

PROGRAMM

5. – 7. Oktober 2016
Technische Universität Kaiserslautern

Thermodynamik-Kolloquium 2016

www.processnet.org/Thermodynamik2016



Mittwoch, 5. Oktober 2016

Raum: 52/204

11:00 **WATT-Sitzung**13:00 **Registrierung mit Snacks zum Mittagessen**

Raum: 52/207

13:30 **Begrüßung durch die Vorsitzenden und Verleihung des WATT-Preises**
H. Hasse, TU Kaiserslautern; B. Atakan, Universität Duisburg-Essen*Chair: K. Schaber, KIT, Karlsruhe*14:00 **PLENARVORTRAG****Anwendungen der Dichtefunktionaltheorie in der Trenntechnik**
S. Enders, KIT, Institut für Technische Thermodynamik, Karlsruhe14:45 **PLENARVORTRAG****Power-to-what? – Über die Nutzung von Überschuss-Strom**
A. Bardow, RWTH Aachen, Lehrstuhl für Technische Thermodynamik15:30 **Kaffeepause****Parallelsitzungen**

Raum: 52/207

MODELLIERUNG I*Chair: J. Vrabec, Universität Paderborn*16:00 **Vergleich der Dichtegradiententheorie und der Dichtefunktionaltheorie zur Bestimmung von Grenzflächeneigenschaften**
J. Mairhofer; J. Gross; Universität Stuttgart16:25 **Berechnung der Adsorption von Isomeren**P. Zimmermann¹; T. Goetsch²; T. Zeiner²; S. Enders¹; ¹ KIT, Karlsruhe; ² TU Dortmund16:50 **Berechnung von Fluid-Phasengleichgewichten mittels Differentialgleichungen**U. Deiters¹; S. Quiñones-Cisneros²; ¹ Universität zu Köln, Köln; ² Universidad Nacional Autónoma de México, Mexico City/MEX17:15 **Multi-criteria optimization for parameterization of equations of state (Multikriterielle Optimierung zur Parametrierung von Zustandsgleichungen)**E. Forte¹; J. Burger²; K. Langenbach²; M. Bortz³; H. Hasse²; ¹ Lehrstuhl für Thermodynamik, TU Kaiserslautern, ² Laboratory of Engineering Thermodynamics (LTD), University of Kaiserslautern, ³ Fraunhofer Institute for Industrial Mathematics (ITWM), Kaiserslautern18:00 **POSTERPARTY**

Mittwoch, 5. Oktober 2016

Parallelsitzungen

Raum: 52/206

ENERGIETECHNISCHE GRUNDLAGEN*Chair: S. Kabelac, Universität Hannover*16:00 **Die selbstverdichtende Verbrennung – ein Ansatz für eine effizientere Energieproduktion**
R. Krieger Fraunhofer IKTS, Hermsdorf16:25 **Der Wärmeübertragung ein Schnippchen schlagen – Energiespeicherung und Wärmetransformation mit thermochemischen Systemen am Beispiel von SrBr₂**
J. Stengler; M. Linder; Deutsches Zentrum für Luft- und Raumfahrt (DLR), Stuttgart16:50 **Thermo-ökonomisches Design von Prozess und Arbeitsmittel für Organic Rankine Cycles mit PC-SAFT**J. Schilling¹; D. Tillmanns¹; M. Lampe¹; M. Hopp²; J. Gross²; A. Bardow¹; ¹ Lehrstuhl für Technische Thermodynamik, RWTH Aachen University, Aachen; ² Institut für Technische Thermodynamik und Thermische Verfahrenstechnik, Universität Stuttgart17:15 **Entwicklung eines thermodynamischen Prozessbewertungsmodells für die Gießereiindustrie**

K. Doschek; H. Raupenstrauch; D. Egger; M. Rauter; Z. Raonic; Montanuniversität Leoben, Leoben/A

18:00 **POSTERPARTY**

Donnerstag, 6. Oktober 2016

Parallelsitzungen

Raum: 52/207

MOLEKULARE THERMODYNAMIK I

Chair: J. Gross, Universität Stuttgart

- 09:00 **Molecular Simulation of Activities in Electrolyte Solutions**
M. Kohns; S. Reiser; M. Horsch; H. Hasse; TU Kaiserslautern, Lehrstuhl für Thermodynamik (LTD), Kaiserslautern
- 09:25 **Atomistic Simulations of the Vapor-Liquid Equilibria of Mixtures of Alcohols and Ionic Liquids**
D. Kerlé¹; E. Maginn²; B. Rathke¹; J. Kiefer¹; ¹ Universität Bremen; ² University of Notre Dame/USA
- 09:50 **Mass Diffusivities in Binary Mixtures of Ionic Liquids with Dissolved Gases**
T. Koller; M. Rausch; A. Fröba; Professur für Advanced Optical Technologies - Thermophysical Properties, Erlangen Graduate School in Advanced Optical Technologies (SAOT) und Department für Chemie- und Bioingenieurwesen (CBI), Universität Erlangen-Nürnberg, Erlangen
- 10:15 **Diffusionskoeffizienten in binären und ternären flüssigen Mischungen aus molekularer Simulation**
T. Janzen; G. Guevara-Carrión; Y. Muñoz Muñoz; J. Vrabec; Lehrstuhl für Thermodynamik und Energietechnik, Universität Paderborn
- 10:40 Kaffeepause

BIOTHERMODYNAMIK

Chair: I. Smirnova, TU Hamburg-Harburg

- 11:10 **Happily Coupled: Classic Thermodynamics and Quantum Chemistry for Life Science**
S. Verevkin¹; V. Emel'Yanenko¹; M. Voges²; G. Sadowski²; C. Held²; ¹ University of Rostock, ² Technische Universität Dortmund
- 11:35 **Einfluss von Additiven auf gleichgewichtlimitierte enzymatische Reaktionen**
M. Voges; C. Held; Lehrstuhl für Thermodynamik, Fakultät BCI, TU Dortmund
- 12:00 **Quantitative Vorhersage des Flüssig-Flüssig Gleichgewichts in biobasierten Systemen mit der Associating Lattice Cluster Theory**
K. Langenbach¹; A. Fröscher¹; E. von Harbou¹; W. Thiel²; H. Hasse¹; ¹ TU Kaiserslautern, Lehrstuhl für Thermodynamik (LTD), Kaiserslautern; ² TU Kaiserslautern, Lehrstuhl Anorganische Chemie, Kaiserslautern
- 12:25 **Stark Eutektische Lösungsmittel in der Flüssig-Flüssig Chromatographie**
F. Bezold; S. Röhrer; M. Minceva; Technische Universität München, Biothermodynamik, Freising
- 12:50 Mittagspause in der Mensa

Donnerstag, 6. Oktober 2016

Parallelsitzungen

Raum: 52/206

OPTISCHE VERFAHREN UND STOFFDATEN

Chair: D. Brüggemann, Universität Bayreuth

- 09:00 **Entwicklung eines Sensorkonzepts zur Messung der Dampfdrucke mittels Schwingungsspektroskopie**
S. Stephan¹; W. Uffrecht²; M. Raddatz²; W. Hartmann³; ¹ TU Dresden, ² TU Dresden, ³ Bruker Optik GmbH, Ettlingen
- 09:25 **Multi-Parameter Analyse unter motorischen Randbedingungen mittels Superkontinuum-Absorptionsspektroskopie**
P. Fendt; T. Werblinski; L. Zigan; S. Will; Lehrstuhl für Technische Thermodynamik, FAU Erlangen
- 09:50 **Einfluss von Nichtidealitäten auf die Beschreibung von LOHC-Prozessen**
P. Adametz; K. Müller; W. Arlt; Friedrich-Alexander-Universität Erlangen-Nürnberg (FAU), Erlangen
- 10:15 **Messung und Berechnung von Tieftemperatur-Phasengleichgewichten für kryogene Gemischkältekreisläufe**
T. Kochenburger¹; I. Tratschitt¹; S. Grohmann²; ¹ Institut für Technische Thermodynamik und Kältetechnik (ITTK), Karlsruher Institut für Technologie (KIT), Karlsruhe; ² Institut für Technische Thermodynamik und Kältetechnik (ITTK) und Institut für Technische Physik (ITEP), Karlsruher Institut für Technologie (KIT), Karlsruhe und Eggenstein-Leopoldshafen
- 10:40 Kaffeepause

PROZESSANALYSE I - THERMISCHE PROZESSE

Chair: B. Atakan, Universität Duisburg-Essen

- 11:10 **Betriebscharakteristik eines Absorptionswärmeförderators mit einem Gemisch aus Wasser und Ionischer Flüssigkeit**
M. Bücherl, N. Merkel, M. Zimmermann, M. Nava, K. Schaber; Institut für Technische Thermodynamik und Kältetechnik (ITTK), Karlsruher Institut für Technologie (KIT)
- 11:35 **Ein modifizierter solarthermischer Kreisprozess mit volumetrisch absorbierendem Arbeitsfluid**
S. Kabelac; J. Eggers; Leibniz Universität Hannover, Institut für Thermodynamik, Hannover
- 12:00 **Kinetik und Thermodynamik der Dehydrierung von chemischen Wasserstoffspeichern**
N. Heublein¹; J. Fochler²; Y. Incedag²; T. Sattelmayer²; ¹ Technische Universität München, Garching; ² Technische Universität München, Lehrstuhl für Thermodynamik, Garching
- 12:25 **Experimentelle Untersuchungen zur Auslegung von Spannungsverdampern**
S. Mall-Gleißle¹; J. Stengler²; K. Schaber³; ¹ Hochschule Offenburg, ² Deutsches Zentrum für Luft- und Raumfahrt (DLR), Stuttgart; ³ Karlsruhe Institute of Technology (KIT), Karlsruhe
- 12:50 Mittagspause in der Mensa

Donnerstag, 6. Oktober 2016

Parallelsitzungen

Raum: 52/207

INDUSTRIELLE THERMODYNAMIK

Chair: R. Dohrn, BTS Leverkusen

- 14:00 **Hierarchisch model-basierte Entrainersuche für die Trennung von Zwei- und Dreistoffsystem mittels COSMO-RS**
A. Klein¹; C. Täschler¹; A. Hirsch²; C. Jens²; A. Bardow²; K. Leonhard²; ¹ Lonza AG, Visp/CH; ² RWTH Aachen
- 14:25 **Accounting for uncertainties of thermodynamic data in modeling and process simulation**
J. Burger¹; N. Asprion²; S. Blagov²; M. Bortz³; E. von Harbou¹; H. Hasse¹; ¹ TU Kaiserslautern, Kaiserslautern; ² BASF SE, Chemical and Process Engineering, Ludwigshafen; ³ Fraunhofer ITWM, Kaiserslautern
- 14:50 **Thermodynamik in Qatar**
M. Kleiber; thyssenkrupp Industrial Solutions AG, Bad Soden
- 15:15 **Die Butadienextraktion – eine komplexe Thermodynamik in der Anwendung**
M. Arndt; Evonik Technology & Infrastructure GmbH, Marl

15:40 Kaffeepause

MODELLIERUNG II

M. Kleiber, thyssenkrupp Industrial Solutions AG, Bad Soden

- 16:10 **Berechnung und Vorhersage von Fluid-Fluid-Phasengleichgewichten von Polyethylen-Lösungen**
C. Walowski; S. Enders; KIT, Karlsruhe
- 16:35 **Einfluss der Semikristallinität auf die Gaslöslichkeit in Polymeren**
M. Fischlschweiger¹; A. Danzer²; S. Enders²; K. Langenbach³; ¹ OTTRONIC GmbH, Fohnsdorf/A; ² Karlsruhe Institute of Technology (KIT), Karlsruhe; ³ TU Kaiserslautern
- 17:00 **Nutzung der Elektronendichte zur quantenmechanischen Vorhersage von PCP-SAFT-Parametern**
S. Kaminski; K. Leonhard; Lehrstuhl für Technische Thermodynamik, RWTH Aachen University
- 17:25 **Ein neuer Ansatz für die Bestimmung der Vorhersagequalität von thermodynamischen Berechnungsmethoden**
A. Schedemann; J. Rarey; DDBST GmbH, Oldenburg
- 18:00 **Gemeinsame Geschäftssitzung der Thermodynamik-Fachgruppe und des VDI-GEU-Fachausschusses** (nicht öffentlich) Raum: 52/204
- 20:00 **Geselliger Abend im Brauhaus in der Gartenschau**
Forellenstr. 6, 67659 Kaiserslautern
(um Anmeldung wird gebeten, die Anreise erfolgt selbständig)

Donnerstag, 6. Oktober 2016

Parallelsitzungen

Raum: 52/206

PROZESSANALYSE II – MODELLENTWICKLUNG

Chair: S. Will, FAU Erlangen-Nürnberg

- 14:00 **CFD-basierte Untersuchung der Hochdruckgaseinblasung in Gasmotoren**
M. Theile; F. Dahms; M. Reißig; B. Buchholz; FVTR GmbH, Rostock
- 14:25 **Modellierung und Simulation eines Dual-Fuel Schiffsmotors mit Hilfe kombinierter 0/1- und 3-dimensionaler Ansätze**
S. Andree¹; J. Ritzke¹; J. Nocke¹; E. Hassel¹; M. Theile²; ¹ Lehrstuhl Technische Thermodynamik, Universität Rostock; ² FVTR GmbH, Rostock
- 14:50 **Bewertung von CO₂-Minderungspotentialen durch Power-to-Gas-Anlagen mittels dynamischer Systemsimulation**
L. Andresen; G. Schmitz; Technische Universität Hamburg-Harburg, Hamburg
- 15:15 **Ein reduziertes numerisches Modell zur Untersuchung des Energieeinsatzes beim Thermit®-Schweißen**
S. Manzke; I. Riehl; U. Gross; T. Fieback; Technische Universität Bergakademie Freiberg

15:40 Kaffeepause

MOLEKULARE THERMODYNAMIK II

Chair: S. Enders, KIT, Karlsruhe

- 16:10 **Transferierbare Kraftfelder (TAMie)– Individualisierung vieler Stoffe und Beschreibung von Mischungen**
D. Weidler; J. Groß; Universität Stuttgart
- 16:35 **Validierung biomolekularer Kraftfelder anhand von strukturellen und thermodynamischen Eigenschaften von Cyclodextrinen und ihren Komplexen**
J. Gebhardt; N. Hansen; Institut für Technische Thermodynamik und Thermische Verfahrenstechnik, Universität Stuttgart
- 17:00 **Molecular dynamics simulations of various micelles: Micelle size and structure influence on the prediction of micelle water partition equilibria using COSMOmic**
E. Ritter; D. Yordanova; T. Gerlach; I. Smirnova; S. Jakobtorweihen Institut für Thermische Verfahrenstechnik - TUHH, Hamburg
- 17:25 **Round Robin Study of Molecular Simulation Programs**
M. Schappals¹; A. Mecklenfeld²; L. Kröger³; V. Botan⁴; A. Köster⁵; S. Stephan¹; E. Garcia¹; G. Rutkai⁵; G. Raabe²; P. Klein⁶; K. Leonhard⁴; J. Vrabec⁵; H. Hasse¹; ¹ TU Kaiserslautern, ² Technische Universität Braunschweig, ³ Lehrstuhl für Technische Thermodynamik, Aachen; ⁴ RWTH Aachen, ⁵ Universität Paderborn, ⁶ Fraunhofer Institute for Industrial Mathematics (ITWM), Kaiserslautern
- 18:00 **Gemeinsame Geschäftssitzung der Thermodynamik-Fachgruppe und des VDI-GEU-Fachausschusses** (nicht öffentlich) Raum: 52/204
- 20:00 **Geselliger Abend im Brauhaus in der Gartenschau**
Forellenstr. 6, 67659 Kaiserslautern
(um Anmeldung wird gebeten, die Anreise erfolgt selbständig)

Freitag, 7. Oktober 2016

Parallelsitzungen

Raum: 52/207

KOMPLEXE SYSTEME

Chair: S. Verevkin, Universität Rostock

- 09:00 **Surfactant-free CO₂-based microemulsion-like systems**
S. Stehle, A. Bräuer; Friedrich-Alexander-Universität Erlangen-Nürnberg (FAU), Erlangen
- 09:25 **Protic Ionic Liquids: Mesoscopic Inhomogeneities in Solutions of Ethyl-Ammonium Nitrate and n-Alkyl Alcohols**
O. Russina¹; A. Triolo²; W. Schröder³; B. Rathke⁴; ¹ Dipartimento di Chimica, Università di Roma Sapienza, Rome/I; ² Istituto Struttura della Materia, Consiglio Nazionale delle Ricerche, Rome/I; ³ Institut für Anorganische und Physikalische Chemie, Universität Bremen; ⁴ Technische Thermodynamik, Universität Bremen
- 09:50 **Einfluss von relativer Luftfeuchte auf das Phasenverhalten pharmazeutischer Formulierungen**
C. Luebbert; G. Sadowski; Technische Universität Dortmund, Dortmund
- 10:15 **Experimentelle Untersuchung der Aktivität von Wasser in Pyrolyseölen**
Y. Ille¹; N. Dahmen¹; K. Schaber²; ¹ Institut für Katalysatorforschung und -technologie (IKFT), Karlsruher Institut für Technologie (KIT), Eggenstein-Leopoldshafen; ² Institut für Technische Thermodynamik und Kältetechnik (ITTK), Karlsruher Institut für Technologie (KIT), Karlsruhe
- 10:40 Kaffeepause

Raum: 52/207

Chair: G. Sadowski, TU Dortmund

- 11:10 **PLENARVORTRAG**
Stoffdurchgang in flüssig-flüssig Systemen
T. Zeiner, TU Dortmund
- 11:55 **PLENARVORTRAG**
Abschätzung des Phasenverhaltens von Proteinen in Bio-Pharmazeutischen Prozessen
C. Brandenbusch, TU Dortmund
- 12:40 **Abschluss und Preisverleihungen für den besten Vortrag und das beste Poster**
H. Hasse, TU Kaiserslautern; B. Atakan, Universität Duisburg-Essen
- 12:50 **Abschlussimbiss**

Freitag, 7. Oktober 2016

Parallelsitzungen

Raum: 52/206

PROZESSANALYSE III – KREISPROZESSE

Chair: A. Bardow, RWTH Aachen

- 09:00 **Thermodynamische Bewertung einer solarthermischen Erweiterung eines Geothermie-ORC-Kraftwerks**
F. Heberle¹; T. Eller²; M. Hofer²; D. Brüggemann²; ¹ Lehrstuhl für Technische Thermodynamik und Transportprozesse (LTTT), Zentrum für Energietechnik (ZET), Universität Bayreuth, ² Lehrstuhl für Technische Thermodynamik und Transportprozesse (LTTT), Zentrum für Energietechnik (ZET), Universität Bayreuth
- 09:25 **Fluid Retrofit für Kompressionskältemaschinen und Wärmepumpen**
D. Roskosch; V. Venzik; B. Atakan; Universität Duisburg-Essen, Duisburg
- 09:50 **Trilateral Cycle mit dem Arbeitsmedium Pentan und Entspannung in einer Turbine**
G. Herres; P. Willert; M. Wright; Y. Wan; Lehrstuhl für Thermodynamik und Energietechnik, Universität Paderborn
- 10:15 **Elektrolyteinfluss auf Flüssig-Flüssig Gleichgewichte für Extraktionsprozesse**
C. Held; Lehrstuhl für Thermodynamik, Fakultät BCI, TU Dortmund
- 10:40 Kaffeepause

Die Poster werden nur am Mittwochabend, 5. Oktober 2016, ab 18 Uhr zur Posterparty präsentiert und müssen anschließend wieder entfernt werden!

MODELLIERUNG

- P 01 **Investigation of Mass Transfer in Liquid-Liquid Systems based on Density Gradient Theory**
K. Kruber¹; M. Krapoth¹; T. Zeiner¹; ¹ TU Dortmund, Lehrstuhl für Fluidverfahrenstechnik, Dortmund
- P 02 **Dynamische Dichtefunktionaltheorie und Tropfenkoaleszenz**
R. Stierle¹; J. Groß¹; ¹ Universität Stuttgart, Stuttgart
- P 03 **Erweiterung der Thermodynamischen Störungstheorie nach Wertheim um Dimer-Dimer-Beiträge**
W. Zmpitas¹; ¹ Universität Stuttgart, Stuttgart
- P 04 **Einfluss der Zustandsgleichung auf die berechnete Adsorptionsisothermen**
J. Butz¹; P. Zimmermann¹; S. Enders¹; ¹ KIT, Karlsruhe
- P 05 **Modeling of adsorption isotherms applying two-dimensional Peng-Robinson equation of state**
T. Goetsch¹; P. Zimmermann²; B. Scharzec¹; S. Enders²; T. Zeiner¹; ¹ TU Dortmund, Dortmund; ² KIT, Karlsruhe
- P 06 **Vergleich zweier Zustandsgleichungen zur Vorausberechnung thermodynamischer Eigenschaften schwefelhaltiger Gemische**
C. Bühl¹; S. Enders¹; ¹ KIT, Karlsruhe
- P 07 **Einfluss der Kompressibilität auf Flüssig-Flüssig Grenzflächen**
A. Danzer¹; S. Enders¹; ¹ KIT, Karlsruhe
- P 08 **Modellierung komplexer Phasengleichgewichte unter Berücksichtigung der Formation von gemischten Gashydraten**
S. Hielscher¹; A. Jäger²; V. Vinš³; C. Breilkopf²; J. Hrubý³; R. Span¹; ¹ Ruhr-Universität Bochum, Lehrstuhl für Thermodynamik, Bochum; ² TU Dresden, Professur für Technische Thermodynamik, Dresden; ³ Institute of Thermomechanics AS CR, Prag/CZ
- P 09 **Transportgrößen aus der Entropieskalierung mit PC-SAFT: Wärmeleitfähigkeit und Selbstdiffusion**
M. Hopp¹; J. Groß¹; ¹ Institut für Technische Thermodynamik und Thermische Verfahrenstechnik, Universität Stuttgart, Stuttgart
- P 10 **Entwicklung und Bewertung einer neuen Störungstheorie für Elektrolytlösungen**
M. Theiss¹; ¹ Universität Stuttgart, Institut für Technische Thermodynamik und Thermische Verfahrenstechnik, Stuttgart
- P 11 **Unsicherheiten bei der Berechnung von Reaktionsgleichgewichten**
K. Müller; Universität Erlangen-Nürnberg, Erlangen
- P 12 **Eine ingenieurtechnische Viskositätskorrelation für n-Butan**
S. Herrmann¹; H. Kretschmar¹; E. Vogel²; ¹ Hochschule Zittau/Görlitz, Zittau; ² Universität Rostock, Rostock

- P 13 **Bilevel Programming in Parameter Estimation for Cubic EOS**
M. Glass¹; H. Djelassi¹; A. Mitsos¹; ¹ RWTH Aachen University - Process Systems Engineering (AVT.SVT), Aachen
- P 14 **Einfluss von Simulations- und Evaluationsmethoden auf die Berechnung der freien Enthalpiedifferenz der Solvatisierung**
A. Mecklenfeld¹; G. Raabe¹; ¹ Institut für Thermodynamik, TU Braunschweig, Braunschweig

MOLEKULARE THERMODYNAMIK

- P 15 **Ab initio-Berechnung der Transporteigenschaften von schwerem Wasser im Limit des verdünnten Gases**
R. Hellmann¹; E. Bich¹; ¹ Universität Rostock, Institut für Chemie, Rostock
- P 16 **Molekularsimulationen zur systematischen Untersuchung der Entropieskalierung für Transporteigenschaften von Mischungen**
M. Fischer¹; J. Groß¹; ¹ Universität Stuttgart, Stuttgart
- P 17 **Modifikation der Wolf Summation und Anwendung auf Molekularsimulationen der Phasengleichgewichte von Molekülen mit Teilladungen**
C. Waibel¹; J. Groß¹; ¹ Universität Stuttgart, Institut für Technische Thermodynamik und Thermische Verfahrenstechnik, Stuttgart
- P 18 **pVT-Daten von verzweigten und unverzweigten Alkanen durch Computersimulation**
M. Dörrstein¹; U. Deiters¹; ¹ Universität zu Köln, Köln
- P 19 **Molecular dynamics simulation study of the formation of Carbamazepine nanoparticles by rapid expansion of a supercritical solution (RESS)**
S. Braun¹; T. Kraska¹; ¹ Universität zu Köln, Köln
- P 20 **Molekulardynamik-Simulationen nanoskaliger Prozesse: Spaltströmung und Nanoindentation mit Schmierung**
M. Lautenschläger¹; S. Stephan¹; M. Horsch¹; H. Urbassek¹; H. Hasse¹; ¹ TU Kaiserslautern, Kaiserslautern
- P 21 **Contact angle of droplets on nanostructured surfaces by molecular simulation**
S. Becker¹; M. Heier¹; M. Kohns¹; M. Horsch¹; H. Hasse¹; ¹ Lehrstuhl für Thermodynamik, TU Kaiserslautern, Kaiserslautern
- P 22 **Development of molecular models by multicriteria optimization**
M. Horsch¹; K. Stöbener²; S. Werth¹; H. Hasse¹; ¹ Lehrstuhl für Thermodynamik, TU Kaiserslautern, Kaiserslautern; ² Fraunhofer Institute for Industrial Mathematics (ITWM), Kaiserslautern
- P 23 **Partition behavior of ionizable molecules in mixed micellar systems: Prediction with molecular dynamics simulations and COSMOmic**
D. Yordanova¹; ¹ Technische Universität Hamburg-Harburg, Hamburg

KOMPLEXE SYSTEME

- P 24 **Gas-Flüssig-Gleichgewichte von Mischungen Imidazoliumbasierter Ionischer Flüssigkeiten mit Alkyl-Alkoholen**
M. Stuckenholz¹; P. Carvalho²; J. Kiefer¹; J. Coutinho³; W. Schröder¹; B. Rathke¹; ¹ Universität Bremen, Bremen; ² University of Aveiro, Aveiro/Q; ³ University of Aveiro, Aveiro/P
- P 25 **Vapor pressure of 1-ethyl-3- methylimidazolium methanesulfonate and methanol binary mixtures**
J. Safarov¹, G. Huseynova², M. Bashirov², E. Hassel²; ¹ Universität Rostock, ² Azerbaijan Technical University, Baku AZ
- P 26 **Carbon Dioxide Solubility in 1-Butyl-3-Methylimidazolium Tetrafluoroborate at High Pressures and Temperatures**
J. Safarov¹; A. Namazova²; I. Kul³; A. Shahverdiyev⁴; E. Hassel¹; ¹ University of Rostock, Institute of Technical Thermodynamics, Rostock; ² Mingachevir State University, Department of Electroenergy and Heat Techniques, Mingachevir/AZ; ³ Widener University, Department of Chemistry and Biochemistry, Chester/USA; ⁴ Azerbaijan Technical University, Department of Heat Energy, Baku/AZ
- P 27 **Thermophysical state properties of the ionic liquids 1-butyl-3-methylimidazolium tetrafluoroborate and 1-butyl-3-methylimidazolium hexafluorophosphate over an extended range**
J. Safarov¹; S. Mainz¹; A. Namazova²; K. Suleymanli³; A. Aliyev³; D. Tuma⁴; A. Shahverdiyev⁵; E. Hassel¹; ¹ University of Rostock, Institute of Technical Thermodynamics, Rostock; ² Mingachevir State University, Department of Electroenergy and Heat Techniques, Mingachevir/AZ; ³ Azerbaijan Technical University, Department of Heat Energy, Baku/AZ; ⁴ BAM Federal Institute for Materials Research and Testing, Berlin; ⁵ Azerbaijan Technical University, Department of Heat Energy, Baku
- P 28 **Spectroscopic Investigation and Modelling of Complexation in Organic Electrolyte Solutions: LIFS I + Valeronitrile**
J. Neuhaus¹; E. von Harbou¹; G. Maurer¹; H. Hasse¹; ¹ Technische Universität Kaiserslautern, Lehrstuhl für Thermodynamik, Kaiserslautern
- P 29 **Einfluss von thermodynamischen Randbedingungen auf das Aggregationsverhalten von supramolekularen Komplexen in wässriger Lösung**
J. Baz¹; N. Hansen²; ¹ Universität Stuttgart, Stuttgart; ² Institut für Technische Thermodynamik und Thermische Verfahrenstechnik, Stuttgart
- P 30 **Experimentelle Untersuchung von Ferrocen in Alkanen als Modell für Flammenhemmer in Polymeren**
S. Lau¹; T. Kasper¹; B. Atakan¹; ¹ Universität Duisburg-Essen, Lehrstuhl für Thermodynamik, Duisburg
- P 31 **Investigation of the Inhibition Effect of Thermodynamic and Kinetic Hydrate Inhibitors by Raman Spectroscopy**
C. Holzammer¹; S. Will¹; A. Bräuer¹; ¹ Friedrich-Alexander-Universität Erlangen-Nürnberg (FAU), Erlangen

BIOTHERMODYNAMIK

- P 32 **Berechnung des Reaktionsgleichgewichts der Phosphorylierung von D-Glucose zu D-Glucose-6-phosphat**
R. Schneider¹; J. Heil¹; P. Kibies¹; C. Held²; G. Sadowski²; S. Kast¹; ¹ Physikalische Chemie III, TU Dortmund; ² Lehrstuhl für Thermodynamik, TU Dortmund
- P 33 **Influence of co-solutes and co-solvents on the reaction equilibria of enzyme catalyzed reactions**
A. Wangler¹; G. Sadowski¹; C. Held¹; ¹ Lehrstuhl für Thermodynamik, TU Dortmund
- P 34 **3-stufiges kontinuierliches reaktives Aufreinigungskonzept von Dicarbonsäuren aus Fermentationsbrühen**
J. Gorden¹; T. Zeiner²; G. Sadowski¹; C. Brandenbusch¹; ¹ TU Dortmund, Lehrstuhl für Thermodynamik, Dortmund; ² TU Dortmund, Lehrstuhl für Fluidverfahrenstechnik, Dortmund
- P 35 **Solid-liquid equilibrium in the system (2-Keto-L-gulonic acid + sodium hydroxide + water)**
F. Jirasek¹; N. Galeotti¹; J. Burger¹; H. Hasse¹; ¹ Laboratory of Engineering Thermodynamics (LTD), University of Kaiserslautern, Kaiserslautern
- P 36 **Studies on the influence of sugars on vapor-liquid equilibria in aqueous-organic systems - water + acetic acid + xylose as an example**
N. Galeotti¹; F. Jirasek²; J. Burger²; H. Hasse²; ¹ TU Kaiserslautern, Kaiserslautern; ² TU Kaiserslautern, Lehrstuhl für Thermodynamik (LTD), Kaiserslautern
- P 37 **Influence of Salts and pH on the Partial Molar Volume of Proteins – An Experimental and Molecular Simulation Study**
E. Hackemann¹; ¹ TU Kaiserslautern, Lehrstuhl für Thermodynamik (LTD), Kaiserslautern
- P 38 **Modellierung von Flüssig-Flüssig Gleichgewichten von α -, β - und γ -Cyclodextrin mit der PC-SAFT Zustandsgleichung**
M. Hübner¹; M. Minceva¹; ¹ Technische Universität München, Freising
- P 39 **Einfluss von Wasserstoffbrückenbindungen auf die Stabilität der WW Domäne des Proteins Pin 1**
D. Markthaler¹; N. Hansen²; ¹ Universität Stuttgart, Stuttgart; ² Institut für Technische Thermodynamik und Thermische Verfahrenstechnik, Stuttgart

INDUSTRIELLE THERMODYNAMIK

- P 40 **Quantitative NMR spektroskopische Untersuchung der chemischen Gleichgewichte im System MDEA-Wasser-CO₂**
R. Behrens¹; E. von Harbou¹; G. Sieder²; T. Ingram²; H. Hasse¹; ¹ Lehrstuhl für Thermodynamik, TU Kaiserslautern, Kaiserslautern; ² BASF SE, GCP/TD, Ludwigshafen am Rhein
- P 41 **Screening neuer Amine zur energieeffizienten CO₂ Absorption aus Synthesegas**
E. Kessler¹; R. Schneider²; M. Irfan²; B. Willy³; A. Yazdani¹; D. Vasilii¹; L. Ninni Schäfer¹; J. Rolker³; E. von Harbou¹; H. Hasse¹; ¹ Lehrstuhl für Thermodynamik, TU Kaiserslautern, Kaiserslautern; ² Evonik Industries AG, Hanau; ³ Evonik Industries AG, Marl

- P 42 **Liquid-liquid equilibrium in binary and ternary mixtures containing formaldehyde, water, methanol, methylal, and poly(oxymethylene) dimethyl ethers**
N. Schmitz¹; A. Friebe¹; J. Burger¹; E. von Harbou¹; H. Hasse¹; ¹ TU Kaiserslautern, Lehrstuhl für Thermodynamik (LTD), Kaiserslautern
- P 43 **Konzeptioneller Verfahrensentwurf unter Verwendung von wenigen Stoffdaten mit M&T-Apparatemodellen**
M. Kaul¹; J. Burger¹; H. Hasse¹; ¹ Technische Universität Kaiserslautern, Lehrstuhl für Thermodynamik, Kaiserslautern
- P 44 **Aerosolbildung in einem zweistufigen Gasreinigungsprozess**
P. Hamberger¹; K. Schaber²; ¹ Steinbuch Centre for Computing (SCC) und Institut für Technische Thermodynamik und Kältetechnik (ITTK), Karlsruher Institut für Technologie (KIT), Karlsruhe; ² Institut für Technische Thermodynamik und Kältetechnik (ITTK), Karlsruher Institut für Technologie (KIT), Karlsruhe
- P 45 **Al-basierte Adsorbentien durch Chemische Gasphaseninfiltration von Aktivkohle: Untersuchung der Wachstumskinetik**
S. Heib¹; C. Bläker²; D. Bathen²; B. Atakan¹; ¹ Universität Duisburg-Essen, Lehrstuhl für Thermodynamik, Duisburg; ² Universität Duisburg-Essen, Lehrstuhl für Thermische Verfahrenstechnik, Duisburg
- P 46 **Neue IAPWS-Richtlinie zur schnellen und genauen Berechnung thermophysikalischer Stoffeigenschaften in numerischen Prozesssimulationen**
M. Kunick¹; H. Kretzschmar¹; U. Gampe²; d. Francesca³; ¹ Hochschule Zittau/Görlitz, Zittau; ² Technische Universität Dresden, Dresden; ³ Deutsches Zentrum für Luft- und Raumfahrt, Köln

ENERGIE

- P 47 **Kinetische Untersuchung der partiellen Oxidation von Methan/Ethanol und Methan/n-Heptan Gemischen**
D. Kaczmarek¹; T. Kasper¹; B. Atakan¹; ¹ Universität Duisburg-Essen, Lehrstuhl für Thermodynamik, Duisburg
- P 48 **Simultane Bestimmung von Wärmeleitfähigkeit, Temperaturleitfähigkeit und Wärmekapazität bei Temperaturen bis 750 °C**
P. Götz¹; S. Hummel¹; R. Wulf¹; U. Groß¹; T. Fieback¹; ¹ TU Bergakademie Freiberg, IWTT, Freiberg
- P 49 **Nutzung von Verbrennungsmotoren zur Polygeneration - Simulation, Experiment und exergetische Analyse**
R. Hegner¹; S. Wiemann¹; C. Schulz¹; S. Kaiser¹; B. Atakan¹; ¹ Universität Duisburg-Essen, Duisburg
- P 50 **Messungen von Stickstoffmonoxid im Kern von Diesel-ähnlichen Flammen eines Biokraftstoffgemisches**
C. Schulz¹; T. Ottenwälder²; T. Raffius¹; T. Brands¹; S. Pischinger²; G. Grünefeld¹; ¹ Lehrstuhl für Technische Thermodynamik, RWTH Aachen University, Aachen; ² RWTH Aachen University, Lehrstuhl für Verbrennungskraftmaschinen, Aachen

- P 51 **Sorptionskinetische Untersuchungen von Oxyfuel Gaskomponenten an Festbrennstoffen**
C. Wedler¹; T. Fieback²; R. Span¹; ¹ Lehrstuhl für Thermodynamik, RUB, Bochum; ² Lehrstuhl für Technische Thermodynamik, TU Bergakademie Freiberg, Freiberg
- P 52 **Numerische Untersuchung des mischungsbedingten Phasenerfalls bei trans- und überkritischer Einspritzung**
C. Traxinger¹; H. Müller¹; M. Pfitzner¹; ¹ Universität der Bundeswehr München - Institut für Thermodynamik, Neubiberg
- P 53 **Optische Untersuchungen zum Beladungs- und Regenerationsverhalten von Dieselpartikelfiltern im Betrieb**
C. Zöllner¹; W. Mühlbauer¹; D. Brüggemann¹; ¹ Lehrstuhl für Technische Thermodynamik und Transportprozesse (LTTT), Bayreuth Engine Research Center (BERC), Universität Bayreuth, Bayreuth
- P 54 **CFD-basierte Auslegung eines Hochdruckgasventils für Gasmotoren**
F. Dahms¹; M. Theile¹; M. Reißig¹; B. Buchholz¹; D. Neuhaus²; ¹ FVTR GmbH, Rostock; ² Deutsches Zentrum für Luft- und Raumfahrt (DLR), Köln
- P 55 **Korrelation der Strömungsgrößen für Stickstoff N₂ und Methan CH₄ bei kritischer Düsenströmung**
M. Banholzer¹; M. Pfitzner¹; ¹ Universität der Bundeswehr München, Neubiberg
- P 56 **Einfluss von Speichermasse und Arbeitsfluid auf Konzepte motorischer KWK-Anlagen im fluktuierenden Betrieb**
K. Theimert¹; S. Staude²; B. Atakan³; ¹ Universität Duisburg-Essen, Krefeld; ² Hochschule Ruhr West, Deutschland; ³ Universität Duisburg - Essen, Duisburg
- P 57 **Experimentelle Untersuchung und Modellierung eines Organic-Rankine-Cycle-Prozesses**
X. Luo¹; S. Kabelac¹; F.-B. Xie²; T. Zhu²; ¹ Leibniz Universität Hannover, Institut für Thermodynamik, Hannover; ² Tongji Universität, Institut für Wärme- und Umwelttechnik, Shanghai/CN
- P 58 **Kombinierte Energie- und Wassersysteme basierend auf dem Be- und Entfeuchtungsprozess**
M. Preißinger¹; ¹ Lehrstuhl für Technische Thermodynamik und Transportprozesse (LTTT), Zentrum für Energietechnik (ZET), Universität Bayreuth, Bayreuth
- P 59 **Thermodynamische Untersuchungen von Zu- und Abschaltvorgängen von Kohlemühlen in Braunkohlekraftwerken**
J. Prause¹; M. Hübel²; J. Nocke²; E. Hassel²; ¹ FVTR GmbH, Rostock; ² Universität Rostock, Rostock
- P 60 **Grundlagen eines bionischen Energiesystems**
R. Radebold¹; W. Radebold¹; ¹ RADEBOLD Ingenieurbüro, Berlin
- P 61 **Adaption der Potentialtheorie nach Polányi für Adsorptionspaare mit sigmoidalem Isothermenverlauf**
T. Kohler¹; K. Müller¹; W. Arlt¹; ¹ Friedrich-Alexander-Universität Erlangen-Nürnberg (FAU), Erlangen

P 62 **Oberflächentemperaturmessung mit thermographischen Phosphoren: Parameterstudie an dotiertem Al₂O₃**
 D. Stenders¹; B. Atakan¹; ¹ Universität Duisburg-Essen, Lehrstuhl für Thermodynamik, Duisburg

P 63 **Bedeutung der thermodynamischen Triebkraft im Kontext thermochemischer Energiespeicher**
 J. Obermeier¹; P. Bock¹; K. Müller¹; W. Arlt¹; ¹ Friedrich-Alexander-Universität Erlangen-Nürnberg (FAU) / Lehrstuhl für Thermische Verfahrenstechnik, Erlangen

ENERGIEANWENDUNG

P 64 **Untersuchungen zur Tropfenkondensation auf Kunststoffoberflächen**
 F. Eimann¹; S. Zheng¹; C. Philipp¹; U. Groß¹; T. Fieback¹; ¹ TU Bergakademie Freiberg, IWTT, Freiberg

P 65 **Untersuchungen zur Filmstabilität in geneigten innenstrukturierten Rohren**
 S. Eichinger¹; T. Grab¹; T. Storch¹; T. Fieback¹; U. Gross¹; ¹ TU Bergakademie Freiberg, IWTT, Freiberg

P 66 **Thermodynamischer Vergleich von Reinstoffen mit Zeotropen Propen/Iso-Butan Gemischen in Kompressionswärmepumpen**
 V. Venzik¹; B. Atakan²; ¹ Universität Duisburg-Essen, Duisburg; ² Universität Duisburg-Essen, Lehrstuhl für Thermodynamik, Duisburg

P 67 **Experimentelle Validierung einer Hybrid-Wärmepumpe mit Ammoniak-Wasser**
 S. Kabelac¹; T. Tokan¹; ¹ Leibniz Universität Hannover, Institut für Thermodynamik, Hannover

P 68 **Reverse Thermosiphons zum pumpenlosen Transport von Wärme**
 T. Grab¹; T. Storch¹; U. Groß¹; T. Fieback¹; ¹ Lehrstuhl für Technische Thermodynamik, TU Bergakademie Freiberg, Freiberg

P 69 **Gewichtsreduktion eines Kühlsystems zur Kühlung von Leistungselektronik durch Verwendung von Latentwärmespeichern**
 T. Helbing¹; G. Schmitz¹; ¹ Technische Universität Hamburg-Harburg, Hamburg

P 70 **Optimierung von Composite-Latentwärmespeichern mit ungleichförmigen Wärmelasten**
 H. Veelken¹; G. Schmitz¹; ¹ Technische Universität Hamburg, Hamburg

P 71 **Potentialanalyse eines dezentralen Wärmespeichers zur Netzregulierung**
 T. Storch¹; R. Freytag²; T. Fieback¹; U. Gross¹; ¹ TU Bergakademie Freiberg, Freiberg; ² Mitteldeutsche Netzgesellschaft Strom mbH, Grimma

P 72 **Experimentelle Fehlerbestimmung von Wärmemengenzählern**
 T. Storch¹; T. Fieback¹; U. Gross¹; ¹ TU Bergakademie Freiberg, Freiberg

P 73 **Modellierung und Simulation der Wärmeübertragung zwischen Wärmeträgerfluid und PCM im Thermischen Speicher**
 R. Kasibhatla¹; ¹ Lehrstuhl für Technische Thermodynamik und Transportprozesse (LTTT), Universität Bayreuth, Bayreuth

P 74 **Thermodynamische Untersuchung von Flüssigluftenergiespeichern zur Speicherung von elektrischer Energie**
 L. Hüttermann¹; R. Span¹; A. Alekseev²; C. Stiller²; B. Stöver³; S. Härtel³; ¹ Ruhr-Universität Bochum, Bochum; ² Linde AG, Pullach; ³ Mitsubishi Hitachi Power Systems Europe GmbH, Duisburg

P 75 **Energieeffiziente Produktion und Nachbehandlung von Wasserstoff für Power-to-Gas Anwendungen**
 A. Gibelhaus¹; G. Tjarks²; F. Lanzerath¹; M. Müller²; D. Stolten³; A. Bardow¹; ¹ Lehrstuhl für Technische Thermodynamik, RWTH Aachen University, Aachen; ² Institut für Energie- und Klimaforschung, Elektrochemische Verfahrenstechnik, Forschungszentrum Jülich GmbH, Jülich; ³ Institut für Energie- und Klimaforschung, Elektrochemische Verfahrenstechnik, Forschungszentrum Jülich GmbH, Aachen

P 76 **Nichtinvasive Untersuchung von flüssig-flüssig Gleichgewichten im Benchtop-NMR-Spektrometer**
 A. Friebel¹; A. Fröscher¹; J. Burger¹; K. Münnemann¹; E. von Harbou¹; H. Hasse¹; ¹ TU Kaiserslautern, Lehrstuhl für Thermodynamik (LTD), Kaiserslautern

P 77 **Simultane Bestimmung der Temperatur und der chemischen Zusammensetzung in der Gasphase mittels kombinierter Raman- und CARS-Spektroskopie**
 K. Becker¹; J. Kiefer²; ¹ Universität Bremen, Bremen; ² University of Bremen, Bremen

P 78 **Entwicklung eines gravimetrischen Messgeräts zur Bestimmung des Dampfdrucks nach der Knudsen-Methode**
 R. Kendler¹; R. Seif²; F. Dreisbach²; S. Pollak¹; M. Petermann¹; ¹ Ruhr-Universität Bochum/Lehrstuhl Feststoffverfahrenstechnik, Bochum; ² Rubotherm GmbH, Bochum

P 79 **Präzisionsmessungen der Schallgeschwindigkeit in flüssigem und überkritischem n-Butan und iso-Butan**
 A. El Hawary¹; K. Meier¹; ¹ Helmut-Schmidt-Universität/Universität der Bundeswehr Hamburg, Hamburg

P 80 **Messung der dynamischen Viskosität von Kohlendioxid-Stickstoff-Gemischen bei Temperaturen von (253,15 bis 473,15) K und Drücken bis 2 MPa**
 K. Humberg¹; M. Richter¹; R. Span¹; ¹ Ruhr-Universität Bochum/Lehrstuhl für Thermodynamik, Bochum

P 81 **Development of a Special Densimeter for the Investigation of Sorption Phenomena Near Dew Points of Fluid Mixtures**
 K. Moritz¹; R. Kleinrahm¹; M. McLinden²; M. Richter¹; ¹ Ruhr-Universität Bochum, Bochum; ² National Institute of Standards and Technology, Boulder/USA

P 82 **Messung der Hydratationskinetik von Salzen für Wärmetransformationsanwendungen mit der Frequenzantwortmethode**
 E. Laurenz¹; G. Földner¹; L. Schnabel¹; G. Schmitz²; ¹ Fraunhofer ISE, Freiburg/D; ² Technische Universität Hamburg-Harburg, Hamburg/D

- P 83 **Experimentelle Untersuchung von Oberflächeneffekten in der Nähe der Taulinie von binären CO²-reichen Gasgemischen**
M. Ben Souissi¹; M. Richter¹; M. McLinden²; ¹ Ruhr-Universität Bochum/Lehrstuhl für Thermodynamik, Bochum; ² National Institute of Standards and Technology, Boulder (CO)/USA
-
- P 84 **Inbetriebnahme eines neuen Dielektrizitätskonstanten-Gasthermometers zur kombinierten Messung von Dichte- und dielektrischen Virialkoeffizienten**
C. Günz¹; C. Gaiser¹; M. Richter²; ¹ Physikalisch-Technische Bundesanstalt (PTB), Berlin; ² Ruhr-Universität Bochum, Bochum
-
- P 85 **Effiziente Bestimmung von Flüssig-flüssig-Gleichgewichten mit Mikrofluidik und konfokaler Raman-Spektroskopie**
J. Thien¹; C. Peters¹; T. Brands¹; H. Koß¹; A. Bardow¹; ¹ Lehrstuhl für Technische Thermodynamik, RWTH Aachen University, Aachen
-
- P 86 **Ramanspektroskopische Untersuchungen zur Verdampfung mehrkomponentiger Kraftstofftropfen**
T. Hillenbrand¹; S. Lehmann¹; S. Lorenz¹; D. Brüggemann¹; ¹ Lehrstuhl für Technische Thermodynamik und Transportprozesse (LTTT), Universität Bayreuth, Bayreuth
-
- P 87 **Wasserstoffbasierte Energiesysteme zur Versorgung von Wohnhäusern**
C. Pöttinger¹; M. Preißinger¹; D. Brüggemann¹; ¹ Lehrstuhl für Technische Thermodynamik und Transportprozesse (LTTT), Zentrum für Energietechnik (ZET), Universität Bayreuth, Bayreuth
-
- P 88 **Neue Sorbentien für Trocknungsanwendungen: Kapazität versus Kinetik**
M. Erdogan¹; S. Graf¹; U. Bau¹; F. Lanzerath¹; S. Maaz²; M. Rose²; R. Palkovits²; A. Bardow¹; ¹ LTT RWTH Aachen, Aachen; ² ITMC, RWTH, Aachen
-
- P 89 **A Study On the Behavior of the Void Fraction at the Departure From Nucleate Boiling for Subcooled Flow Boiling In a Rectangular Channel**
M. Bruder¹; T. Sattelmayer¹; ¹ Technische Universität München, Lehrstuhl für Thermodynamik, Garching
-
- P 90 **Exergetische Analysen von Fabrikprozessen**
J. Winterling¹; F. Dammel¹; P. Stephan¹; ¹ Technische Thermodynamik, TU Darmstadt, Darmstadt

KONTAKT

DECHEMA e.V.

Petra Hellwig

Theodor-Heuss-Allee 25

60486 Frankfurt am Main

Telefon: +49 69 7564-167

Fax: +49 69 7564-176

E-Mail: phellwig@dechema.de