelten Ex-Zonen mit der vorherigen Zoneneinteilung verglichen. Motiviert ist dies durch die Vermutung, dass die tatsächliche Häufigkeit und räumliche Ausdehnung von Ex-Zonen im Bereich von Tanklagern signifikant von der zugeordneten Häufigkeit und räumlichen Ausdehnung abweichen und bei neuer Zoneneinteilung Erweiterungen des Blitzschutzes neu bewertet werden können. Hierbei soll nicht die Sicherheit der Anlage verringert, sondern geprüft werden, ob sich mit einem hohen Maß an Sicherheitstoleranz der Bereich der Überkonservativität reduzieren lässt.

Die Untersuchung und Bestimmung von realen Konzentrationsverteilungen brennbarer Flüssigkeitsdämpfe erfolgt durch ein geeignetes Messgerätenetz. Hierfür werden ein repräsentativer Schwimmdachtank für Ottokraftstoff und dessen Umfeld mit Messsonden ausgestattet, die über einen Zeitraum von einem halben Jahr bei allen denkbaren Betriebszuständen real auftretende Stoffkonzentrationen messen. Wetter und Betriebszustand werden synchron erfasst, um Korrelationen zu Umgebungsbedingungen mit abbilden zu können.

Sinn ist die Schaffung einer statistisch signifikanten Datenbasis zur Definition einer messwertbasierten Ex-Zoneneinteilung. Darauf aufbauend kann eine messwertbasierte Risikobewertung durchgeführt werden. Falls während des Messprogrammes fortlaufend keine relevanten Konzentrationen detektiert werden, besteht des Weiteren die Option nicht auszuschließende und i.d.R. nicht umgehend registrierte Störungen innerhalb des Normalbetriebs zu betrachten, um allen Anforderungen des Explosionsschutzes gerecht zu werden. Die dabei herangezogenen Freisetzungsszenarien sollen sowohl messtechnisch, als auch durch numerische Simulationen untersucht werden.

---

**Projektleitung:** Dr. Ronald Zinke

**Projektbearbeitung:** Trott, Marco

**Förderer:** BMWi/AIF; 01.07.2016 - 30.06.2019

#### **Modellierung von Brandszenarien in komplexen Gebäudestrukturen mittels fortgeschrittener strömungsdynamischer Methoden**

Zielsetzung des Projekts ist eine umfassende Fehlerbetrachtung sowie Einfluss- und Toleranzanalyse für numerische Strömungssimulationen von Brandszenarien in komplexen Gebäudestrukturen. Dabei sollen insbesondere die baulichen Gegebenheiten kerntechnischer Anlagen sowie eine mögliche anschließende atmosphärische Ausbreitung radioaktiver Isotope im Brandfall berücksichtigt werden.

Dies alles wird unter vollständiger Berücksichtigung einer Toleranz- und Fehlerbetrachtung durch Monte-Carlo-Simulationen mit statistisch verteilten Eingangsparametern durchgeführt. Hierzu werden massiv-parallele Computer (Supercomputer) eingesetzt und Anpassungen und Weiterentwicklungen bestehender Programmcodes (OpenFOAM) vorgenommen. Die Bewertung des Ereignisspektrums, verursacht durch die explizite Berücksichtigung der Schwankungen in den unsicheren Parametern, führt dann zu einer möglichen Verwendung der Ergebnisse im Rahmen probabilistischer Sicherheitsanalysen.

**Projektleitung:** MSc Bastian Druschinski

**Förderer:** Land (Sachsen-Anhalt); 01.07.2016 - 30.06.2019

**Untersuchung der Flammenausbreitung in hybriden Gemischen**

Die Flammenausbreitung in hybriden Gemischen (diese sind brennbare Gemische aus Staub / Gas / Dämpfen und Luft) zeigt einige Phänomene auf, die für die einzelnen Stoffe nicht zu beobachten sind. So kann in hybriden Gemischen eine Zündung und Flammenausbreitung erfolgen, wenn von jedem anteiligen Stoff die Menge unterhalb der unteren Explosionsgrenze vorliegt.

Um diese Prozesse besser zu verstehen, soll mit dieser Arbeit die Flammenausbreitung besonders ins Auge genommen werden. Hierzu wird ein neuer Versuchsstand entwickelt, der im Gegensatz zu den bestehenden Apparaturen zur Untersuchung von Staubexplosionen den Staub nicht impulsartig verwirbelt, sondern ein anderes Verfahren hierzu anwendet. Die Zündung des brennbaren Gemisches erfolgt mittels eines Zündfunken und die Flammenausbreitung kann mit Hilfe einer Hochgeschwindigkeitskamera, sowie einer Thermokamera betrachtet werden.

---

**Projektleitung:** MSc Bastian Druschinski

**Förderer:** Land (Sachsen-Anhalt); 01.07.2016 - 30.06.2017

**Untersuchung der Zündvorgänge in explosionsfähigen Gemischen an der Grenze zu heißen Freistrahlen**

Die Ausbreitung von Explosionsflammen ist ein komplexes Phänomen, das auf verhältnismäßig kleinen Zeitskalen ablaufende strömungsdynamische und chemische Teilvorgänge verknüpft. Dabei tritt eine positive Rückkopplung ein, weil die Explosionsflammen einerseits Strömungswirbel induzieren, diese wiederum die Flammenoberfläche vergrößern und damit die Reaktionsrate erhöhen.

Die Modellierung dieser komplexen Vorgänge mit Mitteln der Kontinuumsmechanik stellt höchste Ansprüche, weil zahlreiche Sub-Modelle für Teilphänomene mit den strömungsdynamischen Grundgleichungen verknüpft werden müssen. Die starke Kopplung von Chemie und Turbulenz stellt hohe Anforderungen an die Leistungsfähigkeit der numerischen Simulation der Zündung. Wichtige Prozesse lassen sich nicht direkt lösen, sondern müssen durch geeignete Modelle approximiert werden.

In dem beabsichtigten Promotionsvorhaben soll eine solche Modellierung auf die Zündung ruhender oder bewegter explosionsfähiger Gasgemische durch erhitzte Freistrahlen, die aus Leckagen an explosionsgeschützten Geräten der Zündschutzart druckfeste Kapselung auftreten können, angewendet werden. Bei diesen Geräten kommt es zum Eindringen zündfähiger Atmosphäre aus dem explosionsfähigen Bereich in das Gehäuseinnenleben, und das eingedrungene Gas kann sich im Inneren entzünden. Diese Geräte sind für einen solchen Druck- und Temperaturanstieg ausgelegt, jedoch kommt es durch Spalten in den Gehäusewänden zu einem Austreten von erhitzten Verbrennungsgasen. Diese treten in der Form von instationären Freistrahlen aus dem Gehäuse in die umliegende explosionsfähige Atmosphäre aus.

Die Möglichkeit der Zündung explosionsfähiger Gemische durch solche Freistrahlen ist nicht ausreichend untersucht, und die Zulassung solcher Geräte bedarf bisher stets der versuchstechnischen Einzelzulassung. Die Entwicklung eines geeigneten validierten Simulationsmodells würde diesen Aufwand erheblich verringern, da hierdurch eine wissenschaftsbasierte Normung alleine aufgrund der Geometrie des Gehäuses möglich würde.

## **8. Eigene Kongresse, wissenschaftliche Tagungen und Exponate auf Messen**

## **9. Veröffentlichungen**

### ***Begutachtete Zeitschriftenaufsätze***

**Addai, Emmanuel Kwasi; Addo, Albert; Abbas, Zaheer; Krause, Ulrich**

Investigation of the minimum ignition temperature and lower explosion limit of multi-components hybrid mixtures in the Godbert-Greenwald furnace

In: Process safety and environmental protection - Amsterdam: Elsevier, Bd. 111.2017, S. 785-794

[Imp.fact.: 2,905]

**Bishop, R. F.; Li, P. H. Y.; Zinke, Ronald; Darradi, R.; Richter, Johannes; Farnell, D. J. J.; Schulenburg, Jörg**  
The spin-half XXZ antiferromagnet on the square lattice revisited - a high-order coupled cluster treatment  
In: Journal of magnetism and magnetic materials: MMM - Amsterdam: North-Holland Publ. Co, Bd. 428.2017, S. 178-188  
[Imp.fact.: 2,357]

**Hahn, Sarah-K.; Rost, Michael; Kusche, Christian; Knaust, Christian; Krause, Ulrich**  
Dokumentation der Entwicklung des m-Faktors und neuer Aspekt der Verbrennungseffizienz  
In: Bautechnik: Zeitschrift für den gesamten Ingenieurbau - Berlin: Ernst, 2017; <http://dx.doi.org/10.1002/bate.201700020>

**Idakiev, Vesselin V.; Graner, Sebastian; Bück, Andreas; Tsotsas, Evangelos; Mörl, Lothar**  
Wärmeübergangsuntersuchung in einer induktiv beheizten Wirbelschicht mit heterogener Schichtzusammensetzung  
In: Chemie - Ingenieur - Technik: CIT - Weinheim: Wiley-VCH Verl, Bd. 89.2017, 6, S. 772-784  
[Imp.fact.: 0,877]

**Idakiev, Vesselin V.; Lazarova, Pavleta V.; Bück, Andreas; Tsotsas, Evangelos; Mörl, Lothar**  
Inductive heating of fluidized beds - drying of particulate solids  
In: Powder technology: an international journal on the science and technology of wet and dry particulate systems - Amsterdam [u.a.]: Elsevier Science, Bd. 306.2017, S. 26-33  
[Imp.fact.: 2,759]

**Leutritz, Tobias; Hilfert, Liane; Busse, Ulrich; Smalla, K.-H.; Speck, Oliver; Zhong, K.**  
Contribution of iron and protein contents from rat brain subcellular fractions to MR phase imaging  
In: Magnetic resonance in medicine: MRM: an official journal of the International Society for Magnetic Resonance in Medicine - New York, NY [u.a.]: Wiley-Liss, Bd. 77.2017, 5, S. 2028-2039  
[Imp.fact.: 3,924]

**Plagge, Michael; Krause, Ulrich; Riva, Enrico; Schäfer, Christoph; Forkel-Wirth, Doris**  
An alternative method for thermal plume - induced aerosol release and deposition calculations in large geometries using fireFoam  
In: Nuclear technology - La Grange Park, Ill: Soc, Bd. 198.2017, 1, S. 43-52  
[Imp.fact.: 0,623]

**Schubert, Stefanie; Krause, Ulrich**  
Numerische Untersuchung zur Rauchgasströmung in energieeffizienten Gebäuden mit kontrollierter Wohnraumlüftung  
In: Bautechnik: Zeitschrift für den gesamten Ingenieurbau - Berlin: Ernst, Bd. 94.2017, 6, S. 344-349

### ***Nicht begutachtete Zeitschriftenaufsätze***

**Zinke, Ronald; Köhler, Florian; Krause, Ulrich**  
Abschätzung von Emissionsmassenströmen aus Schwimmdachtanks für Ottokraftstoffe - Einflussvariablen und Unsicherheiten  
In: Technische Sicherheit - Düsseldorf: Springer-VDI-Verl, Bd. 7.2017, 9, S. 40-45

### ***Begutachtete Buchbeiträge***

**Addai, Emmanuel Kwasi; Gabel, Dieter; Krause, Ulrich**  
Explosion properties of three-phase hybrid mixtures  
In: 5. Magdeburger Brand- und Explosionsschutztag - Magdeburg, 2017  
[Beitrag auf USB-Stick]

**Hahn, Sarah K.; Krause, Ulrich**  
Detektionserfolg und Detektionszeiten bei der Brandfrüherkennung  
In: 13. Fachtagung Anlagen-, Arbeits- und Umweltsicherheit: Köthen, 16./17. November 2017 - Köthen: Hochschule Anhalt  
[Tagung: 13. Fachtagung Anlagen-, Arbeits- und Umweltsicherheit, Köthen, 16./17. November 2017]



**Idakiev, Vesselin; Bück, Andreas; Tsotsas, Evangelos; Mörl, Lothar**

Inductive energy input in fluidized beds and its applications

In: Second Nordic Baltic Drying Conference: 7-9 June 2017, Hamburg, Germany; proceedings - Hamburg, insges. 9 S.  
[Beitrag auf USB-Stick]

**Zinke, Ronald; Köhler, Florian; Krause, Ulrich**

Explosive gas area classifications at gasoline storage tanks - a project presentation

In: 5. Magdeburger Brand- und Explosionsschutztag - Magdeburg, insges. 12 S., 2017  
[Beitrag auf USB-Stick]

**Wissenschaftliche Monografien**

**Köhler, Florian; Zinke, Ronald**

Ermittlung explosionsgefährdeter Bereiche bei Tankanlagen

Hamburg DGMK, Deutsche Wissenschaftliche Gesellschaft für Erdöl, Erdgas und Kohle e.V., 2017, vii, 80 Seiten,  
Illustrationen, Diagramme - (DGMK-Forschungsbericht; 793), ISBN 978-3-941721-84-5

**Abstracts**

**Hahn, Sarah-K.; Rost, Michael; Krause, Ulrich**

Calculating the combustion efficiency by heat release rate test data

In: 12th international symposium fire safety science: 12-16 June 2017, Lund University, Lund Sweden: book of abstracts  
posters - Lund, 2017, Art. P13  
[Symposium: 12th international symposium fire safety science, Lund, Sweden, 12-16 June, 2017]

**Dissertationen**

**Melcher, Thomas; Specht, Eckehard [AkademischeR BetreuerIn]; Krause, Ulrich [AkademischeR BetreuerIn]**

Reproduzierbarkeit von Brandversuchen - experimentelle und numerische Betrachtungen. - Barleben docupoint GmbH,  
2017, xxiii, 200 Seiten, Illustrationen, Diagramme, 21 cm - (Docupoint Wissenschaft), ISBN 978-3-86912-129-1

**Saad, Rania Abdalla Babiker; Köser, Heinz [AkademischeR BetreuerIn]**

Influence of system type, loading regimes and helophyte species on inorganic sulfur transformations in constructed  
wetlands. - Magdeburg, 2017, xx, 112 Seiten, Illustrationen, Diagramme, Karten, 30 cm  
[Literaturverzeichnis: Seite 99-108]

# INSTITUT FÜR CHEMIE

Universitätsplatz 2, 39106 Magdeburg  
Tel. +49 (0)391 67 58672, Fax +49 (0)391 67 12223  
ich@uni-magdeburg.de

## 1. Leitung

Prof. Dr. rer. nat. habil. Dieter Schinzer (Institutsleiter)  
Prof. Dr. rer. nat. Franziska Scheffler  
Prof. Dr. rer. nat. habil. Helmut Weiß  
Prof. Dr. rer. nat. habil. Frank T. Edelmann

## 2. HochschullehrerInnen

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

## 3. Forschungsprofil

### AG Anorganische Chemie

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

### AG Organische Chemie

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

#### **AG Physikalische Chemie**

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

#### **AG Technische Chemie**

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

#### **4. Serviceangebot**

NMR-Messungen verschiedener Kerne an Feststoffen und Flüssigkeiten

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

Stickstoff-Tieftemperaturadsorption

Sorptionsmessungen mit CO<sub>2</sub>, Wasser etc.

Quecksilberporosimetrie

Rheologische Messungen

Katalysatorrestung

#### **5. Kooperationen**

- Bayerisches Zentrum für Angewandte Energieforschung e.V. Würzburg
- CeramTec GmbH, Plochingen
- Deutsches Zentrum für Luft- und Raumfahrt e.V. (DLR)
- Dr. Wolf von Tümpling, Helmholtz-Zentrum für Umweltforschung (UFZ), Magdeburg
- Evonik GmbH & Co KG, Stuttgart
- Karlsruher Institut für Technologie (KIT)
- Leoni Bordnetze-Systeme GmbH, Kitzingen
- Prof. Dr. Norbert Stock, Christian-Albrechts-Universität zu Kiel
- Prof. Dr. Wolfgang Grünert, Ruhr-Universität Bochum

- Stiebel Eltron GmbH & Co KG, Holzminden

## 6. Forschungsprojekte

**Projektleitung:** Prof. Dr. Franziska Scheffler

**Projektbearbeitung:** Künzel, Christian

**Förderer:** EU - ESF Sachsen-Anhalt; 01.02.2017 - 31.01.2021

### **MEMoRIAL-M2.10 | Preparation and testing of thermoelectric materials**

Thermoelectric materials generate a thermovoltage when exposed to a temperature gradient. They are central components in thermoelectric generators, which allow for recovering electric energy from waste heat leading to higher energy efficiency and lower emissions. To reduce processing costs as well as to open up novel fields of application, coating- and film technologies are in the focus of this research project. Apart from the compounds' thermoelectric properties, also the mechanical properties of these layers and films crucially affect technical applications.

The objective of this PhD project is to develop new processing routes in order to produce mechanically stable layers of different thermoelectric compounds. The project will encompass the preparation of layered samples, a detailed characterisation and testing, as well as the investigation of the structure-properties-correlation.

---

**Projektleitung:** Prof. Dr. Helmut Weiß

**Förderer:** Haushalt; 01.10.2014 - 30.09.2018

### **Absolutbedeckung des Adsorbates Wasser auf definierten NaCl(100)-Einkristallflächen**

Das Adsorptionssystem Wasser auf definierten NaCl(100)-Einkristallflächen ist aufgrund seiner Relevanz für verschiedenste Bereiche experimentell wie auch theoretisch wiederholt untersucht worden. Für die gesättigte erste Lage wurden zwei verschiedene Strukturen beobachtet eine (1x1)- und eine c(4x2)-Struktur. Es konnte gezeigt werden, dass erstgenannte erst durch Elektro-neneinfluss (z.B. bei Beugung langsamer Elektronen, LEED) irreversibel in die c(4x2)-Struktur umgewandelt wird. Der Mechanismus ist nicht verstanden, kann aber von großer Bedeutung auch für andere Systeme sein, da LEED eine elementare Untersuchungsmethode zur Strukturaufklärung ist. Unklarheit herrscht auch über den Bedeckungsgrad; hier wurden für die erste Lage Wasser zwischen 0,5 und 3 Moleküle je NaCl(100)-Elementarzelle vorgeschlagen. Theoretische Untersuchungen trugen bislang wenig zur Klärung bei. Mittlerweile konnten erste Messungen mittels Photoelektronenspektroskopie an diesem Adsorptionssystem durchgeführt werden. Sie werden jetzt weitergeführt mit dem Ziel der Absolutbestimmung der Belegung der ersten Wasserlage auf NaCl(100)-Einkristallflächen. und der Aufdeckung des Mechanismus der elektroneninduzierten Strukturumwandlung.

---

**Projektleitung:** Prof. Dr. Frank T. Edelmann

**Projektbearbeitung:** Harmgarth, Nicole; Zörner, Florian

**Förderer:** Deutsche Forschungsgemeinschaft (DFG); 01.11.2016 - 30.03.2018

### **Atomlagenabscheidung von Germanium-Antimon-Tellurid**

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

---

**Projektleitung:** Prof. Dr. Frank T. Edelmann

**Projektbearbeitung:** Harmgarth, Nicole; Rädisch, Tim

**Förderer:** Land (Sachsen-Anhalt); 01.10.2014 - 30.03.2018

#### **Chemie der Carboranylamidinate**

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

---

**Projektleitung:** Prof. Dr. Frank T. Edelmann

**Projektbearbeitung:** Lorenz, Dr. Volker

**Förderer:** Deutsche Forschungsgemeinschaft (DFG); 01.10.2014 - 30.03.2018

#### **Metallasilsesquioxane**

Funktionalisierte Disiloxane und Silsesquioxane als Bausteine für neuartige komplexe Moleküle, Katalysatoren und Polymermaterialien auf Si-O-Basis. Im Rahmen des geplanten Forschungsvorhabens sollen monofunktionalisierte bzw. monoanionische Disiloxane und Silsesquioxane zum Aufbau komplexer Moleküle, Katalysatoren und Polymermaterialien auf Si-O-Basis verwendet werden. In einem ersten Schwerpunkt des Vorhabens soll mit Hilfe von anionischen Lithiumdisiloxandiolat-Liganden eine Klasse neuartiger f-Elementkomplexe etabliert werden, die als "anorganische Lanthanoidmetallocene" bezeichnet werden kann. Ziel dieser Untersuchungen ist die Synthese hochreaktiver Metallalkyle und -hydride auf der Basis von Siloxandiolat-Liganden. Im Zweiten Schwerpunkt spielen die monofunktionalisierten Silsesquioxanderivate ( $C_6H_{11}Si_8O_{12}(OH)_3$ ) und ( $C_6H_{11}Si_8O_{12}(OLi)_4$ ) eine zentrale Rolle. Mit ihrer Hilfe sollen neuartige, zwei- und dreidimensionale komplexe Moleküle wie z.B. Silsesquioxan-substituierte anorganische Ringe, Käfige und Dendrimere sowie Polymermaterialien aufgebaut werden. Durch Plasmabehandlung sollen Metallasilsesquioxane in neuartige poröse Materialien mit interessanten Adsorptions- und Katalysatoreigenschaften umgewandelt werden. Silsesquioxane und Metallasilsesquioxane sind technisch in vielerlei Hinsicht bedeutsam. Silsesquioxane (auch als POSS bezeichnet) dienen als Additive für neuartige Hochleistungspolymere ("nanostructured polymers"), die u.a. als hitzebeständige Polymere in der Raumfahrttechnik eingesetzt werden können. Weiterhin haben Silsesquioxane interessante Flammgeschutzigenschaften. Metallasilsesquioxane sind interessante Homogenkatalysatoren, z.B. für Oxidationsreaktionen. Durch Pyrolyse, aber auch durch Plasmabehandlung, lassen sie sich in neuartige Heterogenkatalysatoren umwandeln.

---

**Projektleitung:** Prof. Dr. Frank T. Edelmann

**Projektbearbeitung:** Lorenz, Dr. Volker; Rausch, Janek

**Förderer:** Deutsche Forschungsgemeinschaft (DFG); 01.10.2014 - 30.03.2018

#### **Multidecker-Sandwich-Komplexe der Lanthanoide**

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

---

**Projektleitung:** Prof. Dr. Frank T. Edelmann

**Projektbearbeitung:** Edelmann, Prof. Dr. Frank T.; Harmgarth, Nicole

**Förderer:** Deutsche Forschungsgemeinschaft (DFG); 01.10.2014 - 30.03.2018

#### **Organocer(IV)-chemie**

Hauptziel des Forschungsvorhabens ist die Synthese und vollständige Charakterisierung neuartiger Koordinations- und Organometallverbindungen des vierwertigen Cers. Direktoxidationen maßgeschneiderter (Organo)Cer(III)-Verbindungen mit innovativen Oxidationsmitteln stehen dabei ebenso im Fokus wie Organocer(IV)-Organocer(IV)-Transformationen. Wichtige Zielverbindungen bilden neben Cer(IV)-Amidinen und Cer(IV)-(Silyl)amiden auch neuartige Organocer(IV)-Komplexe mit Cyclopentadienyl- und Cyclooctatetraenyl-Liganden. Die Darstellung der ersten Organocer(IV)-Komplexe mit s-gebundenen Alkyl-Liganden soll unter Verwendung sowohl nicht-reduzierender Alkylierungsmittel wie  $ZnMe_2$  oder  $SnMe_4$  als auch sterisch sehr anspruchsvoller Alkyl- oder Phenyl-Liganden versucht werden. Schon ein bescheidener Erfolg auf diesem Teilgebiet könnte von großer Bedeutung für die weitere Entwicklung der metallorganischen Chemie des vierwertigen Cers sein. Weitere wichtige Ziele dieses Forschungsvorhabens sind Studien zur Reaktivität von Cer-Komplexen mit carbonylischen Substraten als auch die

Oberflächen-Organometallchemie molekularer Ce(III)/Ce(IV)-Redoxsysteme. Die Verwendung von periodisch mesoporösen Silicas als Trägermaterialien und der Einsatz der heterogenisierten Silylamid-Route bilden zentrale Kriterien für das Studium der Stabilität und (katalytischen) Reaktivität solcher molekularer Ce(IV)-Oberflächenspezies. Das Forschungsvorhaben umfasst somit folgende Teilprojekte:

- (i) *Synthese von Ausgangsmaterialien (spezielle Oxidantien und Cer(III)-Vorstufen)*
  - (ii) *Synthese von Cer(IV)-Amidinen mittels  $PhICl_2$ ,  $C_2Cl_6$  und 1,4-Benzochinon*
  - (iii) *Synthese von Cer(IV)-Verbindungen mit Cyclopentadienyl- und Cyclooctatetraenyl-Liganden*
  - (iv) *Versuche zur Synthese von s-Alkylcer(IV)-Verbindungen*
  - (v) *Neuartige Ce(III)-Ce(IV) und Ce(IV)-Ce(IV)-Synthesepotokolle*
  - (vi) *Metallorganische Ce(IV)-Oberflächenspezies:  $SO_2Ce(IV)C$*
  - (vii) *Mechanistische Untersuchungen zur Cer-Redoxchemie mit carbonylischen Substraten*
  - (viii) *Organocer(IV)-Katalyse*
- 

**Projektleitung:** Prof. Dr. Frank T. Edelmann

**Förderer:** Haushalt; 01.11.2016 - 30.03.2018

**Supramolekulare Komplexverbindungen mit Azolylpropanamid-Liganden**

Supramolekulare Kristallstrukturen sind von großem aktuellem Interesse, insbesondere solche mit dreidimensionalen Netzwerken aus Wasserstoffbrücken. In den vergangenen Jahren wurden in unserem Arbeitskreis neue multifunktionelle Liganden entwickelt, die sich zum Aufbau solcher Strukturen eignen. Typische Vertreter dieser neuen Liganden sind das *N*-Pyrazolylpropanamid und das *N*-Triazolylpropanamid. Ziel des Forschungsvorhabens ist es, weitere Pyrazolylpropanamid-Liganden und davon ausgehend neue supramolekulare Komplexverbindungen mit ausgewählten Übergangsmetallen zu synthetisieren und durch Einkristall-Röntgenstrukturanalysen aufzuklären.

---

**Projektleitung:** PD Dr. Edgar Haak

**Förderer:** Deutsche Forschungsgemeinschaft (DFG); 01.12.2014 - 30.11.2017

**Kaskadentransformationen ungesättigter Alkohole mit bifunktionellen Rutheniumkatalysatoren**

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

---

**Projektleitung:** Dr. Alexandra Lieb

**Projektbearbeitung:** Betke, Dr. Ulf

**Kooperationen:** Prof. Dr. Franziska Scheffler, ICH-TC; Prof. Dr. Michael Scheffler, FMB-IWF

**Förderer:** Bund; 01.06.2013 - 31.05.2018

**Neuartige Kompositwerkstoffe für die thermochemische Energiespeicherung, BMBF-Nachwuchsforschergruppe NEOTHERM**

In der interdisziplinären Nachwuchsforschergruppe Neuartige Kompositwerkstoffe für die thermochemische Energiespeicherung (NEOTHERM) mikro-makro-poröse Kompositmaterialien für die thermochemische Energiespeicherung entwickelt, charakterisiert und bewertet. Ziel ist es, Sorptionsmaterialien für das Sorbat Wasser mit

hoher Speicherdichte, effektivem Wärmeübergang und applikationsangepasster Sorptionstemperatur ( $\gg 20-500$  °C) und geeignetem Temperaturhub sowohl für die Speicherung solarer Wärme als auch für die Energierückgewinnung aus technischen Prozessen bereitzustellen. Dazu sollen zelluläre Werkstoffe als Trägermaterialien entwickelt und bezüglich ihrer chemischen, morphologischen und thermischen Eigenschaften optimiert werden. Parallel dazu sollen als Aktivkomponente der Wärmespeicherung mikroporöse kristalline Verbindungen (*metal organic frameworks* = MOFs und Zeolithe) entwickelt und/oder modifiziert und auf dem Träger fixiert werden, z.B. mittels *in-situ*-Kristallisation oder Träger-Linker-Reaktion. Innerhalb der Nachwuchsgruppe sollen folgende Aspekte der neuen Werkstoffverbände bearbeitet werden: (1) Synthese neuer bzw. modifizierter mikroporöser Materialien (Aktivkomponente), (2) Entwicklung von Herstellungsverfahren für makroporöse monolithische Materialien mit variierbaren oberflächenchemischen und thermischen Eigenschaften und gezielt eingestellter, offener Porosität (Träger), (3) Beschichtung/Oberflächenmodifizierung von offenzelligen Schäumen zur Einstellung der Sorptionseigenschaften des Verbundmaterials, (4) Steuerung von Ad- und Desorptionsvorgängen in porösen Festkörpern durch Steuerung der Porengröße und -form, (5) Evaluierung des Langzeitverhaltens der Wärmespeichermaterialien. Die Entwicklung der neuartigen Materialien erfolgt von Beginn an mit Blick auf den technischen Einsatz bezüglich der Arbeitstemperatur, des Lade-/Entladeverhaltens, der Langzeitstabilität, der Speicherdichte, und der Kosten und Sicherheit. Nach positiver Evaluierung wird das Projekt in einem zweiten Zeitraum bis Ende Mai 2018 fortgesetzt. Im Rahmen der Fortführung wird ein Sorptionskinetik-Messtand für Kompositmaterialien und ein Demonstrator aufgebaut.

---

**Projektleitung:** Dr. habil. Jochen Vogt  
**Kooperationen:** Universität Osnabrück, Oberflächenphysik  
**Förderer:** Haushalt; 01.07.2016 - 28.06.2021

**Numerische Analyse molekularer Strukturen auf Oberflächen**

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

Ziel des Projekts ist die Fortführung der Simulation solcher Strukturen mit Hilfe von quantenchemischen und molekuldynamischen Methoden. Darüberhinaus erfordert die experimentelle Untersuchung von Filmstrukturen mit Hilfe der Beugung langsamer Elektronen (LEED, DLEED) eine nachgeschaltete numerische Auswertung, deren Aufwand z. B. im Falle von Defektstrukturen erheblich ist. Ziel des Projekts ist einerseits die Durchführung von Oberflächenstrukturanalysen mit existierenden Computercodes. Darüberhinaus wird die begonnene Erforschung und der Test neuer numerischer Methoden zur Strukturanalyse auf Grundlage von LEED-Experimenten fortgeführt.

**7. Eigene Kongresse, wissenschaftliche Tagungen und Exponate auf Messen**

**8. Veröffentlichungen**

**Begutachtete Zeitschriftenaufsätze**

**Anwander, Reiner; Dolg, Michael; Edelmann, Frank T.**

The difficult search for organocerium( iv ) compounds  
 In: Chemical Society reviews: CSR - London: Soc, insges. 13 S., 2017  
 [Imp.fact.: 38,618]

**Anwander, Reiner; Schneider, David; Edelmann, Frank T.; Harmgarth, Nicole**

Ceric cyclopentadienides bearing alkoxy, aryloxy, chlorido, or iodido co-Ligands  
 In: Chemistry - a European journal - Weinheim: Wiley-VCH, 2017; <http://dx.doi.org/10.1002/chem.201700743>  
 [Imp.fact.: 5,771]

**Apostolidis, Christos; Walter, Olaf; Vogt, Jochen; Liebing, Phil; Maron, Laurent; Edelmann, Frank T.**

A structurally characterized organometallic plutonium(IV) complex  
 In: Angewandte Chemie - Weinheim: Wiley-VCH, 2017; <http://dx.doi.org/10.1002/ange.201701858>

**Betke, Ulf; Dalicho, Sebastian; Rannabauer, Stefan; Lieb, Alexandra; Scheffler, Franziska; Scheffler, Michael**  
 Impact of slurry composition on properties of cellular alumina - a computed tomographic study

In: Advanced engineering materials - Weinheim: Wiley-VCH Verl, 2017; <http://dx.doi.org/10.1002/adem.201700138>  
[Imp.fact.: 1,817]

**Chen, Xiaodong; Betke, Ulf; Rannabauer, Stefan; Peters, Paul; Söffker, Gerrit; Scheffler, Michael**  
Improving the strength of ZTA foams with different strategies - immersion infiltration and recoating  
In: Materials - Basel: MDPI, Bd. 10.2017, 7, S. 735  
[Imp.fact.: 2,654]

**Edelmann, Frank T.; Harmgarth, Nicole; Zörner, Florian; Liebing, Phil; Silinskas, Mindaugas; Engelhardt, Felix**  
Molecular precursors for the phase-change material germanium-antimony-telluride, Ge<sub>2</sub>Sb<sub>2</sub>Te<sub>5</sub> (GST)  
In: Zeitschrift für anorganische und allgemeine Chemie: ZAAC - Weinheim: Wiley-VCH, insges. 18 S., 2017

**Fedorova, Anna; Betke, Ulf; Scheffler, Michael**  
Polymer derived ceramics with  $\beta$ -eucryptite fillers - filler-matrix interactions  
In: Advanced engineering materials - Weinheim: Wiley-VCH Verl, 2017; <http://dx.doi.org/10.1002/adem.201700079>  
[Imp.fact.: 1,817]

**Fey, Tobias; Betke, Ulf; Rannabauer, Stefan; Scheffler, Michael**  
Reticulated replica ceramic foams - processing, functionalization, and characterization  
In: Advanced engineering materials - Weinheim: Wiley-VCH Verl, insges. 15 S., 2017  
[Imp.fact.: 2,319]

**Gerlach, Martin; Abdul Wajid, D.; Hilfert, Liane; Edelmann, Frank T.; Seidel-Morgenstern, Andreas; Hamel, Christof**  
Impact of minor amounts of hydroperoxides on rhodium-catalyzed hydroformylation of long-chain olefins  
In: Catalysis science & technology: a multidisciplinary journal focussing on all fundamental science and technological aspects of catalysis - London: RSC Publ, 7, S. 1465-1469, 2017  
[Imp.fact.: 5,287]

**Gießmann, Stephan; Lorenz, Volker; Liebing, Phil; Hilfert, Liane; Fischer, Axel; Edelmann, Frank T.**  
Synthesis and structural study of new metallasilsesquioxanes of potassium and uranium  
In: Dalton transactions: a journal of inorganic chemistry, including bioinorganic, organometallic, and solid-state chemistry - London: Soc, 2017; <http://dx.doi.org/10.1039/C7DT00006E>  
[Imp.fact.: 4,177]

**Harmgarth, Nicole; Liebing, Phil; Zörner, Florian; Silinskas, Mindaugas; Burte, Edmund P.; Edelmann, Frank T.**  
Synthesis and crystal structures of the first antimony(III) aziridinides  
In: Inorganic chemistry - Washington, DC: American Chemical Society, Bd. 56.2017, 8, S. 4267-4270  
[Imp.fact.: 4,820]

**Holze, Susann; Krüger, Benjamin; Hoffmann, Torsten; Bück, Andreas; Schwidder, Michael**  
Influence of TiO<sub>2</sub>-layer thickness of spray-coated glass beads on their photocatalytic performance  
In: Chemical engineering & technology: industrial chemistry, plant equipment, process engineering, biotechnology - Weinheim: Wiley-VCH Verl.-Ges, 2017; <http://dx.doi.org/10.1002/ceat.201600432>  
[Imp.fact.: 2,385]

**Jäckel, Elisabeth; Kaufmann, Julia; Haak, Edgar**  
Complex polycycles from simple propargyl alcohols through ruthenium-catalyzed cascade reactions and one-pot procedures  
In: Synthesis: journal of synthetic organic chemistry - Stuttgart [u.a.]: Thieme, 2017; <http://dx.doi.org/10.1055/s-0036-1591735>  
[Imp.fact.: 2,650]

**Leutritz, Tobias; Hilfert, Liane; Busse, Ulrich; Smalla, K.-H.; Speck, Oliver; Zhong, K.**  
Contribution of iron and protein contents from rat brain subcellular fractions to MR phase imaging  
In: Magnetic resonance in medicine: MRM: an official journal of the International Society for Magnetic Resonance in



Medicine - New York, NY [u.a.]: Wiley-Liss, Bd. 77.2017, 5, S. 2028-2039

[Imp.fact.: 3,924]

**Liebing, Phil; Husien, Asrial A.; Fischer, Axel; Nietzschmann, Eckhart; Edelmann, Frank T.**

Macromolecular self-assembly of organotin(IV) squarates and croconates - preparation and crystal structures of  $[\text{SnMe}_2(\text{H}_2\text{O})_2]_2[\text{C}_4\text{O}_4]$ ,  $[\text{SnMe}_3]_2[\text{C}_4\text{O}_4]$ , and  $[\text{SnMe}_3(\text{H}_2\text{O})]_2[\text{C}_5\text{O}_5]$

In: Zeitschrift für anorganische und allgemeine Chemie: ZAAC - Weinheim: Wiley-VCH, 2017; <http://dx.doi.org/10.1002/zaac.201700042>

[Imp.fact.: 1,261]

**Rannabauer, Stefan; Söffker, Gerrit-Maximilian; Scheunemann, Marcel; Betke, Ulf; Scheffler, Michael**

Increased mechanical stability and thermal conductivity of alumina reticulated porous ceramics (RPC) by nanoparticle infiltration processing

In: Advanced engineering materials - Weinheim: Wiley-VCH Verl, Vol. 19.2017, 10, Art. 1700211, insgesamt 9 S.

[Special Issue: Cellular Materials]

[Imp.fact.: 2,319]

**Rausch, Janek; Liebing, Phil; Kühling, Marcel; Lorenz, Volker; Hrib, Cristian G.; Hilfert, Liane; Edelmann, Frank T.**

Synthesis and structural characterization of new zirconium(IV) bent metallocenes comprising  $[\eta^8\text{-}1,5\text{-}7,8\text{-}8\text{-}cyclooctatetraenyl]$  and bulky cyclopentadienyl ligands

In: Zeitschrift für anorganische und allgemeine Chemie: ZAAC - Weinheim: Wiley-VCH, 2017; <http://dx.doi.org/10.1002/zaac.201700188>

**Rausch, Janek; Liebing, Phil; Lorenz, Volker; Hilfert, Liane; Busse, Sabine; Maichle-Mössmer, Caecilia; Edelmann, Frank T.**

Scandium-mediated formation of a bis(tetrahydropentalene)

In: Angewandte Chemie / International edition: a journal of the Gesellschaft Deutscher Chemiker - Weinheim: Wiley-VCH, 2017; <http://dx.doi.org/10.1002/anie.201703362>

**Schelm, Katja; Schwidder, Michael; Samuel, Janis; Scheffler, Franziska; Scheffler, Michael**

Tailored surface properties of ceramic foams for liquid multiphase reactions

In: Advanced engineering materials - Weinheim: Wiley-VCH Verl, 2017; <http://dx.doi.org/10.1002/adem.201700418>

[Imp.fact.: 2,319]

**Suta, Markus; Kühling, Marcel; Liebing, Phil; Edelmann, Frank T.; Wickleder, Claudia**

Photoluminescence properties of the bent sandwich-like compounds  $[\text{Eu}(\text{Tp}^i\text{Pr}_2)_2]$  and  $[\text{Yb}(\text{Tp}^i\text{Pr}_2)_2]$  - Intermediates between nitride-based phosphors and metallocenes

In: Journal of luminescence - New York, NY [u.a.]: Elsevier, Bd. 187.2017, S. 62-68

[Imp.fact.: 2,541]

**Zaeni, Ahmad; Behrens, Ulrich; Liebing, Phil; Olbrich, Falk; Edelmann, Frank T.**

Preparative and structural investigation of crown ether adducts of potassium fluorenides

In: Journal of organometallic chemistry - New York, NY [u.a.]: Elsevier, Bd. 830.2017, S. 141-145

[Imp.fact.: 2,336]

### **Begutachtete Buchbeiträge**

**Betke, Ulf; Lieb, Alexander; Rannabauer, Stefan; Scheffler, Franziska; Scheffler, Michael**

Ein nachhaltiger Baustein im Fundament unseres Energiehaus(halt)es - Wärmespeicherung und Wärmetransformation

In: 16. Sommerkurs Werkstoffe und Fügen: Magdeburg, 08. und 09. September 2017 - Magdeburg:

Universitätsbibliothek, S. 31-38

**Betke, Ulf; Lieb, Alexandra; Rannabauer, Stefan; Scheffler, Franziska; Scheffler, Michael**

Hochleistungskeramiken für nachhaltige Wärmespeicherung und Kälteerzeugung

In: Hochleistungskeramik 2017 - Lampertheim: ALPHA Informationsgesellschaft mbH, S. 22-27

**Schelm, Katja; Dammler, Kathleen; Chen, X.; Betke, Ulf; Rannabauer, Stefan; Scheffler, Michael**

Keramische Schäume - Herstellung und Funktionalisierung

In: 16. Sommerkurs Werkstoffe und Fügen: Magdeburg, 08. und 09. September 2017 - Magdeburg: Universitätsbibliothek, S. 207-216

**Vogt, Jochen**

Small molecule physisorption on bulk insulators - the system CO<sub>2</sub>/KCl(100)

In: Reference module in chemistry, molecular sciences and chemical engineering - [Place of publication not identified]: Elsevier, 2017; <http://dx.doi.org/10.1016/b978-0-12-409547-2.14146-0>

**Lehrbücher**

**Vogt, Jochen**

Exam Survival Guide: Physical Chemistry. - Cham s.l. Springer International Publishing Imprint: Springer 2017, 1 Online-Ressource (XIII, 382 p. 137 illus., 133 illus. in color); <http://dx.doi.org/10.1007/978-3-319-49810-2>, ISBN 978-3-319-49810-2

**Dissertationen**

**Mader-Arndt, Katja; Scheffler, Franziska [GutachterIn]; Altenbach, Holm [GutachterIn]**

Modellierung des Kontaktverhaltens feiner adhäsiver Partikel. - Barleben, docupoint Verlag, 2017, XI, 171 Seiten, Illustrationen, Diagramme, 21 cm - (Docupoint Wissenschaft; Micro-macro transactions; Volume 26), ISBN 978-3-86912-126-0

**Todorova, Zinaida Ivanova; Scheffler, Franziska [GutachterIn]; Krüger, Manja [GutachterIn]**

Einfluss der Oberflächenmodifizierung auf die Fließeigenschaften von kohäsiven Schüttgütern. - Barleben, docupoint Verlag, 2017, X, 136 Seiten, Illustrationen, Diagramme - (Docupoint Wissenschaft; Micro-macro transactions; Volume 29), ISBN 978-3-86912-137-6;

[Literaturverzeichnis: Seite 127-132]