



OTTO VON GUERICKE  
UNIVERSITÄT  
MAGDEBURG

VST

FAKULTÄT FÜR VERFAHRENS-  
UND SYSTEMTECHNIK

# Forschungsbericht 2018

Fakultät für Verfahrens- und Systemtechnik

# 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 Bioprozessen, 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

**Aydin, Erdal; Sundmacher, Kai [GutachterIn]; Sager, Sebastian [GutachterIn]**

Tailored indirect algorithms for efficient on-line optimization of batch and semi-batch processes  
Magdeburg, 2018, xx, 119 Seiten, Tabellen, Diagramme;  
[Literaturverzeichnis: Seite 107-113]

**Birth, Torsten; Seidel-Morgenstern, Andreas [GutachterIn]; Hamel, Christof [GutachterIn]; Caro, Jürgen [GutachterIn]**

Aufbereitung biogener und reststoffbasierter Gase - Untersuchung der trockenen Reformierung  
Barleben: docupoint Verlag, 2018, IV, 223 Seiten, Diagramme, Illustrationen, 21 cm, 978-3-86912-142-6;  
[Literaturverzeichnis: Seite 173-186]

**Buchholz, Hannes; Seidel-Morgenstern, Andreas [GutachterIn]**

Solid-liquid phase equilibria of chiral molecules - theory and experiment  
Magdeburg, 2018, xi, 171 Seiten, Diagramme, 30 cm;  
[Literaturverzeichnis: Seite 136-152]

**Buchtatj, Denis; Thévenin, Dominique [GutachterIn]; Hadler, Jens [GutachterIn]; Tschöke, Helmut [GutachterIn]**

CFD-basierte Analyse der Gemischbildung mit einem skalenauflösenden Turbulenzmodell  
Magdeburg, 2017, XVI, 140 Seiten, Illustrationen, Diagramme;  
[Literaturverzeichnis: Seite 126-133]

**Dülsen, Steffen; Krause, Ulrich [GutachterIn]**

Development of a combined experimental and simulative method for the assessment of fire scenarios in motor vehicles  
Magdeburg, 2018, XXIV, 83 Seiten, Illustrationen, Tabellen, Diagramme, 30 cm;  
[Literaturverzeichnis: Seite XI-XV]

**Eisenschmidt, Holger; Sundmacher, Kai [GutachterIn]**

A cyclic growth-dissolution process for the controlled manipulation of crystal shape distributions  
Magdeburg, 2018, x, 119 Seiten, Illustrationen, Diagramme, 30 cm;  
[Literaturverzeichnis: Seite 104-114]

**Farid, Muhammad Usman; Tsotsas, Evangelos [GutachterIn]; Bück, Andreas [GutachterIn]**

CFD modeling of combustion of solid waste materials with low melting points  
Magdeburg, 2018, xii, 204 Blätter, Illustrationen, Diagramme, 30 cm;  
[Literaturverzeichnis: Blatt 163-173]

**Harder, Björn-Johannes**

Modellbasiertes Metabolic Engineering zur Optimierung der Itaconatproduktion in Escherichia coli  
Aachen: Shaker Verlag, 2018, [1. Auflage], IX, 130 Seiten, Illustrationen, 21 cm, 203 g - (Forschungsberichte aus dem Max-Planck-Institut für Dynamik Komplexer Technischer Systeme; Band 52), ISBN 978-3-8440-6360-8

**Jörke, Andreas**

Mechanisms and kinetics of petro- and oleochemicals in complex hydroformylation reaction networks  
Aachen: Shaker Verlag, 2018, [1. Auflage], xi, 145 Seiten, Seite xiii-xxxvii, 41 Illustrationen, Diagramme, 21 cm, 262 g - (Forschungsberichte aus dem Max-Planck-Institut für Dynamik Komplexer Technischer Systeme; Band 50), ISBN 978-3-8440-6059-1

**Khalid, Muhammad Kamran; Wachem, Berend [GutachterIn]; Scheffler, Franziska [GutachterIn]**

Processing and characterization of tailor-made superparamagnetic iron oxide nanoparticles (SPIO-NPs) for pharmaceutical applications  
Magdeburg, 2018, xx, 158 Seiten, Illustrationen, Tabellen, Diagramme;  
[Literaturverzeichnis: Seite 131-153]

**Kiedorf, Gregor; Seidel-Morgenstern, Andreas [GutachterIn]**

Mechanistic and kinetic analysis of homogeneously and heterogeneously catalyzed reactions

Aachen: Shaker, 2018, 1. Auflage, xi, 189 Seiten, Illustrationen, Diagramme, 21 cm, 302 g - (Forschungsberichte aus dem Max-Planck-Institut für Dynamik komplexer technischer Systeme; Band 49), ISBN 978-3-8440-5768-3; [Literaturverzeichnis: Seite 147-161]

**Ludwig, Kristin; Sundmacher, Kai [AkademischeR BetreuerIn]**

Assessment of innovative downstream processing methods for microalgal  $\beta$ -carotene production

Magdeburg, 2018, xviii, 126 Seiten, Illustrationen, Diagramme, 30 cm; [Literaturverzeichnis: Seite 109-125]

**Meyer, Lennart; Specht, Eckehard [AkademischeR BetreuerIn]; Krause, Ulrich [GutachterIn]; Beyer, Michael [GutachterIn]; Grätz, Rainer [GutachterIn]**

Die Entstehung von heißen Oberflächen in metallischen Reibsituationen und ihre Zündwirksamkeit

Bremen: Fachverlag NW in der Carl Schünemann Verlag GmbH, 2018, VII, 131 Seiten, Illustrationen, Diagramme, 30 cm - (PTB-Bericht; Ex, Explosionsschutz; 9), ISBN 978-3-95606-402-9

**Mikalsen, Ragni Fjellgaard; Krause, Ulrich [GutachterIn]**

Fighting flameless fires - initiating and extinguishing self-sustained smoldering fires in wood pellets

Magdeburg, 2018, XI, 85, iii Seiten, Illustrationen, 29 cm; [Literaturverzeichnis: Seite 76-85]

**Radicke, Susann; Scheffler, Franziska [GutachterIn]; Seidel-Morgenstern, Andreas [GutachterIn]**

Entwicklung und Testung modifizierter photokatalytisch aktiver TiO<sub>2</sub>-Beschichtungen für Glasformkörper

Magdeburg, 2018, XXV, 198 Seiten, Illustrationen, Tabellen, Diagramme, 30 cm; [Im Titel ist "2" tiefgestellt; Literaturverzeichnis: Seite 169-179]

**Reichardt, Thomas**

Multiscale Euler/Lagrange approach to simulate finite-sized solid particles and bubbles as well as numerical and experimental studies to improve the modeling of complex bubble motion

Aachen: Shaker Verlag, 2018, 1. Auflage, viii, 284 Seiten, Illustrationen, Diagramme, 21 cm, 447 g - (Berichte aus der Strömungstechnik), ISBN 978-3-8440-6013-3

**Schmidt, Martin; Tsotsas, Evangelos [GutachterIn]; Kienle, Achim [GutachterIn]**

Process dynamics and structure formation in continuous spray fluidized bed processes

Magdeburg, 2018, XVII, 150 Seiten, Illustrationen, Diagramme, 24 cm; [Literaturverzeichnis: Seite 129-137]

**Schubert, Stefanie; Krause, Ulrich [GutachterIn]**

Untersuchung zum Einfluss der Strömungsführung auf den Brandverlauf in einem Gebäude moderner Bauweise

Magdeburg, 2017, XXII, 182 Seiten, Illustrationen; [Literaturverzeichnis: Seite 142-153]

**Schulze, Peter**

Lignin separation from ethanol water pulping liquors

Magdeburg, 2018, 179 Seiten, Illustrationen, Tabellen, Diagramme; [Literaturverzeichnis: Seite 155-163]

**Schwenke, Christian; Tsotsas, Evangelos [AkademischeR BetreuerIn]; Schulze, Dietmar [AkademischeR BetreuerIn]; Katterfeld, André [AkademischeR BetreuerIn]**

Modellierung und experimentelle Validierung des Schwerkraftaustrags ultrafeiner kohäsiver Pulver

Barleben: docupoint Verlag, 2018, IX, 215 Seiten, Seite X-XX, Illustrationen, Diagramme, 21 cm, ISBN 978-3-86912-153-6;

[Literaturverzeichnis: Seite 211-215]

**Voigt, Nadine; Wachem, Berend [GutachterIn]; Sabel, Bernhard A. [GutachterIn]**

Evaluierung pharmakokinetischer und toxikologischer Determinanten von Nanopartikeln mittels in vivo Neuroimaging

Magdeburg, 2018, XIV, 111 Blätter, Illustrationen, Diagramme, 30 cm; [Literaturverzeichnis: Blatt 87-96]

**Wenzel, Marcus; Sundmacher, Kai [GutachterIn]**

Reverse water-gas shift chemical looping for syngas production from CO<sub>2</sub>

Magdeburg, 2018, xviii, 149 Seiten, 30 cm;

[Im Titel ist "2" tiefgestellt; Literaturverzeichnis: Seite 129-141]

**Zhang, Xiwei; Wachem, Berend [GutachterIn]; Sabel, Bernhard A. [GutachterIn]**

In vitro and in vivo caspase-3 knock down by poly (butyl cyanoacrylate) nanoparticle-based RNA interference

Magdeburg, 2018, ix, 95 Blätter, Illustrationen, Diagramme, 30 cm;

[Literaturverzeichnis: Blatt 78-88]

# INSTITUT FÜR APPARATE- UND UMWELTTECHNIK

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. HOCHSCHULLEHRER/INNEN

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. METHODIK

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:** M.Sc. Stefanie Schubert, M.Sc., Dr.-Ing. Heike Krause  
**Kooperationen:** Berliner Feuerwehr; Vereinigung zur Förderung des deutschen Brandschutzes e.V.  
**Förderer:** Sonstige - 01.08.2015 - 31.07.2018

### **AERIUS - Alternatives Löschmittel Druckluftschäum - 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 Druckluftschäum 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 Druckluftschäum auf Großbrände, in der besseren Beherrschung komplexer Großschadenslagen durch die Feuerwehren mittels des Einsatzes von Druckluftschäumssystemen (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  
**Kooperationen:** TÜV Süd Industrie Service GmbH Leipzig; Technische Universität Dresden  
**Förderer:** Bund - 19.07.2013 - 31.12.2020

### **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:** Sarah Hahn  
**Kooperationen:** Siemens AG; BAM Bundesanstalt für Materialforschung und -prüfung; ZVEI - Zentralverband Elektrotechnik- und Elektronikindustrie e.V.; Vereinigung zur Förderung des deutschen Brandschutzes e.V.; Hekatron GmbH; Minimax GmbH & Co KG  
**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 - 28.10.2019

### **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 den 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:** Dr.-Ing. Andrea Klippel  
**Kooperationen:** BAM Bundesanstalt für Materialforschung und -prüfung; PTV Transport Consult GmbH; Werkstatt Lebenshilfe i. Berg. Land GmbH; Forschungszentrum Jülich GmbH; HS Niederrhein/ SO.CON-Institut  
**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:** Marco Trott  
**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.

## 8. VERÖFFENTLICHUNGEN

### BEGUTACHTETE ZEITSCHRIFTENAUFsätze

**Addai, Emmanuel Kwasi; Clouthier, Martin; Amyotte, Paul; Safdar, Muddasar; Krause, Ulrich**

Experimental investigation of limiting oxygen concentration of hybrid mixtures

Journal of loss prevention in the process industries - Amsterdam [u.a.]: Elsevier Science, Bd. 57.2018, S. 120-130;

[Imp.fact.: 1.982]

**Farnell, D. J. J.; Götze, O.; Schulenburg, Jörg; Zinke, Ronald; Bishop, R. F.; Li, P. H. Y.**

Interplay between lattice topology, frustration, and spin quantum number in quantum antiferromagnets on Archimedean lattices

Physical review - Woodbury, NY: Inst, Vol. 98.2018, 22, Art. 224402;

[Imp.fact.: 3.955]

**Hecht, Kristin J.; Krause, Ulrich; Hofinger, J.; Bey, O.; Nilles, M.; Renze, P.**

Prediction of gas density effects on bubbly flow hydrodynamics - new insights through an approach combining population balance models and computational fluid dynamics

AIChE journal - Hoboken, NJ: Wiley, 2018;

[Online first]

**Idakiev, Vesselin; Steinke, Claudia; Sondej, Franziska; Bück, Andreas; Tsotsas, Evangelos; Mörl, Lothar**

Inductive heating of fluidized beds - spray coating process

Powder technology: an international journal on the science and technology of wet and dry particulate systems - Amsterdam [u.a.]: Elsevier Science, Bd. 328.2018, S. 26-37;

**Mikalsen, Ragni Fjellgaard; Hagen, Bjarne Christian; Steen-Hansen, Anne; Krause, Ulrich; Frette, Vidar**

Extinguishing smoldering fires in wood pellets with water cooling - an experimental study

Fire technology - New York, NY [u.a.]: Springer Science + Business Media B.V, insges. 28 S., 2018;

[Online first]

[Imp.fact.: 1.483]

**Mörl, Lothar; Idakiev, Vesselin; Schönherr, Michael; Jacob, Michael**

Vereinfachtes Modell zur Abschätzung der Arbeitsweise einer Wirbelschicht mit Eigenkeimbildung bei Flüssigkeitseindüsung

Chemie - Ingenieur - Technik: CIT - Weinheim: Wiley-VCH Verl, Bd. 90.2018, 8, S. 1080-1088;

**Zhang, Lanyue; Weigler, Fabian; Idakiev, Vesselin; Jiang, Zhaochen; Mörl, Lothar; Mellmann, Jochen; Tsotsas, Evangelos**

Experimental study of the particle motion in flighted rotating drums by means of Magnetic Particle Tracking

Powder technology: an international journal on the science and technology of wet and dry particulate systems - Amsterdam [u.a.]: Elsevier Science, Bd. 339.2018, S. 817-826;

**Zinke, Ronald; Köhler, Florian; Krause, Ulrich**

Long-term emission measurements at a floating roof tank for gasoline storage

Journal of loss prevention in the process industries - Amsterdam [u.a.]: Elsevier Science, Bd. 55.2018, S. 152-161;

## NICHT BEGUTACHTETE ZEITSCHRIFTENAUFsätze

**Fischer, Thomas; Gabel, Dieter; Marx, Marcus**

Messung des Explosionsdrucks brennbarer Stäube

Technische Sicherheit - Düsseldorf: Springer-VDI-Verl, Vol. 8.2018, Januar/Februar, S. 31-37

## BEGUTACHTETE BUCHBEITRäge

**Zhang, Lanye; Weigler, Fabian; Jiang, Zaochen; Idakiev, Vesselin; Mörl, Lothar; Mellmann, Jochen; Tsotsas, Evangelos**

Investigation of 3D particle flow in a flighted rotating drum

IDS 2018: 21st International Drying Symposium : proceedings ; September, 2018, València, Spain - València, Spain: Universitat, S. 253-260;

[Konferenz: IDS 2018]

## NICHT BEGUTACHTETE BUCHBEITRäge

**Gabel, Dieter**

Recent fields of interest in experimental explosions research

First Explosion Protection Conference 2018 in Turkey and Middle East: 06th of September, 2018, in the Amara Sealight Elite Hotel in Kusadasi/AYDIN - Kusadasi/AYDIN: Ex Proof TEKNO Turkey Ltd., insges. 22 S.;

[Konferenz: First Explosion Protection Conference 2018 in Turkey and Middle East, Kusadasi/AYDIN, 6. September 2018]

**Gabel, Dieter**

Uncertainty in the determination of the ignition energy of dusts below 10mJ

2018 AIChE Spring Meeting and 14th Global Congress on Process Safety: Orlando, Florida, USA, 22-25 April 2018 - Orlando, Florida, USA, insges. 6 S.;

[Kongress: 2018 AIChE Spring Meeting and 14th Global Congress on Process Safety, Orlando, Florida, USA, 22-25 April 2018\$]

**Gabel, Dieter; Krause, Ulrich**

Ignition temperature and ignition energy of humid dusts

12th International Symposium of Hazards, Prevention, and Mitigation of Industrial Explosions: Kansas City, USA : August 12-17,2018 - Kansas City, USA, insges. 13 S.;

[Symposium: 12th International Symposium of Hazards, Prevention, and Mitigation of Industrial Explosions, ISHPMIE, Kansas City, USA, August 12-17,2018]

## DISSERTATIONEN

**Dülsen, Steffen; Krause, Ulrich [GutachterIn]**

Development of a combined experimental and simulative method for the assessment of fire scenarios in motor vehicles

Magdeburg, 2018, XXIV, 83 Seiten, Illustrationen, Tabellen, Diagramme, 30 cm;

[Literaturverzeichnis: Seite XI-XV]

**Mikalsen, Ragni Fjellgaard; Krause, Ulrich [GutachterIn]**

Fighting flameless fires - initiating and extinguishing self-sustained smoldering fires in wood pellets

Magdeburg, 2018, XI, 85, iii Seiten, Illustrationen, 29 cm;

[Literaturverzeichnis: Seite 76-85]

**Schubert, Stefanie; Krause, Ulrich [GutachterIn]**

Untersuchung zum Einfluss der Strömungsführung auf den Brandverlauf in einem Gebäude moderner Bauweise

Magdeburg, 2017, XXII, 182 Seiten, Illustrationen;

[Literaturverzeichnis: Seite 142-153]

# INSTITUT FÜR CHEMIE

Universitätsplatz 2, 39106 Magdeburg  
Tel. 49 (0)391 67 58672, Fax 49 (0)391 67 42223  
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. HOCHSCHULLEHRER/INNEN

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 geträgerter 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  
Katalysatortestung

## **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. Frank Edelmann  
**Projektbearbeitung:** Dr. Volker Lorenz  
**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 ( $C_6H_{11}Si_8O_{12}(OH)_3$ ) (3) und ( $C_6H_{11}Si_8O_{12}(OLi)_4$ ) (4) eine zentrale Rolle. Mit ihrer Hilfe sollen neuartige, zwei- und dreidimensionale komplexe Moleküle wie z.B. Silsesquioxan-substituierte anorganische Ringe, Käfige und Dendrimere sowie Polymermaterialien aufgebaut werden. Durch Plasmabehandlung sollen Metallasilsesquioxane in neuartige poröse Materialien mit interessanten Adsorptions- und Katalysatoreigenschaften umgewandelt werden. Silsesquioxane und Metallasilsesquioxane sind technisch in vielerlei Hinsicht bedeutsam. Silsesquioxane (auch als POSS bezeichnet) dienen als Additive für neuartige Hochleistungspolymere ("nanostructured polymers"), die u.a. als hitzebeständige Polymere in der Raumfahrttechnik eingesetzt werden können. Weiterhin haben Silsesquioxane interessante Flamm-schutz-eigenschaften. 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 Edelmann  
**Projektbearbeitung:** Dr. Volker Lorenz, Janek Rausch  
**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 Lanthanoid-elemente sowie der ersten Halbsandwich-Komplexe mit formal vierwertigem Cer.

---



**Projektleitung:** Prof. Dr. Frank Edelmann  
**Förderer:** Haushalt - 01.11.2016 - 30.03.2018

### Supramolekulare Komplexverbindungen mit Azolypropanamid-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:** Prof. Dr. Frank Edelmann  
**Projektbearbeitung:** Prof. Dr. Frank T. Edelmann, Nicole Harmgarth  
**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)Ce(III)-Verbindungen mit innovativen Oxidationsmitteln stehen dabei ebenso im Fokus wie Organocer(IV)-Organocer(IV)-Transformationen. Wichtige Zielverbindungen bilden neben Ce(IV)-Amidinen und Ce(IV)-(Silyl)amiden auch neuartige Organocer(IV)-Komplexe mit Cyclopentadienyl- und Cyclooctatetraenyl-Liganden. Die [FE1] 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 Ce-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 Ce(III)-Vorstufen)
  - (ii) Synthese von Ce(IV)-Amidinen mittels  $PhICl_2$ ,  $C_2Cl_6$  und 1,4-Benzochinon
  - (iii) Synthese von Ce(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)-Syntheseprotokolle
  - (vi) Metallorganische Ce(IV)-Oberflächenspezies:  $SOCe(IV)C$
  - (vii) Mechanistische Untersuchungen zur Ce-Redoxchemie mit carbonylischen Substraten
  - (viii) Organocer(IV)-Katalyse
-

**Projektleitung:** Prof. Dr. Franziska Scheffler  
**Förderer:** EU - ESF Sachsen-Anhalt - 01.01.2018 - 31.12.2021

### **MEMoRIAL-M2.9 — Preparation and testing of phase change materials for thermal storage**

Latent heat storage can be achieved by the phase transition of a large number of different materials (PCMs). Depending on the desired temperature range organic substances, salt hydrates, salts, or even metals can be utilised within this context. For the purpose of technical application, the PCM has to be embedded in a higher melting containment. The objective of this sub-project is to develop new processing routes in order to produce mechanically stable PCM beads covered with a polymer-derived ceramic layer. The project will encompass the coating of different types of PCMs, a detailed characterisation and testing, as well as the investigation of the "structure-properties" correlation. A special focus will be directed towards the mechanical stability of the composite material during temperature cycling.

---

**Projektleitung:** Prof. Dr. Franziska Scheffler  
**Projektbearbeitung:** Christian Künzel  
**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 Elektroneneinfluss (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:** Dr. Alexandra Lieb  
**Projektbearbeitung:** Dr. Ulf Betke  
**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 (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-Messstand 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 molekulardynamischen 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. VERÖFFENTLICHUNGEN

### BEGUTACHTETE ZEITSCHRIFTENAUFsätze

**Becker, Julia; Betke, Ulf; Wessel, Egbert; Krüger, Manja**

Alloying effects in Mo-5X (X=Zr, Ti,V) Microstructural modifications and mechanical properties  
Materials today / Communications - Amsterdam [u.a.]: Elsevier, Bd. 15.2018, S. 314-321

**Betke, Ulf; Klaus, Michael; Eggebrecht, Jakob G.; Scheffler, Michael; Lieb, Alexandra**

MOFs meet macropores - dynamic direct crystallization of the microporous aluminum isophthalate CAU-10 on reticulated open-cellular alumina foams  
Microporous and mesoporous materials : the official journal of the International Zeolite Association - Amsterdam [u.a.]: Elsevier, Bd. 265.2018, S. 43-56  
[Imp.fact.: 3.615]

**Betke, Ulf; Lieb, Alexandra**

Micro-macroporous composite materials - preparation techniques and selected applications - a review  
Advanced engineering materials - Weinheim : Wiley-VCH Verl, Vol. 20.2018, 9, Art. 1800252  
[Imp.fact.: 2.319]

**Danzmann, Sascha; Liebing, Phil; Engelhardt, Felix; Hilfert, Liane; Edelmann, Frank**

Azulene1carboxylate - a new azulene-based building block for coordination polymers  
Inorganic chemistry communications : an international journal dedicated to rapid publications in inorganic and organometallic chemistry - Amsterdam [u.a.]: Elsevier Science, Bd. 99.2018, S. 176-179  
[Imp.fact.: 1.81]

**Edelmann, Frank T.**

Lanthanides and actinides - annual survey of their organometallic chemistry covering the year 2017  
Coordination chemistry reviews - Amsterdam [u.a.]: Elsevier Science, Bd. 370.2018, S. 129-223  
[Imp.fact.: 13.324]

**Haak, Edgar**

Modern annulation strategies for the synthesis of cyclo[b]fused indoles  
Synlett : accounts and rapid communications in synthetic organic chemistry - Stuttgart [u.a.]: Thieme, 2018  
[Imp.fact.: 2.369]

**Haak, Edgar; Kaufmann, Julia; Jäckel, Elisabeth**

Ruthenium catalyzed cascade annulation of indole with propargyl alcohols  
Angewandte Chemie / International edition : a journal of the Gesellschaft Deutscher Chemiker - Weinheim : Wiley-VCH, insges. 7 S., 2018  
[Imp.fact.: 11.994]

**Hampel, Nelli; Royeva, Evgeniya; Bück, Andreas; Tsotsas, Evangelos**

Coating of finely dispersed particles by two-fluid nozzle  
Particuology : science and technology of particles - Amsterdam : Elsevier, Bd. 38.2018, S. 80-93  
[Imp.fact.: 2.785]

**Heidenreich, Niclas; Lieb, Alexandra; Stock, Norbert; Reinsch, Helge**

Green synthesis of a new layered aluminium citraconate - crystal structures, intercalation behaviour towards H<sub>2</sub>O and in situ PXRD studies of its crystallisation  
Dalton transactions : a journal of inorganic chemistry, including bioinorganic, organometallic, and solid-state chemistry - London : Soc, Bd. 47.2018, 1, S. 215-223  
[Imp.fact.: 4.029]

**Kaufmann, Julia; Jäckel, Elisabeth; Haak, Edgar**

Rutheniumkatalysierte Kaskadenanellierung von Indol mit Propargylalkoholen  
Angewandte Chemie - Weinheim : Wiley-VCH, 2018 ;  
[Online first]  
[Imp.fact.: 11.994]

**Lorenz, Volker; Ehle, Sophie; Liebing, Phil; Engelhardt, Felix; Hashemi-Haeri, Haleh; Oehler, Florian; Hinderberger, Darius; Busse, Sabine; Urbaschok, Jens; Edelmann, Frank T.**

High-yield synthesis of a unique Mn(III) siloxide complex through KMnO<sub>4</sub> oxidation of a Mn(II) precursor  
Dalton transactions : a journal of inorganic chemistry, including bioinorganic, organometallic, and solid-state chemistry - London : Soc, Bd. 47.2018, 1, S. 62-66  
[Imp.fact.: 4.029]

**Lorenz, Volker; Liebing, Phil; Bathelier, Adrien; Engelhardt, Felix; Maron, Laurent; Hilfert, Liane; Busse, Sabine; Edelmann, Frank**

The Wanderlust of Me<sub>3</sub>Si groups in rare-earth triple-decker complexes - a combined experimental and computational study  
Chemical communications : ChemComm - Cambridge : Soc, Bd. 54.2018, 73, S. 10280-10283  
[Imp.fact.: 6.29]

**Rädisch, Tim; Harmgarth, Nicole; Liebing, Phil; Beltrán-Leiva, Maria J.; Páez-Hernández, Dayán; Arratia-Pérez, Ramiro; Engelhardt, Felix; Hilfert, Liane; Oehler, Florian; Busse, Sabine; Edelmann, Frank**

Three new types of transition metal carboranylaminidate complexes  
Dalton transactions : a journal of inorganic chemistry, including bioinorganic, organometallic, and solid-state chemistry - London : Soc, Bd. 47.2018, 19, S. 6666-6671  
[Imp.fact.: 4.029]

**Wang, Sida; Liebing, Phil; Engelhardt, Felix; Hilfert, Liane; Busse, Sabine; Edelmann, Frank**

Synthesis and structural characterization of four dichloridobis(cyclopropylalkynylamidine)metal complexes  
Acta crystallographica / E - Chester : International Union of Crystallography, Bd. 74.2018, S. 1658-1664

**ilinskas, Mindaugas; Kalkofen, Bodo; Balasubramanian, Ramasubramanian; Batmanov, Anatoliy; Burte, Edmund P.; Harmgarth, Nicole; Zörner, Florian; Edelmann, Frank T.; Garke, Bernd; Lisker, Marco**

Plasma-assisted atomic layer deposition of germanium antimony tellurium compounds  
Journal of vacuum science & technology / A : JVST : the official journal of the American Vacuum Society - New York, NY : Inst, Vol. 36.2018, Art. 021510, insgesamt 7 S.  
[Imp.fact.: 1.374]

## ARTIKEL IN ZEITSCHRIFT

**Haeri, Haleh H.; Duraisamy, Ramesh; Harmgarth, Nicole; Liebing, Phil; Lorenz, Volker; Hinderberger, Darius; Edelmann, Frank T.**

Electronic and geometric structures of paramagnetic diazadiene complexes of lithium and sodium  
ChemistryOpen: including thesis treasury - Weinheim: Wiley-VCH-Verl, Bd. 7.2018, 9, S. 701-708;  
[Imp.fact.: 2.801]

## DISSERTATIONEN

**Radicke, Susann; Scheffler, Franziska [GutachterIn]; Seidel-Morgenstern, Andreas [GutachterIn]**

Entwicklung und Testung modifizierter photokatalytisch aktiver TiO<sub>2</sub>-Beschichtungen für Glasformkörper  
Magdeburg, 2018, XXV, 198 Seiten, Illustrationen, Tabellen, Diagramme, 30 cm;  
[Im Titel ist "2" tiefgestellt; Literaturverzeichnis: Seite 169-179]

# 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. HOCHSCHULLEHRER/INNEN

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 Versuchsdrehrohröfen, Simulation des Kalkbrennens in Schachtöfen, Simulation von Prozessen in Drehrohröfen. Simulation des Sinterns von Keramik in Tunnelöfen.

- Berechnung von Flammen. Optimierung von Brennern und Luftzuführung für Ausbrand, Flammenlänge, Vermischung und Vergleichmäßigung.
- Simulation des Abkühlvorganges bei der Härtung von Metallen. Modellierung der Plastizität, Berechnung von Gefüge, Wärmespannungen und Verzug, Ermittlung einer Strategie zur verzugsfreien Abkühlung.

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

- Zweiphasenströmungen: experimentelle und numerische Untersuchung von partikel- und blasenbeladenen Strömungen, sowie von tropfenbeladenen Strömungen im Zweiphasenwindkanal (Anwendungen für Meteorologie, Automobilindustrie); Einsatz verschiedener optischer Messmethoden (LDV, PDA, PTV, PIV-LIF, Shadowgraphy).
- Strömungen mit chemischen Reaktionen: Charakterisierung des Mischungsverhaltens in Mischern mit chemischen Reaktionen; Untersuchung der Flammen/Wirbel- und der Flammen/Akustik-Wechselwirkung; Eigenschaften von turbulenten Flammen in Brenner- und Motorsystemen; 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. METHODIK

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  
**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 Verbrennungsdiagnostik**

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 Skodowska-Curie Zuwendungsvertrag Nr. 708068 gefördert.

---

**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  
**Kooperationen:** Fraunhofer IFF, Magdeburg; ABO Wind AG; 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 Sprayflammensynthese 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. 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:** 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 - 01.01.2016 - 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 Wärmeübergangskoeffizient 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 - 01.05.2017 - 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  
**Förderer:** BMWi/AIF - 01.05.2018 - 30.04.2020

### **Einfluss geometrischer Anordnungen aus Strahl- und Vollkegeldüsen auf die Intensivkühlung bewegter dicker Bleche**

Mit steigenden Anforderungen an die Materialien wachsen auch die Forderungen an eine ausgereifte Wärmebehandlungstechnologie bestehend aus Aufheizung und gezielter Kühltechnologie. Für die Auslegung

einer Kühlstrecke ist eine Vielzahl von Fragen zu lösen. Zunächst ist in Abhängigkeit vom Produkt zu entscheiden, welcher Düsentyp zum Einsatz kommen soll, d.h. Vollkegel-, Vollstrahl- oder Flachstrahldüse. Diese Entscheidung erfordert Grundkenntnisse über die einzelnen Düsentypen. Dann ist die Positionierung der Einzeldüsen im Kühlfeld festzulegen. Neben der Festlegung des Düsenabstandes, der fluchtenden oder nicht fluchtenden Düsenanordnung geht es um die Frage des einzustellenden Spritzwinkels und des Düsenabstandes zum Blech. Auch Betriebsparameter wie Düsendruck, Bandgeschwindigkeit und Grenzen der Kühlwassertemperatur gehören dazu. Die optimale Festlegung dieser Parameter ist im Wesentlichen vom zu kühlenden Material, den Qualitätsanforderungen an das Material und dessen geometrischer Größe wie z.B. der Dicke abhängig.

---

**Projektleitung:** Prof. Dr.-Ing. Dominique Thévenin  
**Projektbearbeitung:** Dr.-Ing. Amir Eshghinejadfard  
**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. Dominique Thévenin  
**Förderer:** Land (Sachsen-Anhalt) - 01.09.2015 - 31.12.2019

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

In diesem Projekt wird das eigene Computerprogramm DINO, 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  
**Kooperationen:** Prof. Matthias Kraume, FG Verfahrenstechnik, TU Berlin  
**Förderer:** Deutsche Forschungsgemeinschaft (DFG) - 01.01.2014 - 31.12.2021

### **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. 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:** M.Sc. Timo Oster  
**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:** M.Sc. Seyed Ali Hosseini  
**Förderer:** Deutsche Forschungsgemeinschaft (DFG) - 01.07.2014 - 30.09.2019

### **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  
**Förderer:** Industrie - 01.05.2016 - 30.04.2019

### **Simulationsbasierte Optimierung einer Kraftstoff einspritzdüse**

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 Kraftstoff einspritzung erzielt werden kann.

---

**Projektleitung:** Prof. Dr.-Ing. Dominique Thévenin  
**Projektbearbeitung:** M.Sc. Cheng Chi  
**Kooperationen:** Prof. Frank Beyrau, Lehrstuhl für Technische Thermodynamik; Prof. Dirk Bartel, IKAM; Prof. Hermann Rottengruber, Inst. für mobile Systeme  
**Förderer:** Land (Sachsen-Anhalt) - 01.09.2018 - 30.04.2020

### **Direkte numerische Simulation der Zündung in Gasmotoren**

Bei Gasmotoren ist die Zündfähigkeit der lokalen Gasmischung eine große Herausforderung. Im vorliegenden Projekt wird diese anhand Direkter Numerischer Simulation (DNS) mit detaillierten Reaktionsmechanismen untersucht.

---

**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) - 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 abgelenkten 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  
**Kooperationen:** Prof. Einar Kruijs, 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:** M.Sc. Olivier Cleynen, 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 Energieaustrags unter Berücksichtigung der Fischdurchgängigkeit voll ausgeschöpft wird. Da das zugrunde liegende physikalische Problem sehr komplex ist, ist es dabei unabdingbar, experimentelle Daten unter kontrollierten und reproduzierbaren Strömungsbedingungen zu erhalten, um damit die Simulationskette zu validieren. Eine eigens hierfür konzipierte Versuchsrinne wird zu diesem Zweck am Institut aufgebaut, womit die Umströmung entsprechender Modelle komplett charakterisiert wird. Mit Hilfe dieser Rinne wird auch eine autonome Sonde zur Ermittlung der relevanten Strömungseigenschaften getestet.

---

**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:** Dr.-Ing. Philipp Berg  
**Förderer:** Deutsche Forschungsgemeinschaft (DFG) - 01.07.2018 - 30.06.2021

### **GEPARD - Gefäßwandsimulation und -visualisierung zur Patientenindividualisierten Blutflussvorhersage für die intrakranielle Aneurysmawachstum**

Intrakranielle Aneurysmen (IAs) können im Fall einer Ruptur zu schweren Behinderungen oder einem schnellen Tode führen. Folglich werden computergestützte Verfahren eingesetzt, um zum einen das individuelle Rupturrisiko vorherzusagen und zum anderen die patientenspezifische Therapieplanung des behandelnden Arztes zu unterstützen. Da zum aktuellen Zeitpunkt in der Regel jedoch ausschließlich das individuelle Lumen von IAs betrachtet wird, die Ruptur aber häufig maßgeblich von Entzündungsprozessen in der Gefäßwand abhängt, ist es notwendig, existierende simulations- und computergestützte Auswertungsansätze zu erweitern. Im Rahmen dieses Forschungsvorhabens erfolgt die schrittweise Integration von Gefäßwand- und Umgebungsinformationen, sodass klinisch relevante Rückschlüsse in Bezug auf dieses komplexe Krankheitsbild gelingen.

Hierzu zählen 1) die Erweiterung des Strömungsgebiets um die patientenspezifische Gefäßwanddicke, 2) die Berücksichtigung einzelner Gefäßwandschichten bzw. sich in der Wand befindenden Strukturen (Plaques, etc.) und 3) die Integration der Gefäßwandumgebung, die das Aneurysmawachstum maßgeblich beeinflusst. Die Umsetzung der genannten Teilziele führt zur übergeordneten Zielstellung, behandelnde Ärzte bei ihrer patientenindividuellen Therapieplanung zu unterstützen. Das resultierende System ermöglicht eine realistische und verlässliche Blutflussvorhersage mit speziell dafür entwickelten Visualisierungstechniken, welches dem medizinischen Benutzer die im Antrag beschriebenen, neuen, zusätzlichen Informationen zur Verfügung stellt und somit die Bewertung intrakranieller Aneurysmen entscheidend verbessert.

---



**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. 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:** PD Dr. Gábor Janiga  
**Projektbearbeitung:** M.Sc. Franziska Schulz  
**Förderer:** EU - ESF Sachsen-Anhalt - 01.12.2017 - 30.11.2021

### **MEMoRIAL-M1.8 — Augmented 4D flow**

The phase-contrast magnetic resonance imaging (PC-MRI) method can provide dynamic, three-dimensional flow information in vivo, for instance revealing the blood flow velocity in subject-specific geometries. Although being limited with respect to spatial and temporal resolution, this non-invasive measurement technique may, however, not least point to essential (domain) boundary conditions for computational high-quality simulations. The application of PC-MRI methods combined with detailed computational simulations will not just exploit measured flow information at domain boundaries but also those throughout the volume. Moreover, this 'hybrid approach' is supposed to open up new possibilities for enhancing the quality of flow information. Within the context of this sub-project, computational methods allowing for enhancement of measured data ranging below the temporal and spatial experimental resolution limits will be developed.

---

**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 - 01.02.2018 - 01.06.2018

### **Örtlich aufgelöste Analyse der Zylinderbuchsenanbindung im Aluminiumguss und Ermittlung der Spaltgrößen unter Anwendung der infrarotthermografischen Gradientenmessmethode**

Ziel des Projektes ist die zerstörungsfreie Prüfung der Anbindung eines Leichtmetallgusses an eine gusseiserne Zylinderlaufbuchse. Hierbei kommt eine im Lehrstuhl für Technische Thermodynamik entwickelte transiente Gradientenmessmethode unter Anwendung einer Infrarotkamera zum Einsatz.

---

**Projektleitung:** Dr.-Ing. Jörg Sauerhering  
**Förderer:** Industrie - 15.08.2018 - 31.03.2020

### **Entwicklung neuer Technologien, Anlagenkomponenten und Logistik zu einer energieeffizienten Fertigung in Leichtmetallgießereien - ETAL**

Energetische Optimierung von Tiegeln für Leichtmetallschmelzen

Das Ziel des Projektes ist ein auf Gasbeheizung hin optimierter Tiegel für Leichtmetallschmelzen. Hierzu sind die in Frage kommenden Tiegelwerkstoffe detailliert thermophysikalisch zu untersuchen und es ist ein möglichst geeigneter Werkstoff zu identifizieren. Zudem ist der Wärmebedarf für die gasbetriebenen Warmhaltetiegel zu berechnen, worauf basierend die notwendige Gasmenge und das resultierende Warmluftvolumen in Abhängigkeit zur eingesetzten Brennertechnologie als Grundlage für die Festlegung der Größe des Brenners und der Flächen des Luftvorwärmers dienen.

Weiterhin ist im Rahmen des Projektes eine detaillierte 3D-FEM Strömungsberechnung im Luftraum des Warmhaltetiegels auf Grundlage der ermittelten Warmluftvolumenströme durchzuführen, mittels welcher die Luftverteilung und der Wärmeübergänge Warmluft/Tiegel abzuschätzen sind.

---

**Projektleitung:** Dr.-Ing. Katharina Zähringer  
**Projektbearbeitung:** M.Sc. Péter Kováts, M.Sc. Michael Mansour  
**Förderer:** Deutsche Forschungsgemeinschaft (DFG) - 01.01.2018 - 31.12.2021

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

Das Kernziel des Teilprojekts B1 des SFB/TR63 in der dritten Förderperiode ist es, die in den ersten beiden Förderperioden entwickelte Reaktor-Entwurfsmethodik so zu verallgemeinern, dass sie für komplexe Reaktionsnetzwerke, mehrstufige Reaktionsfolgen, verschiedene Phasenkombinationen (Gas/flüssig, Flüssig/flüssig, Gas/flüssig/ flüssig) und unterschiedliche Phasensysteme (TMS, MLS) einsetzbar ist. Bei der optimalen Steuerung des Reaktionsfortschritts soll das spontane Auftreten zusätzlicher flüssiger Phasen in der Entwurfsmethodik berücksichtigt werden. Die Stoffmengenströme von auszuschleusen-den Produkten sollen als neue Steuervariablen herangezogen werden. Auf diese Weise soll der Entwurf von integrierten Reaktor-Separator-Systemen ermöglicht und die Verbindung mit der Synthese des Gesamtproduktionsprozesses in D1 hergestellt werden. Dort wird die erweiterte Entwurfsmethodik dazu genutzt, innovative Reaktorsysteme für die reduktive Aminierung von 1-Undecanal in TMS und MLS zu entwerfen. Weiterhin strebt das vorliegende Teilprojekt die Realisierung optimaler Reaktorsysteme in Form von innovativen Apparatemodulen an, welche mit experimentellen und numerischen Methoden detailliert charakterisiert werden. Dabei sollen Module mit unterschiedlichen Betriebsmodi (zyklischer Semibatch-Betrieb; stationärer Betrieb) und Mischungsverhalten (gerührte Reaktoren, Strömungsreaktoren) untersucht werden. Ausgewählte Reaktormodule werden gemeinsam mit D2 und D3 in die Miniplants integriert und dort unter Schließung aller wichtigen Stoffkreisläufe experimentell bewertet. Am Ende

der 3. Förderperiode soll in B1 eine modellgestützte, validierte Entwurfsmethodik etabliert sein, mit der sich auf Basis thermodynamischer und kinetischer Informationen optimale Reaktor-Separator-Systeme für flüssige Mehrphasensysteme zuverlässig entwerfen lassen.

## 8. VERÖFFENTLICHUNGEN

### BEGUTACHTETE ZEITSCHRIFTENAUFsätze

**Abdelsamie, Abouelmagd; Thévenin, Dominique**

On the behavior of spray combustion in a turbulent spatially-evolving jet investigated by direct numerical simulation

Proceedings of the Combustion Institute - Amsterdam [u.a.]: Elsevier, 2018;

[Online first]

[Imp.fact.: 1.133]

**Abram, Christopher; Fond, Benoit; Beyrau, Frank**

Temperature measurement techniques for gas and liquid flows using thermographic phosphor tracer particles

Progress in energy and combustion science: an international review journal - Amsterdam [u.a.]: Elsevier Science, Bd. 64.2018, S. 93-156;

[Imp.fact.: 17.382]

**Abram, Christopher; Mezhericher, Maksim; Beyrau, Frank; Stone, Howard A.; Ju, Yiguang**

Flame synthesis of nanophosphors using sub-micron aerosols

Proceedings of the Combustion Institute - Amsterdam [u.a.]: Elsevier, 2018;

[Imp.fact.: 5.336]

**Al-Hasnawi, Adnan Ghareb Tuaamah; Refaey, H. A.; Redemann, Tino; Attalla, Mohamed Attia Mahmoud; Specht, Eckehard**

Computational fluid dynamics simulation of flow mixing in tunnel kilns by air side injection

Journal of thermal science and engineering applications - New York, NY: ASME, Vol. 10.2018, 3, Art. 031007, insgesamt 9 S.;

[Imp.fact.: 0.985]

**Alkhalaf, Ali; Refaey, H. A.; Al-durobi, Nabeh; Specht, Eckehard**

Influence of contact point treatment on the cross flow mixing in a simple cubic packed bed - CFD simulation and experimental validation

Granular matter - Berlin: Springer, Vol. 20.2018, 2, Art. 22, insgesamt 13 S.;

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

Explorative blood flow visualization using dynamic line filtering based on surface features

Computer graphics forum: the international journal of the Eurographics Association - Oxford: Wiley-Blackwell, Bd. 37.2018, 3, S. 183-194;

[Konferenz: 20th EG/VGTC Conference on Visualization, EuroVis 2018, Brno, Czech Republic 4-8 June 2018]

[Imp.fact.: 2.046]

**Berg, Philipp; Beuing, Oliver**

Multiple intracranial aneurysms - a direct hemodynamic comparison between ruptured and unruptured vessel malformations

International journal of computer assisted radiology and surgery: a journal for interdisciplinary research, development and applications of image guided diagnosis and therapy - Berlin: Springer, Bd. 13.2018, 1, S. 83-93;

[Imp.fact.: 1.961]

**Berg, Philipp; Saalfeld, Sylvia; Janiga, Gabor; Brina, Olivier; Cancelliere, Nicole M.; Machi, Paolo; Pereira, Vitor M.**

Virtual stenting of intracranial aneurysms - a pilot study for the prediction of treatment success based on hemodynamic simulations

The international journal of artificial organs - Thousand Oaks, Calif: Sage, 2018;

[Online first]

[Imp.fact.: 1.133]

**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

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]

**Berg, Philipp; Voß, Samuel; Saalfeld, Sylvia; Janiga, Gábor; Bergersen, Aslak W.; Valen-Sendstad, Kristian; Bruening, Jan; Goubergrits, Leonid; Spuler, Andreas; Cancelliere, Nicole M.; Steinman, David A.; Pereira, Vitor M.; Chiu, Tin Lok; Tsang, Anderson Chun On; Chung, Bong Jae; Cebra, Juan R.; Cito, Salvatore; Pallarès, Jordi; Copelli, Gabriele; Csippa, Benjamin; Paál, György; Fujimura, Soichiro; Takao, Hiroyuki; Hodis, Simona; Hille, Georg; Karmonik, Christof; Elias, Saba; Kellermann, Kerstin; Khan, Muhammad Owais; Marsden, Alison L.; Morales, Hernán G.; Piskin, Senol; Finol, Ender A.; Pravdivtseva, Mariya; Rajabzadeh-Oghaz, Hamidreza; Paliwal, Nikhil; Meng, Hui; Seshadhri, Santhosh; Howard, Matthew; Shojima, Masaaki; Sugiyama, Shin-ichiro; Niizuma, Kuniyasu; Sindeev, Sergey; Frolov, Sergey; Wagner, Thomas; Brawanski, Alexander; Qian, Yi; Wu, Yu-An; Carlson, Kent D.; Dragomir-Daescu, Dan; Beuing, Oliver**

Multiple Aneurysms AnaTomy CHallenge 2018 (MATCH) - phase I : segmentation

Cardiovascular engineering and technology: CVET - New York, NY: Springer, Bd. 9.2018, 4, S. 565-581;

[Online first]

[Imp.fact.: 1.451]

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

Direct numerical simulations of hotspot-induced ignition in homogeneous hydrogen-air pre-mixtures and ignition spot tracking

Flow, turbulence and combustion: an international journal published in association with ERCOFTAC - Dordrecht [u.a.]: Springer Science + Business Media B.V, Bd. 101.2018, 1, S. 103-121;

[Imp.fact.: 2.207]

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

DNS study of the optimal heat release rate marker in premixed methane flames

Proceedings of the Combustion Institute - Amsterdam [u.a.]: Elsevier, 2018;

[Online first]

[Imp.fact.: 5.336]

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

Characterization of the performance of a free-stream water wheel using computational fluid dynamics

Energy: the international journal - Amsterdam [u.a.]: Elsevier Science, Vol. 165.2018, Part B, S. 1392-1400;

[Imp.fact.: 4.968]

**Daróczy, László; Janiga, Gabor; Thévenin, Dominique**

Computational fluid dynamics based shape optimization of airfoil geometry for an H-rotor using a genetic algorithm

Engineering optimization - London: Taylor & Francis, Bd. 50.2018, 9, S. 1483-1499;

[Imp.fact.: 1.622]

**Dragomirov, Plamen; Mendieta, Aldo; Abram, Christopher; Fond, Benoit; Beyrau, Frank**

Planar measurements of spray-induced wall cooling using phosphor thermometry

Experiments in fluids: experimental methods and their applications to fluid flow : research journal - Berlin: Springer, Vol. 59.2018, 3, Art. 42, insgesamt 13 S.;

[Imp.fact.: 1.832]

**Eshghinejadfard, Amir; Zhao, Lihao; Thévenin, Dominique**

Lattice Boltzmann simulation of resolved oblate spheroids in wall turbulence

Journal of fluid mechanics - Cambridge [u.a.]: Cambridge Univ. Press, Bd. 849.2018, S. 510-540;

**Fernandes, Leonardo S.; Jessen Werneck de Almeida Martins, Fábio; Azevedo, Luis F. A.**

A technique for measuring ensemble-averaged, three-component liquid velocity fields in two-phase, gas-liquid, intermittent pipe flows

Experiments in fluids: experimental methods and their applications to fluid flow : research journal - Berlin: Springer, Vol. 59.2018, 10, Art. 147, insgesamt 18 S.;

**Fond, Benoît; Xiao, Cheng-Nian; TJoen, Christophe; Henkes, Ruud; Veenstra, Peter; Wachem, Berend; Beyrau, Frank**

Investigation of a highly underexpanded jet with real gas effects confined in a channel - flow field measurements

Experiments in fluids: experimental methods and their applications to fluid flow : research journal - Berlin: Springer, Vol. 59. 2018, 10, Art. 160, insgesamt 21 S.;

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

Free cooling of a granular gas of rodlike particles in microgravity

Physical review letters - College Park, Md: APS, Vol. 120.2018, 21, Art. 214301;

[Imp.fact.: 8.462]

**Herz, Fabian**

Prozessmodellierung von direkt befeuerten Drehrohröfen zur beurteilung der thermischen Belastung des Feuerfestmaterials

Keramische Zeitschrift - Wiesbaden: Springer Fachmedien GmbH, Bd. 70.2018, 1/2, S. 26-34;

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

Mass-conserving advection-diffusion Lattice Boltzmann model for multi-species reacting flows

Physica / A: euophysys journal - Amsterdam: North Holland Publ. Co, Bd. 499.2018, S. 40-57;

**Hütter, Sebastian; Hasemann, Georg; Al-Karawi, J.; Krüger, Manja; Halle, Thorsten**

Prediction of thermodynamic properties of Mo-Si-B alloys from first-principles calculations

Metallurgical and materials transactions / A - Boston: Springer, Bd. 49.2018, 12, S. 6075-6083;

[Imp.fact.: 1.887]

**Janiga, Gabor**

Quantitative assessment of 4D hemodynamics in cerebral aneurysms using proper orthogonal decomposition

Journal of biomechanics: affiliated with the American Society of Biomechanics, the European Society of Biomechanics, the International Society of Biomechanics, the Japanese Society for Clinical Biomechanics and Related Research and the Australian and New Zealand Society of Biomechanics - Amsterdam [u.a.]: Elsevier Science, 2018;

[Imp.fact.: 2.431]

**Jiang, Zhaochen; Hagemeyer, Thomas; Bück, Andreas; Tsotsas, Evangelos**

Color-PTV measurement and CFD-DEM simulation of the dynamics of poly-disperse particle systems in a pseudo-2D fluidized bed

Chemical engineering science - Amsterdam [u.a.]: Elsevier Science, Bd. 179.2018, S. 115-132;

**Jokiel, Michael; Kaiser, Nicolas Maximilian; Kováts, Péter; Mansour, Michael; Zähringer, Katharina; Nigam, Krishna Deo Prasad; Sundmacher, Kai**

Helically coiled segmented flow tubular reactor for the hydroformylation of long-chain olefins in a thermomorphic multiphase system

The chemical engineering journal - Amsterdam: Elsevier, 2018;

[Online first]

[Imp.fact.: 6.735]

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

Unloading characteristics of flights in a flighted rotary drum operated at optimum loading

Powder technology: an international journal on the science and technology of wet and dry particulate systems - Amsterdam [u.a.]: Elsevier Science, Bd. 333.2018, S. 347-352;

**Kováts, P.; Pohl, D.; Thévenin, Dominique; Zähringer, Katharina**

Optical determination of oxygen mass transfer in a helically-coiled pipe compared to a straight horizontal tube

Chemical engineering science - Amsterdam [u.a.]: Elsevier Science, Bd. 190.2018, S. 273-285;

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

Characterizing fluid dynamics in a bubble column aimed for the determination of reactive mass transfer  
Heat and mass transfer: research journal - Berlin: Springer, Bd. 54.2018, 2, S. 453-461;  
[Imp.fact.: 1.494]

**Mansour, Michael; Janiga, Gabor; Nigam, K. D. P.; Thévenin, Dominique; Zähringer, Katharina**

Numerical study of heat transfer and thermal homogenization in a helical reactor  
Chemical engineering science - Amsterdam [u.a.]: Elsevier Science, Bd. 177.2018, S. 369-379;

**Mansour, Michael; Khot, Prafull; Thévenin, Dominique; Nigam, Krishna D. P.; Zähringer, Katharina**

Optimal Reynolds number for liquid-liquid mixing in helical pipes  
Chemical engineering science - Amsterdam [u.a.]: Elsevier Science, 2018;  
[Online first]  
[Imp.fact.: 3.306]

**Mansour, Michael; Kováts, Péter; Wunderlich, Bernd; Thévenin, Dominique**

Experimental investigations of a two-phase gas/liquid flow in a diverging horizontal channel  
Experimental thermal and fluid science: international journal of experimental heat transfer, thermodynamics and fluid mechanics : ETF science - New York, NY: Elsevier, Bd. 93.2018, S. 210-217;

**Mansour, Michael; Wunderlich, Bernd; Thévenin, Dominique**

Effect of tip clearance gap and inducer on the transport of two-phase air-water flows by centrifugal pumps  
Experimental thermal and fluid science: international journal of experimental heat transfer, thermodynamics and fluid mechanics : ETF science - New York, NY: Elsevier, Bd. 99.2018, S. 487-509;

**Mendieta, Aldo; Dragomirov, Plamen; Schulz, Florian; Beyrau, Frank; Samenfink, Wolfgang; Schuenemann, Erik**

Laser-based measurements of surface cooling following fuel spray impingement  
SAE technical papers - Warrendale, Pa: Soc, 2018, Paper 2018-01-0273, insgesamt 9 S.;

**Meuschke, Monique; Gunther, Tobias; Berg, Philipp; Wickenhofer, Ralph; Preim, Bernhard; Lawonn, Kai**

Visual analysis of aneurysm data using statistical graphics  
IEEE transactions on visualization and computer graphics: TVCG - New York, NY: IEEE, 2018;  
[Online first]  
[Imp.fact.: 3.078]

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

Exploration of blood flow patterns in cerebral aneurysms during the cardiac cycle  
Computers & graphics - Amsterdam [u.a.]: Elsevier Science, Bd. 72.2018, S. 12-25;  
[Imp.fact.: 1.176]

**Nafsun, Aainaa Izyan Binti; Herz, Fabian; Liu, Xiaoyan**

Influence of material thermal properties and dispersity on thermal bed mixing in rotary drums  
Powder technology: an international journal on the science and technology of wet and dry particulate systems - Amsterdam [u.a.]: Elsevier Science, Bd. 331.2018, S. 121-128;

**Neuber, Gregor; Garcia, Carlos E.; Kronenburg, Andreas; Williams, Benjamin A. O.; Beyrau, Frank; Stein, Oliver T.; Cleary, Matthew J.**

Joint experimental and numerical study of silica particulate synthesis in a turbulent reacting jet  
Proceedings of the Combustion Institute - Amsterdam [u.a.]: Elsevier, 2018;  
[Online first]  
[Imp.fact.: 5.336]

**Oeltze-Jafra, Steffen; Meuschke, Monique; Neugebauer, M.; Saalfeld, Sylvia; Lawonn, K.; Janiga, Gábor; Hege, H.-C.; Zachow, S.; Preim, Bernhard**

Generation and visual exploration of medical flow data - survey, research trends and future challenges  
Computer graphics forum: the international journal of the Eurographics Association - Oxford: Wiley-Blackwell, 2018;  
[Online first]  
[Imp.fact.: 2.046]

**Oster, Timo; Abdelsamie, Abouelmagd; Motejat, Michael; Gerrits, Tim; Rössl, Christian; Thevenin, Dominique; Theisel, Holger**

Onthefly tracking of flame surfaces for the visual analysis of combustion processes

Computer graphics forum: the international journal of the Eurographics Association - Oxford: Wiley-Blackwell, Bd. 37.2018, 6, S. 358-369;

[Imp.fact.: 2.046]

**Otto, Hendrik; Kerst, Kristin; Roloff, Christoph; Janiga, Gabór; Katterfeld, André**

CFDDEM simulation and experimental investigation of the flow behavior of lunar regolith JSC-1A

Particuology - Amsterdam: Elsevier, insges. 10 S., 2018;

**Patil, Rohit; Daróczy, László; Janiga, Gabor; Thévenin, Dominique**

Large eddy simulation of an H-Darrieus rotor

Energy: the international journal - Amsterdam [u.a.]: Elsevier Science, Bd. 160.2018, S. 388-398;

**Penumakala, Pavan Kumar; Nallathambi, Ashok; Specht, Eckehard; Urlau, Ulrich; Hamilton, Doug; Dykes, Charlie**

Influence of process parameters on solidification length of twin-belt continuous casting

Applied thermal engineering: design, processes, equipment, economics - Amsterdam [u.a.]: Elsevier Science, Bd. 134.2018, S. 275-286;

[Imp.fact.: 3.356]

**Roloff, Christoph; Lukas, Eduard; Wachem, Berend; Thévenin, Dominique**

Particle dynamics investigation by means of shadow imaging inside an air separator

Chemical engineering science - Amsterdam [u.a.]: Elsevier Science, 2018;

[Online first]

[Imp.fact.: 3.306]

**Roloff, Christoph; Stucht, Daniel; Beuing, Oliver; Berg, Philipp**

Comparison of intracranial aneurysm flow quantification techniques - standard PIV vs stereoscopic PIV vs tomographic PIV vs phase-contrast MRI vs CFD

Journal of neuroInterventional surgery: JNIS : the journal of the Society of NeuroInterventional Surgery - London: BMJ Journals, 2018;

[Online first]

[Imp.fact.: 3.524]

**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

Computer graphics forum: the international journal of the Eurographics Association - Oxford: Wiley-Blackwell, Bd. 37.2018, 1, S. 226-238;

[Imp.fact.: 2.046]

**Saalfeld, Sylvia; Berg, Philipp; Niemann, Annika; Luz, Maria; Preim, Bernhard; Beuing, Oliver**

Semiautomatic neck curve reconstruction for intracranial aneurysm rupture risk assessment based on morphological parameters

International journal of computer assisted radiology and surgery: a journal for interdisciplinary research, development and applications of image guided diagnosis and therapy - Berlin: Springer, Bd. 13.2018, 11, S. 1781-1793;

[Imp.fact.: 1.961]

**Sandaka, Gourisankar; Specht, Eckehard**

Influence of material properties on the decomposition time of limestone under shaft kiln conditions

ZKG international: Bundesverband der Deutschen Zementindustrie ; Bundesverband der Deutschen Kalkindustrie ; Bundesverband der Gips- und Gipsbauplattenindustrie - Walluf: Bauverl, 3, S. 53-56, 2018

**Schulz, Florian; Beyrau, Frank**

Comparison of the spray and the spray/wall interaction of two gasoline injectors

International journal of automotive technology: IJAT - Berlin: Springer, Bd. 19.2018, 4, S. 615-622;



**Schulz, Florian; Beyrau, Frank**

Systematic investigation of fuel film evaporation

SAE technical papers - Warrendale, Pa: Soc, 2018, Paper 2018-01-0310, insgesamt 11S.;

**Sindeev, Sergey; Arnold, Philipp Georg; Frolov, Sergey; Prothmann, Sascha; Liepsch, Dieter; Balasso, Andrea; Berg, Philipp; Kaczmarz, Stephan; Kirschke, Jan Stefan**

Phase-contrast MRI versus numerical simulation to quantify hemodynamical changes in cerebral aneurysms after flow diverter treatment

PLOS ONE - San Francisco, California, US: PLOS, Vol. 13.2018, 1, Art. e190696, insgesamt 17 S.;

**Szabó, Balázs; Kovács, Zsolt; Wegner, Sandra; Ashour, Ahmed; Fischer, David; Stannarius, Ralf; Börzsönyi, Tamás**

Flow of anisometric particles in a quasi-two-dimensional hopper

Physical review - Woodbury, NY: Inst, Vol. 97.2018, 6, Art. 062904;

[Imp.fact.: 2.284]

**Szaszák, N.; Roloff, Christoph; Bordás, Róbert; Bencs, P.; Szabó, S.; Thévenin, Dominique**

A novel type of semi-active jet turbulence grid

Heliyon - London [u.a.]: Elsevier, Vol. 4.2018, 12, Art. e01026;

**Valen-Sendstad, Kristian; Bergersen, Aslak W.; Shimogonya, Yuji; Goubergrits, Leonid; Bruening, Jan; Pallares, Jordi; Cito, Salvatore; Piskin, Senol; Pekkan, Kerem; Geers, Arjan J.; Larrabide, Ignacio; Rapaka, Saikiran; Mihalef, Viorel; Fu, Wenyu; Qiao, Aike; Jain, Kartik; Roller, Sabine; Mardal, Kent-Andre; Kamakoti, Ramji; Spirka, Thomas; Ashton, Neil; Revell, Alistair; Aristokleous, Nicolas; Houston, J. Graeme; Tsuji, Masanori; Ishida, Fujimaro; Menon, Prahlad G.; Browne, Leonard D.; Broderick, Stephen; Shojima, Masaaki; Koizumi, Satoshi; Barbour, Michael; Aliseda, Alberto; Morales, Hernán G.; Lefèvre, Thierry; Hodis, Simona; Al-Smadi, Yahia M.; Tran, Justin S.; Marsden, Alison L.; Vaippummadhom, Sreeja; Einstein, G. Albert; Brown, Alistair G.; Debus, Kristian; Niizuma, Kuniyasu; Rashad, Sherif; Sugiyama, Shin-Ichiro; Owais Khan, M.; Updegrove, Adam R.; Shadden, Shawn C.; Cornelissen, Bart M. W.; Majoie, Charles B. L. M.; Berg, Philipp; Saalfeld, Sylvia; Kono, Kenichi; Steinman, David A.**

Real-world variability in the prediction of intracranial aneurysm wall shear stress - the 2015 international aneurysm CFD challenge

Cardiovascular engineering and technology: CVET - New York, NY: Springer, Bd. 9.2018, 4, S. 544-564;

[Imp.fact.: 2.046]

**Voss, Samuel; Arens, Christoph; Janiga, Gábor**

Assessing transitional air flow during human exhalation from Large Eddy Simulations based on spectral entropy

Flow, turbulence and combustion: an international journal published in association with ERCOFTAC - Dordrecht [u.a.]: Springer Science + Business Media B.V, Bd. 100.2018, insges. 12 S.;

[Imp.fact.: 2.207]

**Voß, Samuel; Saalfeld, Sylvia; Hoffmann, Thomas; Beuing, Oliver; Janiga, Gábor; Berg, Philipp**

Fluid-structure interaction in intracranial vessel walls - the role of patient-specific wall thickness

Current directions in biomedical engineering - Berlin: De Gruyter, Bd. 4.2018, 1, S. 587-590;

**Waldeck, Steffen; Woche, Hermann; Specht, Eckehard; Fritsching, Udo**

Evaluation of heat transfer in quenching processes with impinging liquid jets

International journal of thermal sciences: IJTS - Amsterdam [u.a.]: Elsevier Science, Bd. 134.2018, S. 160-167;

**Woche, Hermann; Fang, Yuan; Specht, Eckehard**

Heat transfer analysis during metal cooling with sprays and jets

Heat processing: international magazine for industrial furnaces, heat treatment & equipment - Essen: Vulkan-Verl, Bd. 16.2018, 1, S. 41-47

**Wu, Wei-Ning; Liu, Xiao-Yan; Hu, Zhou; Herz, Fabian; Specht, Eckehard**

Measurement of the local material depth in a directly-heated pilot rotary kiln based on temperature fields

Powder technology: an international journal on the science and technology of wet and dry particulate systems - Amsterdam [u.a.]: Elsevier Science, insges. 33 S., 2018;

[Imp.fact.: 2.942]

**Zhou, Hao; You, Jiaping; Xiong, Shiyong; Yang, Yue; Thévenin, Dominique; Chen, Shiyi**

Interactions between the premixed flame front and the three-dimensional Taylor-Green vortex

Proceedings of the Combustion Institute - Amsterdam [u.a.]: Elsevier, 2018;

[Online first]

[Imp.fact.: 5.336]

**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

Journal of visualization - Berlin: Springer, Bd. 21.2018, 1, S. 5-17;

[Imp.fact.: 0.971]

## **NICHT BEGUTACHTETE ZEITSCHRIFTENAUFsätze**

**Woche, Hermann; Fang, Yuan; Specht, Ekehard**

Wärmeübergang von Sprays und Strahlen bei der Kühlung heißer Metalle

Prozesswärme: Thermoprozesstechnik, Wärmebehandlung, Anlagenbau und -betrieb - Essen: Vulkan-Verlag, Bd. 1.2018, 1, S. 129-136

## **BEGUTACHTETE BUCHBEITRäge**

**Abdelsamie, Abouelmagd; Thévenin, Dominique**

DNS of burning N-heptane droplets - auto-ignition and turbulence modulation mechanisms

Direct and Large-Eddy Simulation X - Cham: Springer International Publishing, S. 391-397, 2018 - (ERCOFTAC Series; 24);

**Berg, Philipp; Radtke, Livia; Voß, Samuel; Serowy, Steffen; Janiga, Gábor; Preim, Bernhard; Beuing, Oliver; Saalfeld, Sylvia**

3DRA reconstruction of intracranial aneurysms - how does voxel size influences morphologic and hemodynamic parameters

Learning from the past, looking to the future: 2018 40th Annual International Conference of the IEEE Engineering in Medicine and Biology Society : July 17-21, 2018, Hawaii Convention Center, Honolulu, Hawaii - [Piscataway, NJ]: IEEE, S. 1327-1330;

[Konferenz: 40th Annual International Conference of the IEEE Engineering in Medicine and Biology Society (EMBC), Honolulu, HI, USA, 18-21 July 2018]

**Kulkarni, Gaurav A.; Specht, Ekehard**

Quantifying the parameters influencing heat transfer during quenching of metal plate

Proceedings of the 4th World Congress on Mechanical, Chemical, and Material Engineering (MCM'18) - International ASET Inc., 2018, Paper-Nr. HTFF 167, insgesamt 10 S.;

**Mansour, Michael; Wunderlich, Bernd; Thevenin, Dominique**

Experimental study of two-phase air/water flow in a centrifugal pump working with a closed or a semi-open impeller

ASME Turbo Expo 2018: Turbomachinery Technical Conference and Exposition: Volume 9: Oil and gas applications, supercritical CO<sub>2</sub> power cycles, wind energy, Oslo, Norway, June 11-15, 2018 - New York, N.Y.: The American Society of Mechanical Engineers, 2018, Paper No. GT2018-75380, insgesamt 13 S.;

[Konferenz: ASME Turbo Expo 2018: Turbomachinery Technical Conference and Exposition, Oslo, Norway, June 11-15, 2018]

**Misra, Anurag; Bonamy, Cyrille; Souza, Luís M.; Hohl, Lena; Illner, Markus; Kraume, Matthias; Repke, Jens-Uwe; Thévenin, Dominique**

A multi-fluid approach to simulate separation of liquid-liquid systems in a gravity settler

Computer aided chemical engineering - Amsterdam [u.a.]: Elsevier, Bd. 43.2018, S. 31-36;

[Symposium: 28th European Symposium on Computer Aided Process Engineering, Graz, Austria, 10-13 June 2018]

**Niemann, Uli; Berg, Philipp; Niemann, Annika; Beuing, Oliver; Preim, Bernhard; Spiliopoulou, Myra; Saalfeld, Sylvia**

Rupture status classification of intracranial aneurysms using morphological parameters

31st IEEE International Symposium on Computer-Based Medical Systems: CBMS 2018 : 18-21 June 2018, Karlstad, Sweden : proceedings - Piscataway, NJ: IEEE;

[Symposium: 31st IEEE International Symposium on Computer-Based Medical Systems, CBMS 2018, Karlstad, Sweden, 18-21 June 2018]

**Pliester, Stefan; Bauer, Wolfgang; Al-Karawi, Janan; Specht, Eckehard**

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

Tagungsband zum 20. Werkstofftechnischen Kolloquium: 14. und 15. März 2018 in Chemnitz - Chemnitz: Eigenverlag Chemnitz, S. 326 - (Schriftenreihe Werkstoffe und werkstofftechnische Anwendungen; Band 72);

[Tagung: 20. Werkstofftechnischen Kolloquium, Chemnitz, 14. und 15. März 2018]

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

DNS of turbulent lean premixed syngas flames at elevated pressures

Direct and Large-Eddy Simulation X - Cham: Springer International Publishing, S. 399-405, 2018 - (ERCOFTAC Series; 24);

**Thévenin, Dominique**

DNS and LES of transitional and two-phase flows

Direct and Large-Eddy Simulation X - Cham: Springer International Publishing, S. 35-42, 2018 - (ERCOFTAC Series; 24);

**Voß, Samuel; Saalfeld, Patrick; Saalfeld, Sylvia; Beuing, Oliver; Janiga, Gábor; Preim, Bernhard**

Impact of gradual vascular deformations on the intra-aneurysmal hemodynamics

Bildverarbeitung für die Medizin 2018: Algorithmen - Systeme - Anwendungen ; Proceedings des Workshops vom 11. bis 13. März 2018 in Erlangen - Berlin: Springer Vieweg, S. 359-364;

[Workshop: Bildverarbeitung für die Medizin 2018, Erlangen, 11. bis 13. März 2018]

## HERAUSGEBERSCHAFTEN

**Wolter, Martin; Beyrau, Frank; Tsotsas, Evangelos; Klabunde, Christian; Dancker, Jonte; Gast, Nicola; Schröter, Tamara; Schulz, Florian; Rossberg, Jari; Richter, André**

Intelligentes Multi-Energie-System (SmartMES) - Statusbericht der Otto-von-Guericke-Universität Magdeburg zum Verbundprojekt ; 1. Statusseminar 28. März 2018 in Magdeburg

Magdeburg: Otto-von-Guericke-Universität, 2018, XII, 159 Seiten, Illustrationen, Diagramme, 21 cm - (Res electricae Magdeburgenses; Band 74), ISBN 978-3-944722-69-6;

Kongress: Statusseminar 1 (Magdeburg : 2018.03.28) [Literaturangaben: Seite 150-159]

## ABSTRACTS

**Abram, Christopher; Fond, Benoit; Pougin, Miriam; Beyrau, Frank**

Characterising dispersed phosphor particles for fluid thermometry

Inaugural International Conference on Phosphor Thermometry: July 25th -27th, 2018, Technology and Innovation Centre, University of Strathclyde, Glasgow, Scotland - Glasgow;

[Konferenz: Inaugural International Conference on Phosphor Thermometry, IGET 2018, Glasgow, Scotland, July 25th -27th, 2018]

**Fond, Benoit; Xiao, Cheng; Abram, Christopher; T'Joen, Christophe; Wachem, Berend; Beyrau, Frank**

Phosphor thermometry for the validation of computational fluid dynamics simulations of heat transfer in compressible real-gas flows

Inaugural International Conference on Phosphor Thermometry: July 25th -27th, 2018, Technology and Innovation Centre, University of Strathclyde, Glasgow, Scotland - Glasgow;

[Konferenz: Inaugural International Conference on Phosphor Thermometry, IGET 2018, Glasgow, Scotland, July 25th -27th, 2018]

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

Free cooling of a granular gas in microgravity

Bulletin of the American Physical Society - New York, NY: Soc, 2018, Abstract: L60.00202;

[APS March Meeting 2018, Los Angeles, California, March 59, 2018]

**Mendieta, Aldo; Fond, Benoit; Dragomirov, Plamen; Beyrau, Frank**

Exploiting optical signals from single-phosphor particles for simultaneous point measurements of flow temperature and velocity

Inaugural International Conference on Phosphor Thermometry: July 25th -27th, 2018, Technology and Innovation Centre, University of Strathclyde, Glasgow, Scotland - Glasgow;

[Konferenz: Inaugural International Conference on Phosphor Thermometry, IGET 2018, Glasgow, Scotland, July 25th -27th, 2018]

**Ojo, Anthony; Fond, Benoit; Abram, Christopher; Wachem, Berend; Heyes, Andrew; Beyrau, Frank**

Simultaneous measurements of the thermal and velocity boundary layer over a heated flat plate using thermographic laser Doppler velocimetry

Inaugural International Conference on Phosphor Thermometry: July 25th -27th, 2018, Technology and Innovation Centre, University of Strathclyde, Glasgow, Scotland - Glasgow;

[Konferenz: Inaugural International Conference on Phosphor Thermometry, IGET 2018, Glasgow, Scotland, July 25th -27th, 2018]

**Voß, Samuel; Saalfeld, Sylvia; Hoffmann, Thomas; Janiga, Gábor; Beuing, Oliver; Berg, Philipp**

Fluid-structure interaction in intracranial vessel walls - the role of patient-specific wall thickness

Biomedical engineering: joint journal of the German Society for Biomedical Engineering in VDE and the Austrian and Swiss Societies for Biomedical Engineering - Berlin [u.a.]: de Gruyter, Vol. 63.2018, Suppl.1, S. S378;

[Kongress: BMT 2018, Aachen, September 26-28, 2018]

[Imp.fact.: 1.088]

## DISSERTATIONEN

**Buchtatj, Denis; Thévenin, Dominique [GutachterIn]; Hadler, Jens [GutachterIn]; Tschöke, Helmut [GutachterIn]**

CFD-basierte Analyse der Gemischbildung mit einem skalenauflösenden Turbulenzmodell

Magdeburg, 2017, XVI, 140 Seiten, Illustrationen, Diagramme;

[Literaturverzeichnis: Seite 126-133]

**Meyer, Lennart; Specht, Eckehard [AkademischeR BetreuerIn]; Krause, Ulrich [GutachterIn]; Beyer, Michael [GutachterIn]; Grätz, Rainer [GutachterIn]**

Die Entstehung von heißen Oberflächen in metallischen Reibsituationen und ihre Zündwirksamkeit

Bremen: Fachverlag NW in der Carl Schünemann Verlag GmbH, 2018, VII, 131 Seiten, Illustrationen, Diagramme, 30 cm - (PTB-Bericht; Ex, Explosionsschutz; 9), ISBN 978-3-95606-402-9

# 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. HOCHSCHULLEHRER/INNEN

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. Porenetzwerke)
6. Mechanische Verfahrenstechnik (Prof. Dr. Ir. Berend van Wachem)
- Partikeltechnologie
  - Mehrphasenströmungen
  - Numerische Mechanik

#### 4. KOOPERATIONEN

- AstraZeneca GmbH, Wedel
- AVA - Anhaltische 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-Görlau
- Max-Planck-Institut für Dynamik komplexer technischer Systeme Magdeburg
- Petrobras, Rio de Janeiro (Brasilien)
- Politecnico di Milano, Italien
- ProBioGen AG, Berlin
- Sartorius Stedim Biotech GmbH, Göttingen
- Shell, Den Haag (Niederlande)
- TU Berlin

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

## 5. FORSCHUNGSPROJEKTE

**Projektleitung:** Prof. Dr.-Ing. Andreas Bück  
**Projektbearbeitung:** J. Du  
**Kooperationen:** Prof. Dr.-Ing. Evangelos Tsotsas, OvGU Magdeburg  
**Förderer:** 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:** G. Strenzke  
**Kooperationen:** Prof. Dr.-Ing. Evangelos Tsotsas, OvGU Magdeburg; Prof. Dr.-Ing. Achim Kienle, Otto-von-Guericke-Universität 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:** M. Farid  
**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:** C. Fischer, F. Sondej, M.Sc. Christian Rieck, Z. Jiang  
**Kooperationen:** Prof. Dr.-Ing. Evangelos Tsotsas, OvGU Magdeburg; Prof. Mirko Peglow; IPT Pergande, Weißandt-Gölzau; Glatt Ingenieurtechnik Weimar; Dr.-Ing. Markus Henneberg, AVA GmbH  
**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:** L. Mielke  
**Kooperationen:** Prof. Dr.-Ing. Evangelos Tsotsas, OvGU Magdeburg; Prof. Dr.-Ing. Achim Kienle, Otto-von-Guericke-Universität 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 Wirbelschichtrinnen**

In diesem Projekt wird die Sprühgranulation in Wirbelschichtrinnen 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 Wirbelschichtrinnen 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. Udo Reichl  
**Projektbearbeitung:** Dr. Dirk Benndorf  
**Förderer:** Bund - 01.12.2015 - 30.11.2019

### **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:** Dr. Dirk Benndorf  
**Förderer:** 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.-Ing. habil. Dr. h.c. Andreas Seidel-Morgenstern  
**Förderer:** Deutsche Forschungsgemeinschaft (DFG) - 01.01.2018 - 31.12.2021

### **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  
**Kooperationen:** Max-Planck-Institut für Dynamik komplexer technischer Systeme Magdeburg; Syncom, Niederlande; Friedrich-Alexander Universität Erlangen-Nürnberg, Deutschland; University of Manchester, Großbritannien; ETH Zürich, Schweiz; Radboud University Nijmegen, Niederlande; 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 Kompetenzbaukasten 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) - 01.10.2015 - 31.03.2018

**SPP 1570 "Poröse Medien mit definierter Porenstruktur in der Verfahrenstechnik - Modellierung, Anwendungen, Synthese", Teilprojekt "Trennung von Gemischen chiraler anästhetischer Gase durch modifizierte poröse Gläser"**

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. habil. Dr. h.c. Andreas Seidel-Morgenstern  
**Kooperationen:** Hochschule Anhalt, Köthen, Prof. Dr. Christof Hamel  
**Förderer:** Deutsche Forschungsgemeinschaft (DFG) - 01.11.2017 - 31.10.2020

**Kontrolle und Intensivierung von Reaktionen durch Einsatz zyklisch betriebener Distributoren**

Ziel des vorliegenden Projektes ist die Steigerung der Ausbeute von gewünschten Olefinen durch verteilte Reaktantendosierung mittels Membrandistributoren. In einem zyklisch betriebenen Distributor ist hierzu vorgesehen, die oxidative und die thermische Dehydrierung am industriell relevanten Modellsystem Propan zu untersuchen. Im Hinblick auf die Nutzung maximaler Synergieeffekte soll mit Hilfe eines integrierten Reaktors (autothermer Betrieb) eine stoffliche und energetische Kopplung erfolgen und diese anschließend bewertet werden. Die nachteilige Katalysatordeaktivierung bei der thermischen Dehydrierung soll in diesem Vorhaben mit Hilfe des zyklischen Betriebes kompensiert werden, da im Gegensatz zu etablierten Prozessen in jeder Phase der Apparat/Katalysator vollständig ausnützt werden kann. Hierzu ist ein kontrollierter transmembraner Sauerstoffstrom, der sich temporär der Katalysatoraktivität anpasst, modellbasiert zu ermitteln. Die Kontrolle der Temperatur und der Geschwindigkeit der Reaktionsfronten im Apparat soll durch verteilte Dosierung effizient gestaltet werden. Vor diesem Hintergrund werden durch modellgestützte Untersuchungen (1D/2D) die komplexen Temperatur- und Konzentrationsfelder abgebildet, um optimale Dosierprofile identifizieren als auch bewerten zu können (Kompatibilität von Reaktion und Membran). Eine experimentelle Validierung der zyklisch betriebenen Distributoren wird desintegriert unter stofflichen Gesichtspunkten und darauf aufbauend unter Verwendung der entwickelten Methoden vollintegriert mit stofflicher und energetischer Kopplung im Pilotmaßstab erfolgen.

---

**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 Taumelbewegung, 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 Taumelbewegung 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-Rosendorf) 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. 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. habil. Kai Sundmacher  
**Förderer:** Deutsche Forschungsgemeinschaft (DFG) - 01.10.2018 - 30.09.2021

### **"Mehrskalen-Analyse und rationaler Entwurf von dynamisch betriebenen, integrierten Katalysator-Reaktor-Systemen für die Methanisierung von CO<sub>2</sub>"**

*Power-to-Methane ist ein Konzept zur chemischen Speicherung von überschüssiger elektrischer Energie, die aus erneuerbaren Quellen, wie zum Beispiel Wind- und Solarkraft, gewonnen wird. Die überschüssige Energie dient hierbei zunächst zur Gewinnung von Wasserstoff durch die Elektrolyse von Wasser. Der Wasserstoff wird anschließend mit Kohlenstoffdioxid, welches beispielsweise aus Kraftwerken, industriellen Prozessen (z. B. Stahl- und Zementindustrie) oder aus Biogasanalgen stammt, zu Methan katalytisch umgesetzt. Das erhaltene Methan kann in das vorhandene Erdgasnetz eingespeist werden oder als Ausgangsstoff für die chemische Industrie verwendet werden. Um große Zwischenspeicher zu vermeiden, ist es vorteilhaft die eingesetzten katalytischen Festbett-Reaktoren flexibel, entsprechend des vorhandenen Energieüberschusses, zu betreiben.*

*Die Auswirkungen der dynamischen Betriebsweise auf die eingesetzten Methanisierungs-Katalysatoren ist jedoch noch nicht ausreichend erforscht und verstanden. Allerdings ist bereits bekannt, dass die Katalysatorstruktur, welche dessen Aktivität und Stabilität in hohem Maße beeinflusst, von den vorhandenen Reaktionsbedingungen abhängt und sich zum Beispiel durch Phasenumwandlung und Sinterung verändern kann. Zusätzlich beeinflussen Speichergrößen, wie zum Beispiel die Wärmekapazität des Katalysators, die zeitliche Veränderung des Systems. Im Rahmen dieses Projekts erfolgt in Zusammenarbeit mit der Universität Leipzig und dem Karlsruher Institut für Technologie eine dynamische Multiskalenanalyse und Modellierung der zugrundeliegenden chemischen und physikalischen Vorgänge vom aktiven Zentrum bis zur Reaktorskala. Die gewonnenen Erkenntnisse sollen zum Entwurf eines neuartigen Katalysator-Reaktor-Systems dienen, welches in der Lage ist dauerhaft mit dynamischen Lastwechseln effizient betrieben zu werden.*

---

**Projektleitung:** Prof. Dr.-Ing. habil. Kai Sundmacher  
**Projektbearbeitung:** Viktoria Wiedmeyer, Dr. Andreas Voigt  
**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 Differentialgleichungen 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:** Dr. Andreas Voigt  
**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  
**Projektbearbeitung:** Dr. Andreas Voigt  
**Förderer:** Industrie - 01.06.2018 - 31.10.2018

### **Durchführung von Untersuchungen zur formgesteuerten Methionenkristallisation**

Die Kristallisation von Aminosäuren als Zwischenschritt eines Trennprozesses wird unter dem Aspekt der Änderung der Lösungsmittelzusammensetzung zur Untersuchung der Kristallform und Agglomeration experimentell und simulativ untersucht, um daraus verbesserte Bedingungen für die darauf folgende Weiterverarbeitung abzuleiten.

---

**Projektleitung:** Prof. Dr.-Ing. habil. Kai Sundmacher  
**Förderer:** Deutsche Forschungsgemeinschaft (DFG) - 01.01.2018 - 31.12.2021

### **SFB/TR 63: Integrierte chemische Prozesse in flüssigen Mehrphasensystemen - TP B1: Optimale Reaktionsführung in flüssigen Mehrphasensystemen / 3. Förderperiode**

Das Teilprojekt B1 hat zum Ziel, Methoden zur Ermittlung der optimalen Reaktionsführung für flüssige Mehrphasensysteme zu entwickeln und exemplarisch auf die Hydroformylierung langkettiger Alkene anzuwenden. Dabei übernimmt es wichtige Funktionen innerhalb des SFB/TR. Zum Einen wird eine Methodik für die optimale Reaktionsführung und die ideale Reaktorgestaltung als generische Fragestellung entwickelt. Zum Anderen werden konkrete Reaktorkonzepte für den im SFB/TR behandelten Hydroformylierungsprozess langkettiger Alkene in temperaturgesteuerten Lösungsmittelsystemen entworfen. Diese werden apparativ realisiert und hinsichtlich ihres reaktionstechnischen und strömungstechnischen Realverhaltens charakterisiert. Danach wird der resultierende optimale Reaktor in Kooperation mit dem Teilprojekt B5 in eine Mini-plant integriert, um das Reaktorverhalten im Gesamtprozess mit geschlossen Rückführungsströmen zu untersuchen und robust 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. 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:** 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:** 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:** 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:** Xiang Lu  
**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. habil. Evangelos Tsotsas  
**Projektbearbeitung:** MSc. Jari Roßberg  
**Kooperationen:** Prof. Dr.-Ing. Marin Wolter, FEIT/OVGU, as leader of the SmartMES consortium;  
Prof. Dr. Frank Beyrau, FVST/OVGU  
**Förderer:** Land (Sachsen-Anhalt) - 01.04.2017 - 31.03.2020

#### **Intelligent Multi-Ernergy Systems (SmartMES)**

Coupling elements between power, gas an 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 regenartive energy forms.

---

**Projektleitung:** Prof. Dr.-Ing. habil. Evangelos Tsotsas  
**Projektbearbeitung:** MSc. Tariq Mahmood Hafiz  
**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. Abhinandan Kumar Singh  
**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:** MSc. Daniel Pramudita  
**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:** MSc. Faez Ahmad  
**Kooperationen:** Prof. Prat, IMFT Toulouse, Frankreich; Dr.-Ing. Abdolreza Kharaghani  
**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. Arman Rahimi  
**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:** M.Sc. Christian Rieck  
**Kooperationen:** AVA - Anhaltinische Verfahrens- und Anlagentechnik GmbH, Magdeburg  
**Förderer:** BMWi/AIF - 01.04.2018 - 31.12.2019

#### **Innovative inline system for the simultaneous measurement of dual properties of particulate products**

Particle size and particle moisture content are key properties for the application of powders and grains. The project develops methods for their independent monitoring during production processes, despite of their mutual influence on measuring signal.

---

**Projektleitung:** Prof. Dr.-Ing. habil. Evangelos Tsotsas  
**Projektbearbeitung:** MSc. Ibtihaj Khurram Faridi  
**Kooperationen:** Fraunhofer IFF, Magdeburg, Dr. Wolfram Heineken  
**Förderer:** Stiftungen - Sonstige - 01.11.2018 - 31.10.2021

#### **CFD simulation of fluidized bed combustion with vortex and cyclone Afterburning**

Economical, robust and environmentally friendly combustors for biomaterials are investigated by means of computational fluid dynamics. This is done for the main part of the fluidized bed, the freeboard, the dust (ash) removal equipment, and combinations thereof.

---

**Projektleitung:** Prof. Dr.-Ing. habil. Evangelos Tsotsas  
**Projektbearbeitung:** MSc. Manuel Janocha  
**Förderer:** Deutsche Forschungsgemeinschaft (DFG) - 01.09.2018 - 31.08.2021

#### **Layer buildup and structure from single deposited droplets**

This project replicates experimentally in a droplet-by-droplet manner how layers are successively built from drying droplets that contain solid material. Contour and porosity are measured incrementally during layer buildup by means of white interferometry. Salt solutions, nanosuspensions and microsuspensions are investigated for different drying conditions. Purpose of the project is to elucidate the principles of granulation and coating.

---

**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:** 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 Mikroeigenschaften 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:** Kamran Khalid, M.Sc. 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  
**Projektbearbeitung:** Zhang Xiwei, Tel. 49 (0)391 67 52001  
**Förderer:** 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:** Dr.-Ing. Andreas Schlinkert  
**Förderer:** 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:** Dr.-Ing. Robert Heyer  
**Projektbearbeitung:** M.Sc. Theresa Schlegel  
**Förderer:** Deutsche Forschungsgemeinschaft (DFG) - 01.10.2017 - 31.10.2018

**InflammatorySystems-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

**Abdol Azis, Mohd Hazmil; Evrard, Fabien; Wachem, Berend**

An immersed boundary method for flows with dense particle suspensions

Acta mechanica - Wien: Springer, 2018;

[Online first]

[Imp.fact.: 2.113]

**Ariane, M.; Sommerfeld, Martin; Alexiadis, A.**

Wall collision and drug-carrier detachment in dry powder inhalers - using DEM to devise a sub-scale model for CFD calculations

Powder technology: an international journal on the science and technology of wet and dry particulate systems - Amsterdam [u.a.]: Elsevier Science, Bd. 334.2018, S. 65-75;

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

Computationally efficient NMPC for batch and semi-batch processes using parsimonious input parameterization

Journal of process control: a journal affiliated with IFAC, the International Federation of Automatic Control - Amsterdam [u.a.]: Elsevier Science, Bd. 66.2018, S. 12-22;

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

NMPC using ponyryagins minimum principle-application to a two-phase semi-batch hydroformylation reactor under uncertainty

Computers & chemical engineering: an international journal of computer applications in chemical engineering - Amsterdam [u.a.]: Elsevier Science, Bd. 108.2018, S. 47-56;

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

Toward fast dynamic optimization - an indirect algorithm that uses parsimonious input parameterization

Industrial & engineering chemistry research - Columbus, Ohio: American Chemical Society, Bd. 57.2018, 30, S. 10038-10048;

**Bartholomew, Paul; Denner, Fabian; Abdol-Azis, Mohd Hazmil; Marquis, Andrew; Wachem, Berend**

Unified formulation of the momentum-weighted interpolation for collocated variable arrangements

Journal of computational physics - Amsterdam: Elsevier, Bd. 375.2018, S. 177-208;

[Imp.fact.: 2.864]

**Bechtel, Simon; Vidakovic-Koch, Tanja; Sundmacher, Kai**

Novel process for the exergetically efficient recycling of chlorine by gas phase electrolysis of hydrogen chloride

The chemical engineering journal - Amsterdam: Elsevier, Bd. 346.2018, S. 535-548;

**Beneyton, Thomas; Krafft, Dorothee; Bednarz, Claudia; Kleineberg, Christin; Woelfer, Christian; Ivanov, Ivan; Vidakovi-Koch, Tanja; Sundmacher, Kai; Baret, Jean-Christophe**

Out-of-equilibrium microcompartments for the bottom-up integration of metabolic functions

Nature Communications - [London]: Nature Publishing Group UK, Vol. 9.2018, Art. 2391, insgesamt 10 S.;

**Brächer, Alexander; Kreußer, Lisa Maria; Qamar, Shamsul; Seidel-Morgenstern, Andreas; Harbou, Erik**

Application of quantitative inline NMR spectroscopy for investigation of a fixed-bed chromatographic reactor process

The chemical engineering journal - Amsterdam: Elsevier, Bd. 336.2018, S. 518-530;

**Buchbinder, Jörn Holger; Pischel, Dennis; Sundmacher, Kai; Flassig, Robert J.; Lavrik, Inna N.**

Quantitative single cell analysis uncovers the life/death decision in CD95 network

PLoS Computational Biology: a new community journal - San Francisco, Calif: Public Library of Science, Vol. 14.2018, 9, Art. e1006368, insgesamt 21 S.;

[Imp.fact.: 3.955]

**Böhmert, Linda; König, Laura; Sieg, Holger; Lichtenstein, Dajana; Paul, Niklas; Braeuning, Albert; Voigt, Andreas; Lampen, Alfonso**

In vitro nanoparticle dosimetry for adherent growing cell monolayers covering bottom and lateral walls  
Particle and fibre toxicology: pft - London: BioMed Central, Vol. 15.2018, Art. 42, insgesamt 20 S.;  
[Imp.fact.: 6.105]

**Carvalho, Sofia B.; Fortuna, A. Raquel; Wolff, Michael W.; Peixoto, Cristina; Alves, Paula M.; Reichl, Udo**

Purification of influenza viruslike particles using sulfated cellulose membrane adsorbers  
Journal of chemical technology & biotechnology - Chichester: Wiley, Bd. 93.2018, 7, S. 1988-1996;  
[Special issue: Bioseparations]

**Charogiannis, Alexandros; Denner, Fabian; Wachem, Berend; Kalliadasis, Serafim; Scheid, Benoit; Markides, Christos N.**

Experimental investigations of liquid falling films flowing under an inclined planar substrate  
Physical review fluids - College Park, MD: APS, Vol. 3.2018, 11, Artikel 114002;  
[Imp.fact.: 2.021]

**Cui, Yan; Sommerfeld, Martin**

Application of Lattice-Boltzmann method for analysing detachment of micron-sized particles from carrier particles in turbulent flows  
Flow, turbulence and combustion: an international journal published in association with ERCOFTAC - Dordrecht [u.a.]: Springer Science + Business Media B.V, Bd. 100.2018, 1, S. 271-297;

**David, Uche Ugochukwu; Qamar, Shamsul; Seidel-Morgenstern, Andreas**

Analytical and numerical solutions of two-dimensional general rate models for liquid chromatographic columns packed with coreshell particles  
Chemical engineering research and design: CERD - Amsterdam: Elsevier, Bd. 130.2018, S. 295-320;

**Denner, Fabian; Charogiannis, Alexandros; Pradas, Marc; Markides, Christos N.; Wachem, Berend; Kalliadasis, Serafim**

Solitary waves on falling liquid films in the inertia-dominated regime  
Journal of fluid mechanics - Cambridge [u.a.]: Cambridge Univ. Press, Bd. 837.2018, S. 491-519;  
[Imp.fact.: 2.821]

**Denner, Fabian; Xiao, Cheng-Nian; Wachem, Berend**

Pressure-based algorithm for compressible interfacial flows with acoustically-conservative interface discretisation  
Journal of computational physics - Amsterdam: Elsevier, Bd. 367.2018, S. 192-234;  
[Imp.fact.: 2.744]

**Diez, E.; Meyer, K.; Bück, A.; Tsotsas, Evangelos; Heinrich, S.**

Influence of process conditions on the product properties in a continuous fluidized bed spray granulation process  
Chemical engineering research and design: CERD - Amsterdam: Elsevier, Bd. 139.2018, S. 104-115;

**Duvigneau, Stefanie; Dürr, Robert; Laske, Tanja; Bachmann, Mandy; Dostert, Melanie; Reichl, Udo; Kienle, Achim**

Mathematical modeling as a tool to improve influenza vaccine production processes  
IFAC-PapersOnLine - Frankfurt: Elsevier, Bd. 51.2018, 19, S. 1-4;  
[Konferenz: 7th Conference on Foundation of Systems Biology in Engineering, FOSBE 2018, Chicago, Illinois, USA, 05-08 August 2018]  
[Imp.fact.: 0.434]

**Evrard, Fabien; Denner, Fabian; Wachem, Berend**

Surface reconstruction from discrete indicator functions  
IEEE transactions on visualization and computer graphics: TVCG - New York, NY: IEEE, 2018;  
[Online first]  
[Imp.fact.: 3.078]

**Fischer, Laura M.; Wolff, Michael; Reichl, Udo**

Purification of cell culture-derived influenza A virus via continuous anion exchange chromatography on monoliths  
Vaccine - Amsterdam: Elsevier, Bd. 36.2018, 22, S. 3153-3160;

**Fortuna, Ana Raquel; Taft, Florian; Villain, Louis; Wolff, Michael W.; Reichl, Udo**

Optimization of cell culture-derived influenza A virus particles purification using sulfated cellulose membrane adsorbers  
Engineering in life sciences - Weinheim: Wiley-VCH, Bd. 18.2018, 1, S. 29-39;

**Gerlach, Martin; Kirschtowski, Sabine; Seidel-Morgenstern, Andreas; Hamel, Christof**

Kinetic modeling of the palladiumcatalyzed isomerizing methoxycarbonylation of 1decene  
Chemie - Ingenieur - Technik: CIT - Weinheim: Wiley-VCH Verl, Bd. 90.2018, 5, S. 673-678;  
[Imp.fact.: 1.1]

**Golovin, Ievgen; Strenzke, Gerd; Dürr, Robert; Palis, Stefan; Bück, Andreas; Tsotsas, Evangelos; Kienle, Achim**

Parameter identification for continuous fluidized bed spray agglomeration  
Processes: open access journal - Basel: MDPI, Vol. 6.2018, 12, Artikel 246;

**Gouaou, Imen; Shamaei, Samira; Koutchoukali, Mohamed Salah; Bouhelassa, Mohamed; Tsotsas, Evangelos; Kharaghani, Abdolreza**

Impact of operating conditions on a single droplet and spray drying of hydroxypropylated pea starch - process performance and final powder properties  
Asia-Pacific journal of chemical engineering - Hoboken, NJ: Wiley, Bd. 13.2018, 5;  
[Imp.fact.: 1.238]

**Hampel, Nelli; Royeva, Evgeniya; Bück, Andreas; Tsotsas, Evangelos**

Coating of finely dispersed particles by two-fluid nozzle  
Particuology : science and technology of particles - Amsterdam : Elsevier, Bd. 38.2018, S. 80-93  
[Imp.fact.: 2.785]

**Hazmil Abdol Azis, Mohd; Evrard, Fabien; Wachem, Berend**

An immersed boundary method for incompressible flows in complex domains  
Journal of computational physics - Amsterdam: Elsevier, 2018;  
[Online first]  
[Imp.fact.: 2.864]

**Hoffmann, Marcus; Pioch, Markus; Pralow, Alexander; Henning, René; Kottler, Robert; Reichl, Udo; Rapp, Erdmann**

The fine art of destruction - a guide to indepth glycoproteomic analyses-exploiting the diagnostic potential of fragment ions  
Proteomics - Weinheim: Wiley VCH, Vol. 18.2018, 24, Art.-Nr. 1800282;

**Idakiev, Vesselin; Steinke, Claudia; Sondej, Franziska; Bück, Andreas; Tsotsas, Evangelos; Mörl, Lothar**

Inductive heating of fluidized beds - spray coating process  
Powder technology: an international journal on the science and technology of wet and dry particulate systems - Amsterdam [u.a.]: Elsevier Science, Bd. 328.2018, S. 26-37;

**Jiang, Zhaochen; Bück, Andreas; Tsotsas, Evangelos**

CFDDEM study of residence time, droplet deposition, and collision velocity for a binary particle mixture in a Wurster fluidized bed coater  
Drying technology: an international journal - Philadelphia, Pa: Taylor & Francis, Bd. 36.2018, 6, S. 638-650;

**Jiang, Zhaochen; Hagemeyer, Thomas; Bück, Andreas; Tsotsas, Evangelos**

Color-PTV measurement and CFD-DEM simulation of the dynamics of poly-disperse particle systems in a pseudo-2D fluidized bed  
Chemical engineering science - Amsterdam [u.a.]: Elsevier Science, Bd. 179.2018, S. 115-132;



**Jokiel, Michael; Kaiser, Nicolas Maximilian; Kováts, Péter; Mansour, Michael; Zähringer, Katharina; Nigam, Krishna Deo Prasad; Sundmacher, Kai**

Helically coiled segmented flow tubular reactor for the hydroformylation of long-chain olefins in a thermomorphic multiphase system

The chemical engineering journal - Amsterdam: Elsevier, 2018;

[Online first]

[Imp.fact.: 6.735]

**Kaiser, Nicolas Maximilian; Flassig, Robert; Sundmacher, Kai**

Reactor-network synthesis via flux profile analysis

The chemical engineering journal - Amsterdam: Elsevier, Bd. 335.2018, S. 1018-1030;

**Khalid, Muhammad Kamran; Asad, Muhammad; Henrich-Noack, Petra; Sokolov, Maxim; Hintz, Werner; Grigartzik, Lisa; Zhang, Enqi; Dityatev, Alexander; Wachem, Berend; Sabel, Bernhard A.**

Evaluation of toxicity and neural uptake in vitro and in vivo of superparamagnetic iron oxide nanoparticles

International journal of molecular sciences - Basel: Molecular Diversity Preservation International, Vol. 19.2018, 9, Art. 2613, insgesamt 14 S.;

[Imp.fact.: 3.687]

**Koullapis, P.; Kassinos, S. C.; Muela, J.; Perez-Segarra, C.; Rigola, J.; Lehmkuhl, O.; Cui, Y.; Sommerfeld, Martin; Elcner, J.; Jicha, M.; Saveljic, I.; Filipovic, N.; Lizal, F.; Nicolaou, L.**

Regional aerosol deposition in the human airways - the SimInhale benchmark case and a critical assessment of in silico methods

European journal of pharmaceutical sciences: official journal of the European Federation for Pharmaceutical Sciences - New York, NY [u.a.]: Elsevier, Bd. 113.2018, S. 77-94;

**Le, Kieu Hiep; Hampel, Neli; Kharaghani, Abdolreza; Bück, Andreas; Tsotsas, Evangelos**

Superheated steam drying of single wood particles: A characteristic drying curve model deduced from continuum model simulations and assessed by experiments

Drying technology: an international journal - Philadelphia, Pa: Taylor & Francis, Bd. 36.2018, 15, S. 1866-1881;

[Special Issue to Celebrate the 30th Anniversary of the Editorship of Prof. Arun S. Mujumdar]

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

Continuum-scale modeling of superheated steam drying of cellular plant porous media

International journal of heat and mass transfer - Amsterdam [u.a.]: Elsevier, Bd. 124.2018, S. 1033-1044;

**Lee, Ju Weon; Seidel-Morgenstern, Andreas**

Model predictive control of simulated moving bed chromatography for binary and pseudo-binary separations - simulation study

IFAC-PapersOnLine - Frankfurt: Elsevier, Bd. 51.2018, 18, S. 530-535;

[Symposium: 10th IFAC Symposium on Advanced Control of Chemical Processes, ADCHEM 2018, Shenyang, China, 25-27 July 2018]

[Imp.fact.: 0.434]

**Liesche, Georg; Sundmacher, Kai**

Identification of key transport phenomena in high-temperature reactors - flow and heat transfer characteristics

Industrial & engineering chemistry research - Columbus, Ohio: American Chemical Society, Bd. 57.2018, 46, S. 15884-15897;

[Imp.fact.: 3.141]

**Liu, Daoyin; Wachem, Berend**

Comprehensive assessment of the accuracy of CFD-DEM simulations of bubbling fluidized beds

Powder technology: an international journal on the science and technology of wet and dry particulate systems - Amsterdam [u.a.]: Elsevier Science, Bd. 343.2018, S. 145-158;

[Imp.fact.: 3.23]

**Mahour, Reza; Klapproth, Jan; Rexer, Thomas F. T.; Schildbach, Anna; Klamt, Steffen; Pietzsch, Markus; Rapp, Erdmann; Reichl, Udo**

Establishment of a five-enzyme cell-free cascade for the synthesis of uridine diphosphate N-acetylglucosamine

Journal of biotechnology - Amsterdam [u.a.]: Elsevier Science, Bd. 283.2018, S. 120-129;

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

A pore network study of evaporation from the surface of a drying nonhygroscopic porous medium  
AIChE journal - Hoboken, NJ: Wiley, Bd. 64.2018, 4, S. 1435-1447;

**Mueller, Ines; Kiedorf, Gregor; Runne, Eike; Potttratz, Ines; Seidel-Morgenstern, Andreas**

Process control and yield enhancement of the galactooligosaccharide formation  
Chemie - Ingenieur - Technik: CIT - Weinheim: Wiley-VCH Verl, Bd. 90.2018, 5, S. 725-730;

**Muth, Thilo; Kohrs, Fabian; Heyer, Robert; Benndorf, Dirk; Rapp, Erdmann; Reichl, Udo; Martens, Lennart; Renard, Bernhard Y.**

MPA portable - a stand-alone software package for analyzing metaproteome samples on the go  
Analytical chemistry: the authoritative voice of the analytical community - Columbus, Ohio: American Chemical Society, Bd. 90.2018, 1, S. 685-689;

**Müller, Daniel; Bück, Andreas; Tsotsas, Evangelos**

Influence of separation properties and processing strategies on product characteristics in continuous fluidized bed spray granulation

Powder technology: an international journal on the science and technology of wet and dry particulate systems - Amsterdam [u.a.]: Elsevier Science, Bd. 342.2019, S. 572-584, 2018;  
[Online first]

**Müller, Ines; Kiedorf, G; Runne, E.; Seidel-Morgenstern, Andreas; Hamel, Christof**

Synthesis, kinetic analysis and modelling of galacto-oligosaccharides formation  
Chemical engineering research and design: CERD - Amsterdam: Elsevier, Bd. 130.2018, 02, S. 154-166;  
[Imp.fact.: 2.538]

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

Influence of thermal conditions on particle properties in fluidized bed layering granulation

Processes: open access journal - Basel: MDPI, Vol. 6.2018, 12, Artikel 235;  
[Imp.fact.: 1.279]

**Nguyen, Duy; Rimmelgas, Johan; Björn, Ingela Niklasson; Wachem, Berend; Thalberg, Kyrre**

Towards quantitative prediction of the performance of dry powder inhalers by multi-scale simulations and experiments

International journal of pharmaceutics - New York, NY [u.a.]: Elsevier, Bd. 547.2018, 1, S. 31-43;  
[Imp.fact.: 3.649]

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

Improvement of electrospray stability in negative ion mode for nano-PGC-LC-MS glycoanalysis via post-column make-up flow

Glycoconjugate journal: official journal of the International Glycoconjugate Organization - Dordrecht [u.a.]: Springer Science + Business Media B.V, Bd. 35.2018, 6, S. 499-509;

**Nikolay, Alexander; Castilho, Leda R.; Reichl, Udo; Genzel, Yvonne**

Propagation of Brazilian Zika virus strains in static and suspension cultures using Vero and BHK cells  
Vaccine - Amsterdam: Elsevier, Bd. 36.2018, 22, S. 3140-3145;

**Nikolay, Alexander; Léon, Arnaud; Schwamborn, Klaus; Genzel, Yvonne; Reichl, Udo**

Process intensification of EB66<sup>®</sup> cell cultivations leads to high-yield yellow fever and Zika virus production  
Applied microbiology and biotechnology - Berlin: Springer, Bd. 102.2018, 20, S. 8725-8737;

**Pashminehazar, Reihaneh; Ahmed, Syed Jawwad; Kharaghani, Abdolreza; Tsotsas, Evangelos**

Spatial morphology of maltodextrin agglomerates from X-ray microtomographic data - real structure evaluation vs. spherical primary particle model

Powder technology: an international journal on the science and technology of wet and dry particulate systems - Amsterdam [u.a.]: Elsevier Science, Bd. 331.2018, S. 204-217;

**Pashminehazar, Reihaneh; Kharaghani, Abdolreza; Tsotsas, Evangelos**

Determination of fractal dimension and prefactor of agglomerates with irregular structure  
Powder technology: an international journal on the science and technology of wet and dry particulate systems - Amsterdam [u.a.]: Elsevier Science, Bd. 343.2019, S. 765-774, 2018;  
[First online]  
[Imp.fact.: 3.23]

**Pioch, Markus; Hoffmann, Marcus; Prahlow, Alexander; Reichl, Udo; Rapp, Erdmann**

glyXtoolMS - an open-source pipeline for semiautomated analysis of glycopeptide mass spectrometry data  
Analytical chemistry: the authoritative voice of the analytical community - Columbus, Ohio: American Chemical Society, Bd. 90.2018, 20, S. 11908-11916;

**Pischel, Dennis; Buchbinder, Jörn Holger; Sundmacher, Kai; Lavrik, Inna N.; Flassig, Robert J.**

A guide to automated apoptosis detection - how to make sense of imaging flow cytometry data  
PLOS ONE - San Francisco, California, US: PLOS, Vol. 13.2018, 5, Art. e0197208, insgesamt 17 S.;  
[Imp.fact.: 2.766]

**Qamar, Shamsul; Kiran, Nadia; Anwar, Talha; Bibi, Sameena; Seidel-Morgenstern, Andreas**

Theoretical investigation of thermal effects in an adiabatic chromatographic column using a lumped kinetic model incorporating heat transfer resistances  
Industrial & engineering chemistry research - Columbus, Ohio: American Chemical Society, Bd. 57.2018, 6, S. 2287-2297;

**Radeva, Zheni; Lukas, Eduard; Aman, Sergej**

Influence of the pelletizing process parameters on the breakage behaviour of the received alumina oxide pellets  
Granular matter - Berlin: Springer, Vol. 20.2018, 2, Art. 23, insgesamt 23 S.;

**Rexer, Thomas F. T.; Schildbach, Anna; Klapproth, Jan; Schierhorn, Angelika; Mahour, Reza; Pietzsch, Markus; Rapp, Erdmann; Reichl, Udo**

One pot synthesis of GDP-mannose by a multi-enzyme cascade for enzymatic assembly of lipid-linked oligosaccharides  
Biotechnology & bioengineering - New York, NY [u.a.]: Wiley, Bd. 115.2018, 1, S. 192-205;  
[Online first]

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

Monte Carlo modeling of binderless spray agglomeration in fluidized beds  
AIChE journal - Hoboken, NJ: Wiley, Bd. 64.2018, 10, S. 3582-3594;  
[Imp.fact.: 3.326]

**Roloff, Christoph; Lukas, Eduard; Wachem, Berend; Thévenin, Dominique**

Particle dynamics investigation by means of shadow imaging inside an air separator  
Chemical engineering science - Amsterdam [u.a.]: Elsevier Science, 2018;  
[Online first]  
[Imp.fact.: 3.306]

**Rüdiger, D.; Kupke, S. Y.; Reichl, Udo**

A multiscale model of influenza A virus replication covering highly different infection conditions in cell cultures  
IFAC-PapersOnLine - Frankfurt: Elsevier, Bd. 51.2018, 19, S. 32-33;  
[Konferenz: 7th Conference on Foundation of Systems Biology in Engineering, FOSBE 2018, Chicago, Illinois, USA, 05-08 August 2018]

**Sadegh-Vaziri, Ramiar; Ludwig, Kristin; Sundmacher, Kai; Babler, Matthias U.**

Mechanisms behind overshoots in mean cluster size profiles in aggregation-breakup processes  
Journal of colloid and interface science: JCIS - Amsterdam [u.a.]: Elsevier, Bd. 528.2018, S. 336-348;

**Schack, Dominik; Rihko-Struckmann, Liisa; Sundmacher, Kai**

Linear programming approach for structure optimization of renewable-to-chemicals (R2Chem) production networks  
Industrial & engineering chemistry research - Columbus, Ohio: American Chemical Society, Bd. 57.2018, 30, S. 9889-9902;

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

Kinetic modeling of methanol synthesis from renewable resources

Chemical engineering science - Amsterdam [u.a.]: Elsevier Science, Bd. 175.2018, S. 130-138;  
[Imp.fact.: 2.895]

**Shen, Li; Denner, Fabian; Morgan, Neal; Wachem, Berend; Dini, Daniele**

Capillary waves with surface viscosity

Journal of fluid mechanics - Cambridge [u.a.]: Cambridge Univ. Press, Bd. 847.2018, S. 644-663;  
[Imp.fact.: 2.893]

**Sommerfeld, Martin; Lain, S.**

Stochastic modelling for capturing the behaviour of irregular-shaped non-spherical particles in confined turbulent flows

Powder technology: an international journal on the science and technology of wet and dry particulate systems - Amsterdam [u.a.]: Elsevier Science, Bd. 332.2018, S. 253-264;

**Sommerfeld, Martin; Muniz, Marcelo; Reichardt, Thomas**

On the importance of modelling bubble dynamics for point-mass numerical calculations of bubble columns

Journal of chemical engineering of Japan: JCEJ - Tokyo, Bd. 51.2018, 4, S. 301-317;

**Sommerfeld, Martin; Qadir, Z.**

Fluid dynamic forces acting on irregular shaped particles - simulations by the Lattice-Boltzmann method

International journal of multiphase flow - Oxford: Pergamon Press, Bd. 101.2018, S. 212-222;

**Sondej, Franziska; Peglow, Mirko; Bück, Andreas; Tsotsas, Evangelos**

Experimental investigation of the morphology of salt deposits from drying sessile droplets by whitelight interferometry

AIChE journal - Hoboken, NJ: Wiley, Bd. 64.2018, 6, S. 2002-2016;

**Trüe, Michael; Aman, Sergej; Müller, Peter; Hintz, Werner; Hirsch, Sören**

Herstellung von mehrschichtigem Graphen in einer Scheibenschwingmühle

Chemie - Ingenieur - Technik: CIT - Weinheim: Wiley-VCH Verl, Bd. 90.2018, 4, S. 533-539;

**Trüe, Michael; Böttcher, Ronny; Faßhauer, Oliver; Aman, Sergej; Wachem, Berend; Müller, Peter**

Comparison of measurement systems for free fall tests and calculations of the coefficient of restitution

Measurement science and technology: devoted to the theory, practice and application of measurement in physics, chemistry, engineering and the environmental and life sciences from inception to commercial exploitation - Bristol: IOP Publ, Vol. 29.2018, 10, Art. 105403, insgesamt 14 S.;

[Imp.fact.: 1.685]

**Vodovnik, Maa; Vrabec, Katja; Hellwig, Patrick; Benndorf, Dirk; Seun, Mija; Gregori, Andrej; Gottumukkala, Lalitha D.; Anderson, Robin C.; Reichl, Udo**

Valorisation of deinking sludge as a substrate for lignocellulolytic enzymes production by *Pleurotus ostreatus*

Journal of cleaner production - Amsterdam [u.a.]: Elsevier Science, Vol. 197.2018, Part 1, S. 253-263;

**Vorhauer, Nicole; Tsotsas, Evangelos; Prat, Marc**

Drying of thin porous disks from pore network simulations

Drying technology: an international journal - Philadelphia, Pa: Taylor & Francis, Bd. 36.2018, 6, S. 651-663;

**Vorhauer, Nicole; Tsotsas, Evangelos; Prat, Marc**

Temperature gradient induced double stabilization of the evaporation front within a drying porous medium

Physical review fluids - College Park, MD: APS, Vol. 3.2018, 11, Artikel 114201, insgesamt 24 Seiten;

**Vu, Hong Thai; Tsotsas, Evangelos**

Mass and heat transport models for analysis of the drying process in porous media: a review and numerical implementation

International journal of chemical engineering - New York, NY [u.a.]: Hindawi Publ. Corp, Vol. 2018, Article ID 9456418, insgesamt 13 Seiten;

**Vázquez-Ramírez, Daniel; Genzel, Yvonne; Jordan, Ingo; Sandig, Volker; Reichl, Udo**

High-cell-density cultivations to increase MVA virus production  
Vaccine - Amsterdam: Elsevier, Bd. 36.2018, 22, S. 3124-3133;  
[Online first]  
[Imp.fact.: 3.235]

**Wang, MinHui; Wölfer, Christian; Otrin, Lado; Ivanov, Ivan; Vidakovi-Koch, Tanja; Sundmacher, Kai**

Transmembrane NADH oxidation with tetracyanoquinodimethane  
Langmuir - Washington, DC: ACS Publ, Bd. 34.2018, 19, S. 5435-5443;

**Weiss, Marian; Frohnmayer, Johannes Patrick; Benk, Lucia Theresa; Haller, Barbara; Janiesch, Jan-Willi; Heitkamp, Thomas; Börsch, Michael; Lira, Rafael B.; Dimova, Rumiana; Lipowsky, Reinhard; Bodenschatz, Eberhard; Baret, Jean-Christophe; Vidakovic-Koch, Tanja; Sundmacher, Kai; Platzman, Ilia; Spatz, Joachim P.**

Sequential bottom-up assembly of mechanically stabilized synthetic cells by microfluidics  
Nature materials - Basingstoke: Nature Publishing Group, Bd. 17.2018, S. 89-96;

**Wenzel, Lisa; Heyer, Robert; Schallert, Kay; Löser, Lucy; Wünschiers, Röbbbe; Reichl, Udo; Benndorf, Dirk**

SDSPAGE fractionation to increase metaproteomic insight into the taxonomic and functional composition of microbial communities for biogas plant samples  
Engineering in life sciences - Weinheim: Wiley-VCH, Bd. 18.2018, 7, S. 498-509;

**Wenzel, Marcus; Rihko-Struckmann, Liisa; Sundmacher, Kai**

Continuous production of CO from CO<sub>2</sub> by RWGS chemical looping in fixed and fluidized bed reactors  
The chemical engineering journal - Amsterdam: Elsevier, Bd. 336.2018, S. 278-296;  
[Imp.fact.: 6.216]

**Wrzosek, Katarzyna; Harriehausen, Isabel; Seidel-Morgenstern, Andreas**

Combination of enantioselective preparative chromatography and racemization - experimental demonstration and model-based process optimization  
Organic process research & development: web edition - Washington, DC: ACS Publ, Bd. 22.2018, 12, S. 1761-1771;

**Zhang, Lanyue; Weigler, Fabian; Idakiev, Vesselin; Jiang, Zhaochen; Mörl, Lothar; Mellmann, Jochen; Tsotsas, Evangelos**

Experimental study of the particle motion in flighted rotating drums by means of Magnetic Particle Tracking  
Powder technology: an international journal on the science and technology of wet and dry particulate systems - Amsterdam [u.a.]: Elsevier Science, Bd. 339.2018, S. 817-826;

**Zhang, Xiwei; Zhang, Enqi; Grigartzik, Lisa; Henrich-Noack, Petra; Hintz, Werner; Sabel, Bernhard A.**

Antiapoptosis function of PBCA nanoparticles containing caspase3 siRNA for neuronal protection  
Chemie - Ingenieur - Technik: CIT - Weinheim: Wiley-VCH Verl, Bd. 90.2018, 4, S. 451-455;  
[Imp.fact.: 1.1]

**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  
Journal of visualization - Berlin: Springer, Bd. 21.2018, 1, S. 5-17;  
[Imp.fact.: 0.971]

## NICHT BEGUTACHTETE ZEITSCHRIFTENAUFsätze

### **Benner, Peter; Seidel-Morgenstern, Andreas; Zuyev, Alexander**

Computation of periodic switching strategies for the optimal control of chemical reactors

ResearchGATE: scientific network : the leading professional network for scientists - Cambridge, Mass: ResearchGATE Corp, insges. 8 S., 2018;

[Konferenz: 14th International Conference "Dynamical Systems Theory and Applications" (DSTA 2017), At ód, Poland]

## BEGUTACHTETE BUCHBEITRäge

### **Bechtel, Simon; Song, Zhen; Zhou, Teng; Vidakovic-Koch, Tanja; Sundmacher, Kai**

Integrated process and ionic liquid design by combining flowsheet simulation with quantum-chemical solvent screening

Computer aided chemical engineering - Amsterdam [u.a.]: Elsevier, Bd. 44.2018, S. 2167-2172;

[Symposium: 13th International Symposium on Process Systems Engineering, PSE 2018]

### **Dancker, Jonte; Wolter, Martin; Rosberg, Jari; Tsotsas, Evangelos**

Increasing self-sufficiency in a micro grid - integrated vs. non-integrated energy system approach

2018 53rd International Universities Power Engineering Conference (UPEC): 4th-7th September 2018, Glasgow, United Kingdom : proceedings - [Piscataway, NJ]: IEEE, insges. 6 S.;

[Kongress: 53rd International Universities Power Engineering Conference (UPEC) , Glasgow, UK, 4-7 September 2018]

### **Du, Jiajie; Bück, Andreas; Tsotsas, Evangelos**

Investigation of spray agglomeration process in continuously operated horizontal fluidized bed

IDS 2018: 21st International Drying Symposium : proceedings ; September, 2018, València, Spain - València, Spain: Universitat, S. 1855-1862;

[Konferenz: IDS 2018]

### **Golovin, Ivgen; Strenzke, Gerd; Wegner, Maximilian; Palis, Stefan; Bück, Andreas; Kienle, Achim; Tsotsas, Evangelos**

Parameter identification for continuous fluidized bed spray agglomeration

6th International Conference on Population Balance Modelling: PBM 2018 ; Conference proceedings ; Ghent, Belgium, May 6 - 9, 2018 - Ghent, Belgium: Ghent University, insges. 4 S.;

[Konferenz: PBM 2018, Ghent, Belgium, 6 - 9 May]

### **Janki, Atin; Zoun, Roman; Schallert, Kay; Ravindran, Rohith; Broneske, David; Fenske, Wolfram; Heyer, Robert; Benndorf, Dirk; Saake, Gunter**

Connecting X! Tandem to a database management system

CEUR workshop proceedings - Aachen: RWTH, Bd. 2126.2018, S. 77-82;

[Workshop: 30th GI-Workshop Grundlagen von Datenbanken, Wuppertal, Germany, May 22-25, 2018]

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

CFD model-supported design of monodisperse co-current spray dryers

IDS 2018: 21st International Drying Symposium : proceedings ; September, 2018, València, Spain - València, Spain: Universitat, S. 213-220;

[Konferenz: IDS 2018]

### **Jiang, Zaochen; Rieck, Christian; Bück, Andreas; Tsotsas, Evangelos**

Modeling of particle behavior in a Wurster fluidized bed - coupling CFD-DEM with Monte Carlo

IDS 2018: 21st International Drying Symposium : proceedings ; September, 2018, València, Spain - València, Spain: Universitat, S. 205-212;

[Konferenz: IDS 2018]

### **Liesche, Georg; Schack, Dominik; Rätze, Karsten Hans Georg; Sundmacher, Kai**

Thermodynamic network flow approach for chemical process synthesis

Computer aided chemical engineering - Amsterdam [u.a.]: Elsevier, Bd. 43.2018, S. 881-886;

[Symposium: 28th European Symposium on Computer Aided Process Engineering, Graz, Austria, 10-13 June 2018]

**Lu, Xiang; Kharaghani, Abdolreza; Tsotsas, Evangelos**

Dependency of continuum model parameters on the spatially correlated pore structure studied by pore-network drying simulations

IDS 2018: 21st International Drying Symposium : proceedings ; September, 2018, València, Spain - València, Spain: Universitat, S. 307-314;

[Konferenz: IDS 2018]

**McBride, Kevin; Linke, Steffen; Xu, Shuang; Sundmacher, Kai**

Computer aided design of green thermomorphic solvent systems for homogeneous catalyst recovery

Computer aided chemical engineering - Amsterdam [u.a.]: Elsevier, Bd. 44.2018, S. 1783-1788;

[Symposium: 13th International Symposium on Process Systems Engineering, PSE 2018]

**Mencke, Nicole; Vorndran, Markus; Vorhauer, Nicole; Tsotsas, Evangelos**

Virtual reality-based training system for complex engineering processes on the example of a fractionating column

EDULEARN18: 10th International Conference on Education and New Learning Technologies, Palma de Mallorca (Spain), 2nd-4th of July, 2018 : conference proceedings - [Valencia, Spain]: IATED Academy, insges. 10 S.;

[Konferenz: EDULEARN18]

**Mielke, Lisa; Bück, Andreas; Tsotsas, Evangelos**

Multi-zone & multi-compartment model for dynamic simulation of horizontal fluidized bed granulator

IDS 2018: 21st International Drying Symposium : proceedings ; September, 2018, València, Spain - València, Spain: Universitat, S. 123-130;

[Konferenz: IDS 2018]

**Müller, Daniel; Bück, Andreas; Tsotsas, Evangelos**

Heat and mass transfer modelling of continuous Wurster spray granulation with external product classification

IDS 2018: 21st International Drying Symposium : proceedings ; September, 2018, València, Spain - València, Spain: Universitat, S. 1383-1390;

[Konferenz: IDS 2018]

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

Influence of thermal conditions on particle properties in fluidized bed layering granulation

6th International Conference on Population Balance Modelling: PBM 2018 ; Conference proceedings ; Ghent, Belgium, May 6 - 9, 2018 - Ghent, Belgium: Ghent University, insges. 8 S.;

[Konferenz: PBM 2018, Ghent, Belgium, 6 - 9 May]

**Pham, Thai Son; Chareyre, B.; Tsotsas, Evangelos; Kharaghani, Abdolreza**

A pore-scale study on the drying kinetics and mechanical behavior of particle aggregates

IDS 2018: 21st International Drying Symposium : proceedings ; September, 2018, València, Spain - València, Spain: Universitat, S. 245-252;

[Konferenz: IDS 2018]

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

Discrete modeling of ion transport and crystallization in layered porous media during drying

IDS 2018: 21st International Drying Symposium : proceedings ; September, 2018, València, Spain - València, Spain: Universitat, S. 299-306;

[Konferenz: IDS 2018]

**Seidel, Carsten; Jörke, Andreas; Vollbrecht, Bert; Seidel-Morgenstern, Andreas; Kienle, Achim**

Kinetic modeling of methanol synthesis - impact of catalyst deactivation

Computer aided chemical engineering - Amsterdam [u.a.]: Elsevier, Bd. 43.2018, S. 85-90;

[Symposium: 28th European Symposium on Computer Aided Process Engineering, Graz, Austria, 10-13 June 2018]

**Strenzke, Gerd; Golovin, Ievgen; Wegner, M.; Palis, Stefan; Bück, Andreas; Kienle, Achim; Tsotsas, Evangelos**

Influence of drying conditions on process properties and parameter identification for continuous fluidized bed spray agglomeration

IDS 2018: 21st International Drying Symposium : proceedings ; September, 2018, València, Spain - València, Spain: Universitat, S. 579-586;

[Konferenz: IDS 2018]

**Tsotsas, Evangelos**

Wärmeleitfähigkeit von Schütttschichten  
VDI-Wärmeatlas - Wiesbaden: Springer, insges. 13 S., 2018;  
[Dies ist ein Kapitel der 12. Auflage des VDI-Wärmeatlas.]

**Tsotsas, Evangelos**

Wärmeleitung und Dispersion in durchströmten Schüttungen  
VDI-Wärmeatlas - Wiesbaden: Springer, insges. 20 S., 2018;  
[Dies ist ein Kapitel der 12. Auflage des VDI-Wärmeatlas.; First online]

**Tsotsas, Evangelos**

Wärmeübergang in Wirbelschichten  
VDI-Wärmeatlas - Wiesbaden: Springer, insges. 12 S., 2018;  
[Dies ist ein Kapitel der 12. Auflage des VDI-Wärmeatlas.; First online]

**Tsotsas, Evangelos**

Wärmeübergang von einer Heizfläche an ruhende oder mechanisch durchmischte Schüttungen  
VDI-Wärmeatlas - Wiesbaden: Springer, insges. 21 S., 2018;  
[Dies ist ein Kapitel der 12. Auflage des VDI-Wärmeatlas.; First online]

**Vorhauer, Nicole; Först, Petra; Schuchmann, Harald; Tsotsas, Evangelos**

Pore network model of primary freeze drying  
IDS 2018: 21st International Drying Symposium : proceedings ; September, 2018, València, Spain - València, Spain: Universitat, S. 221-228;  
[Konferenz: IDS 2018]

**Zhang, Lanye; Weigler, Fabian; Jiang, Zaochen; Idakiev, Vesselin; Mörl, Lothar; Mellmann, Jochen; Tsotsas, Evangelos**

Investigation of 3D particle flow in a flighted rotating drum  
IDS 2018: 21st International Drying Symposium : proceedings ; September, 2018, València, Spain - València, Spain: Universitat, S. 253-260;  
[Konferenz: IDS 2018]

**Zoun, Roman; Durand, Gabriel; Schallert, Kay; Patrikar, Apoorva; Broneske, David; Fenske, Wolfram; Heyer, Robert; Benndorf, Dirk; Saake, Gunter**

Protein identification as a suitable application for fast data architecture  
Database and Expert Systems Applications: DEXA 2018 : International Workshops BDMICS, BIOKDD, and TIR Regensburg, Germany, September 3-6, 2018 : proceedings - Cham: Springer Nature Switzerland, S. 168-178 - (Communications in Computer and Information Science; 903);  
[Workshop: 9. International Workshop on Biological Knowledge Discovery from Data, BIOKDD, Regensburg, Germany, 03. - 06.09.2018]

**Zoun, Roman; Schallert, Kay; Janki, Atin; Ravindran, Rohith; Campero Durand, Gabriel; Fenske, Wolfram; Broneske, David; Heyer, Robert; Benndorf, Dirk; Saake, Gunter**

Streaming FDR calculation for protein identification  
New Trends in Databases and Information Systems: ADBIS 2018 Short Papers and Workshops, AI\*QA, BIGPMED, CSACDB, M2U, BigDataMAPS, ISTREND, DC, Budapest, Hungary, September, 2-5, 2018, Proceedings - Cham: Springer International Publishing, S. 80-87 - (Communications in Computer and Information Science; 909);  
[Konferenz: European Conference on Advances in Databases and Information Systems, ADBIS, Budapest, Hungary, September, 2-5, 2018]



## HERAUSGEBERSCHAFTEN

**Wolter, Martin; Beyrau, Frank; Tsotsas, Evangelos; Klabunde, Christian; Dancker, Jonte; Gast, Nicola; Schröter, Tamara; Schulz, Florian; Rossberg, Jari; Richter, André**

Intelligentes Multi-Energie-System (SmartMES) - Statusbericht der Otto-von-Guericke-Universität Magdeburg zum Verbundprojekt ; 1. Statusseminar 28. März 2018 in Magdeburg

Magdeburg: Otto-von-Guericke-Universität, 2018, XII, 159 Seiten, Illustrationen, Diagramme, 21 cm - (Res electricae Magdeburgenses; Band 74), ISBN 978-3-944722-69-6;

Kongress: Statusseminar 1 (Magdeburg : 2018.03.28) [Literaturangaben: Seite 150-159]

## ABSTRACTS

**Fond, Benoit; Xiao, Cheng; Abram, Christopher; T'Joen, Christophe; Wachem, Berend; Beyrau, Frank**

Phosphor thermometry for the validation of computational fluid dynamics simulations of heat transfer in compressible real-gas flows

Inaugural International Conference on Phosphor Thermometry: July 25th -27th, 2018, Technology and Innovation Centre, University of Strathclyde, Glasgow, Scotland - Glasgow;

[Konferenz: Inaugural International Conference on Phosphor Thermometry, IGET 2018, Glasgow, Scotland, July 25th -27th, 2018]

**Ojo, Anthony; Fond, Benoit; Abram, Christopher; Wachem, Berend; Heyes, Andrew; Beyrau, Frank**

Simultaneous measurements of the thermal and velocity boundary layer over a heated flat plate using thermographic laser Doppler velocimetry

Inaugural International Conference on Phosphor Thermometry: July 25th -27th, 2018, Technology and Innovation Centre, University of Strathclyde, Glasgow, Scotland - Glasgow;

[Konferenz: Inaugural International Conference on Phosphor Thermometry, IGET 2018, Glasgow, Scotland, July 25th -27th, 2018]

## DISSERTATIONEN

**Aydin, Erdal; Sundmacher, Kai [GutachterIn]; Sager, Sebastian [GutachterIn]**

Tailored indirect algorithms for efficient on-line optimization of batch and semi-batch processes

Magdeburg, 2018, xx, 119 Seiten, Tabellen, Diagramme;

[Literaturverzeichnis: Seite 107-113]

**Birth, Torsten; Seidel-Morgenstern, Andreas [GutachterIn]; Hamel, Christof [GutachterIn]; Caro, Jürgen [GutachterIn]**

Aufbereitung biogener und reststoffbasierter Gase - Untersuchung der trockenen Reformierung

Barleben: docupoint Verlag, 2018, IV, 223 Seiten, Diagramme, Illustrationen, 21 cm, 978-3-86912-142-6;

[Literaturverzeichnis: Seite 173-186]

**Buchholz, Hannes; Seidel-Morgenstern, Andreas [GutachterIn]**

Solid-liquid phase equilibria of chiral molecules - theory and experiment

Magdeburg, 2018, xi, 171 Seiten, Diagramme, 30 cm;

[Literaturverzeichnis: Seite 136-152]

**Eisenschmidt, Holger; Sundmacher, Kai [GutachterIn]**

A cyclic growth-dissolution process for the controlled manipulation of crystal shape distributions

Magdeburg, 2018, x, 119 Seiten, Illustrationen, Diagramme, 30 cm;

[Literaturverzeichnis: Seite 104-114]

**Farid, Muhammad Usman; Tsotsas, Evangelos [GutachterIn]; Bück, Andreas [GutachterIn]**

CFD modeling of combustion of solid waste materials with low melting points

Magdeburg, 2018, xii, 204 Blätter, Illustrationen, Diagramme, 30 cm;

[Literaturverzeichnis: Blatt 163-173]

**Jörke, Andreas**

Mechanisms and kinetics of petro- and oleochemicals in complex hydroformylation reaction networks  
Aachen: Shaker Verlag, 2018, [1. Auflage], xi, 145 Seiten, Seite xiii-xxxvii, 41 Illustrationen, Diagramme, 21 cm, 262 g - (Forschungsberichte aus dem Max-Planck-Institut für Dynamik Komplexer Technischer Systeme; Band 50), ISBN 978-3-8440-6059-1

**Khalid, Muhammad Kamran; Wachem, Berend [GutachterIn]; Scheffler, Franziska [GutachterIn]**

Processing and characterization of tailor-made superparamagnetic iron oxide nanoparticles (SPIO-NPs) for pharmaceutical applications  
Magdeburg, 2018, xx, 158 Seiten, Illustrationen, Tabellen, Diagramme;  
[Literaturverzeichnis: Seite 131-153]

**Kiedorf, Gregor; Seidel-Morgenstern, Andreas [GutachterIn]**

Mechanistic and kinetic analysis of homogeneously and heterogeneously catalyzed reactions  
Aachen: Shaker, 2018, 1. Auflage, xi, 189 Seiten, Illustrationen, Diagramme, 21 cm, 302 g - (Forschungsberichte aus dem Max-Planck-Institut für Dynamik komplexer technischer Systeme; Band 49), ISBN 978-3-8440-5768-3;  
[Literaturverzeichnis: Seite 147-161]

**Radicke, Susann; Scheffler, Franziska [GutachterIn]; Seidel-Morgenstern, Andreas [GutachterIn]**

Entwicklung und Testung modifizierter photokatalytisch aktiver TiO<sub>2</sub>-Beschichtungen für Glasformkörper  
Magdeburg, 2018, XXV, 198 Seiten, Illustrationen, Tabellen, Diagramme, 30 cm;  
[Im Titel ist "2" tiefgestellt; Literaturverzeichnis: Seite 169-179]

**Reichardt, Thomas**

Multiscale Euler/Lagrange approach to simulate finite-sized solid particles and bubbles as well as numerical and experimental studies to improve the modeling of complex bubble motion  
Aachen: Shaker Verlag, 2018, 1. Auflage, viii, 284 Seiten, Illustrationen, Diagramme, 21 cm, 447 g - (Berichte aus der Strömungstechnik), ISBN 978-3-8440-6013-3

**Schmidt, Martin; Tsotsas, Evangelos [GutachterIn]; Kienle, Achim [GutachterIn]**

Process dynamics and structure formation in continuous spray fluidized bed processes  
Magdeburg, 2018, XVII, 150 Seiten, Illustrationen, Diagramme, 24 cm;  
[Literaturverzeichnis: Seite 129-137]

**Schwenke, Christian; Tsotsas, Evangelos [AkademischeR BetreuerIn]; Schulze, Dietmar [AkademischeR BetreuerIn]; Katterfeld, André [AkademischeR BetreuerIn]**

Modellierung und experimentelle Validierung des Schwerkraftaustrags ultrafeiner kohäsiver Pulver  
Barleben: docupoint Verlag, 2018, IX, 215 Seiten, Seite X-XX, Illustrationen, Diagramme, 21 cm, ISBN 978-3-86912-153-6;  
[Literaturverzeichnis: Seite 211-215]

**Voigt, Nadine; Wachem, Berend [GutachterIn]; Sabel, Bernhard A. [GutachterIn]**

Evaluierung pharmakokinetischer und toxikologischer Determinanten von Nanopartikeln mittels in vivo Neuroimaging  
Magdeburg, 2018, XIV, 111 Blätter, Illustrationen, Diagramme, 30 cm;  
[Literaturverzeichnis: Blatt 87-96]

**Wenzel, Marcus; Sundmacher, Kai [GutachterIn]**

Reverse water-gas shift chemical looping for syngas production from CO<sub>2</sub>  
Magdeburg, 2018, xviii, 149 Seiten, 30 cm;  
[Im Titel ist "2" tiefgestellt; Literaturverzeichnis: Seite 129-141]

**Zhang, Xiwei; Wachem, Berend [GutachterIn]; Sabel, Bernhard A. [GutachterIn]**

In vitro and in vivo caspase-3 knock down by poly (butyl cyanoacrylate) nanoparticle-based RNA interference  
Magdeburg, 2018, ix, 95 Blätter, Illustrationen, Diagramme, 30 cm;  
[Literaturverzeichnis: Blatt 78-88]