

PROGRAMM

8. – 10. März 2017 ·
DECHEMA-Haus · Frankfurt am Main

Jahrestreffen Frankfurt I

**Jahrestreffen der ProcessNet-Fachgruppen
Hochdruckverfahrenstechnik,
Mikroverfahrenstechnik,
Molekulare Modellierung und Simulation**

www.processnet.org/JTR_FrankfurtI_2017.html



RAHMENPROGRAMM

POSTERSESSION

Am **Donnerstag, 9. März 2017** findet im Anschluss an das wissenschaftliche Vortragsprogramm eine **Postersession** der Fachgruppe Molekulare Modellierung und Simulation statt.

GESELLIGER ABEND

Ein **Geselliger Abend** auf Selbstzahlerbasis ist am Mittwoch und Donnerstag geplant. Bitte melden Sie sich dafür bei Ihrer Online-Anmeldung an, die Reservierung wird anhand der Anmeldungen vorgenommen.

Die Treffen am **Mittwoch, 08.03.2017** und **Donnerstag, 09.03.2017** finden um **19:00 Uhr** in der Apfelwein-Wirtschaft Dauth-Schneider statt.

Dauth-Schneider
Neuer Wall 5-7
60594 Frankfurt am Main



Eine genaue Wegbeschreibung/Stadtplan erhalten Sie am Tagungsbüro oder unter <http://dechema.de/Rahmenprogramm-p-20056850.html>

INHALT / KOMITEE

PROGRAMMÜBERSICHT	4
-------------------	---

PROGRAMM	7
----------	---

Mittwoch, 8. März 2017	7
Donnerstag, 9. März 2017	8
Freitag, 10. März 2017	16

POSTER	21
--------	----

PREISVERLEIHUNG	7
-----------------	---

Mittwoch, 8. März 2017, 10:00 Uhr
Professor-Siegfried-Peter-Preis 2017-Verleihung durch
ProcessNet-Fachgruppe Hochdruckverfahrenstechnik

KOMITEE

T. Dietrich	IVAM Fachverband für Mikrotechnik, Dortmund
R. Dittmeyer	Karlsruher Institut für Technologie - KIT
I. Smirnova	TU Hamburg Harburg
J. Vrabec	Universität Paderborn
E. Weidner	Universität Bochum
A. Bazzanella	DECHEMA e.V., Frankfurt am Main
U. Delfs	VDI e.V., Düsseldorf
C. Loersbroks	DECHEMA e.V., Frankfurt am Main

PROGRAMMÜBERSICHT

PROGRAMMÜBERSICHT / PROGRAMME AT A GLANCE

Mittwoch, 8. März 2017

Carl-Duisberg-Hörsaal	
Hochdruckverfahrenstechnik Umwandlung der Biomasse-1	
09:55	Begrüßung
10:00	PLENARVORTRAG Professor-Siegfried-Peter-Preis 2017
10:30	A. Zurbel
11:00	Kaffeepause
11:30	D. Schmiedl
12:00	Posterkurzvorträge
12:30	Mittagspause
Hochdruckverfahrenstechnik Umwandlung der Biomasse-2	
13:30	W. Reynolds
14:00	D. Wüst
14:30	G. Becker
15:00	Kaffeepause
Hochdruckverfahrenstechnik Verkapselung und Kristallisation	
15:30	P. Gurikov
16:00	N. Mölders
16:30	M. Schild
17:00	Beiratssitzung der Fachgruppe Hochdruckverfahrenstechnik
19:00	Geselliger Abend (Selbstzahler)

Donnerstag, 9. März 2017

Carl-Duisberg-Hörsaal	
Hochdruckverfahrenstechnik Herstellung neuer Materialien unter Druck	
09:00	I. Selmer
09:30	I. Preibisch
10:00	A. Wierschem
10:30	R. Kuska
11:00	Kaffeepause
Hochdruckverfahrenstechnik Chemische Reaktionen unter Druck	
11:30	M. Lemberg
12:00	A. Oelbermann
12:30	M. Prokein
13:00	Mittagspause
Hochdruckverfahrenstechnik Neue Prozesse unter Druck	
14:00	D. Slavova
14:30	R. Sevenich
15:00	S. Pollak
15:30	Kaffeepause
Hochdruckverfahrenstechnik Neue Prozesse unter Druck 2	
16:00	J. Schmidt
16:30 - 18:00	SONDERVERANSTALTUNG S. Zeck

Donnerstag, 9. März 2017

Max-Buchner-Hörsaal	
Mikroverfahrenstechnik 1	
10:25	Begrüßung
10:30	PLENARVORTRAG R. von Rohr
11:00	Kaffeepause
11:30	T. Gietzelt
12:00	P. Löb
12:30	M. Franzreb
13:00	Mittagspause
Mikroverfahrenstechnik 2	
14:00	G. Menges-Flanagan
14:30	W. Schomburg
15:00	W. Krieger
15:30	Kaffeepause
Mikroverfahrenstechnik 3	
16:00	S. Schwolow
16:30	D. Kopijar
17:00	W. Augustin
17:30	Beiratssitzung der Fachgruppe Mikroverfahrenstechnik
19:00	Geselliger Abend (Selbstzahler)

Thursday, 9 March 2017

Franz-Patat-Lecture Hall	Treppenhaus-(THT) Lecture Room
Molecular Modelling Session A1	Molecular Modelling Session B1
11:00	J. Vrabec
11:10	INVITED TALK W. Chapman
12:00	G. Goldbeck
12:20	D. Markthaler
12:40	R. Ungerer
13:00	P. Zimmermann
13:40	W. Langel
Lunch	
Session A2	Session B2
14:00	INVITED TALK I. Economou
14:50	S. Bendt
15:10	R. Hellmann
15:30	U. Tallarek
Coffee break	
Session A3	Session B2
16:00	INVITED TALK M. Salanne
16:50	V. Ferrario
17:10	A. Mecklenfeld
17:30	T. Janzen
Poster Party (Foyer Max-Buchner-Hörsaal)	
17:30	Beiratssitzung der Fachgruppe Molekulare Modellierung und Simulation
Dinner – External Restaurant (self-pay)	

PROGRAMMÜBERSICHT / PROGRAMME AT A GLANCE

PROGRAMM

Freitag, 10. März 2017

Friday, 10 March 2017

	Max-Buchner-Hörsaal		Carl-Duisberg-Lecture Hall	Franz-Patát-Lecture Hall
	Mikroverfahrenstechnik 4		Molecular Modelling Session A4	Molecular Modelling Session B4
09:30	J. Menges	09:00	INVITED TALK J. Horbach	
10:00	F. Dallmann	09:50	M. Horsch	N. Hansen
10:30	Kaffeepause	10:10	R. Stierle	E. Garcia
	Mikroverfahrenstechnik 5	10:30	M. Heier	K. Leonhard
11:00	T. Gamse	10:50	Coffee break	
11:30	S. Willersinn	11:20	INVITED TALK R. Netz	
12:00	K. Cobry		Molecular Modelling Session A5	Molecular Modelling Session B5
12:30	Posterkurzvorträge	12:10	J. Smiatek	A. Köster
13:00	Schlussbemerkung	12:30	M. Kohns	D. Boda
13:10	Mittagspause	12:50	D. Kerlé	M. Kindlein
		13:10	A. Narayanan Krishnamoorthy	I. Nezbeda
		13:30	Lunch	
		14:30	INVITED TALK L. Schneider	
			Molecular Modelling Session A6	Molecular Modelling Session B6
		15:20	P. Neumann	K. Leonhard
		15:40	M. Hülsmann	H. Heinz
		16:00	C. Waibel	M. Schenk
		16:20	Concluding Remarks	Concluding Remarks

Mittwoch, 8. März 2017

Carl-Duisberg-Hörsaal

09:55	Begrüßung und Einführung
10:00	PLENARVORTRAG Professor-Siegfried-Peter-Preisträger 2017
	HOCHDRUCKVERFAHRENSTECHNIK Umwandlung der Biomasse-1
10:30	Hydrothermale Depolymerisation von Lignin zur Gewinnung aromatischer Grundstoffchemikalien A. Zurbel ¹ ; D. Kaiser ¹ ; M. Bertau ¹ ; ¹ TU Bergakademie Freiberg, Institut für Technische Chemie, Freiberg/D
11:00	Kaffeepause
11:30	Structural features of oligomer building blocks generated by Base Catalysed Depolymerisation of Kraft-Lignin D. Schmiel ¹ ; B. Tübke ¹ ; S. Böringer ¹ ; ¹ Fraunhofer Institut für Chemische Technologie ICT, Pfinztal/D
12:00	Posterkurzvorträge
12:30	Mittagspause
13:30	Pressure drop and mechanic deformation in lignocellulosic biomass fixed-beds during hydrothermal pretreatment W. Reynolds ¹ ; M. Conrad ¹ ; S. Mbeukem ¹ ; I. Smirnova ¹ ; ¹ TU Hamburg-Harburg, Hamburg/D
14:00	Exploitation of Inulin-type Fructans (ItF) from Chicory Roots for the Production of Platform Chemicals D. Wüst ¹ ; M. Götz ¹ ; J. Pfenning ¹ ; A. Kruse ¹ ; ¹ University of Hohenheim, Stuttgart/D
14:30	Pflanzenverfügbares Phosphat nach hydrothormaler Karbonisierung von Klärschlamm G. Becker ¹ ; A. Kruse ¹ ; ¹ Universität Hohenheim, Stuttgart/D
15:00	Kaffeepause
	HOCHDRUCKVERFAHRENSTECHNIK Verkapselung und Kristallisation
15:30	Amorphization of drugs by precipitation from supercritical solutions P. Gurikov ¹ ; I. Smirnova ¹ ; ¹ TU Hamburg-Harburg, Hamburg/D
16:00	Imprägnierung von Polycarbonat mit Silbernitrat unter der Verwendung von verdichtetem Kohlendioxid N. Mölders ¹ ; M. Renner ¹ ; C. Errenst ² ; E. Weidner ² ; ¹ Fraunhofer UMSICHT, Oberhausen/D; ² Ruhr-Universität Bochum/D
16:30	CO₂- unterstützte Kristallisation von nanoporösen Metallorganischen Gerüstverbindungen M. Schild ¹ ; S. Kareth ¹ ; M. Roskosz ¹ ; A. Hanu ¹ ; B. Mallick ¹ ; M. Petermann ¹ ; ¹ Ruhr-Universität Bochum/D
17:00	Beiratssitzung FGr Hochdruckverfahrenstechnik (nur für berufene Mitglieder)
19:00	Geselliger Abend (Restaurant Dauth-Schneider, Selbstzahler)

PROGRAMM

Donnerstag, 9. März 2017

Carl-Duisberg-Hörsaal

HOCHDRUCKVERFAHRENSTECHNIK Herstellung neuer Materialien unter Druck	
09:00	Überkritische Trocknung von Proteingelpartikeln im Festbett unter Verwendung von CO₂: Experimentelle Untersuchung und Modellierung I. Selmer ¹ ; A. Behnecke ¹ ; J. von der Heide ¹ ; I. Smirnova ¹ ; ¹ Technische Universität Hamburg-Harburg, Institut für Thermische Verfahrenstechnik, Hamburg/D
09:30	CO₂ induzierte Gelierung von Biopolymerlösungen zur Aerogelherstellung I. Preibisch ¹ ; P. Gurikov ¹ ; S. Whitehouse ² ; I. Smirnova ¹ ; ¹ Technische Universität Hamburg-Harburg, Hamburg/D; ² Nestlé Product Technology Centre York/UK
10:00	Druckinduzierte polymorphe Molekülkristalle von Triolein A. Wierschem ¹ ; ¹ Friedrich-Alexander-Universität Erlangen-Nürnberg (FAU), Erlangen/D
10:30	Herstellung und Charakterisierung von Schäumen aus Polymilchsäure mit überkritischem CO₂ im Direktschäumverfahren R. Kuska ¹ ; S. Frerich ¹ ; ¹ Ruhr-Universität Bochum/D
11:00	Kaffeepause
HOCHDRUCKVERFAHRENSTECHNIK Chemische Reaktionen unter Druck	
11:30	Vorhersage des Temperatur- und Lösungsmiteleinflusses auf das Reaktionsgleichgewicht der Hydroformylierung von 1 Dodecen M. Lemberg ¹ ; M. Gerlach ² ; E. Kohls ³ ; C. Hamel ⁴ ; A. Seidel-Morgenstern ² ; M. Stein ³ ; G. Sadowski ¹ ; ¹ Technische Universität Dortmund, Lehrstuhl für Thermodynamik, Dortmund/D; ² Otto-v.-Guericke-Universität, Institut für Verfahrenstechnik, Magdeburg/D; ³ Max Planck Institut für Dynamik komplexer techn. Systeme, Magdeburg/D; ⁴ Hochschule Anhalt, AG Biowissenschaften- und Prozesstechnik, Köthen/D
12:00	Modellierung der Reaktionskinetik für die CO₂-intensivierte Hydrolyse von Rutin zu Quercetin M. Maier ¹ ; A. Oelbermann ¹ ; B. Weidner ² ; M. Renner ¹ ; E. Weidner ³ ; ¹ Fraunhofer UMSICHT, Oberhausen/D; ² Ruhr-Universität Bochum/Lehrstuhl für Thermodynamik, Bochum/D; ³ Fraunhofer UMSICHT, Oberhausen/Ruhr-Universität Bochum/D
12:30	Hochdruckelektrosynthese M. Prokein ¹ ; ¹ Fraunhofer UMSICHT, Oberhausen/D
13:00	Mittagspause

PROGRAMM

Donnerstag, 9. März 2017

Carl-Duisberg-Hörsaal

HOCHDRUCKVERFAHRENSTECHNIK Neue Prozesse unter Druck 1	
14:00	Phaseninversion mit Hilfe von Nanopartikeln: Rheologische Eigenschaften von SiO₂-Nanofluiden und O/W-Emulsionen unter Druck D. Slavova ¹ ; S. Pollak ¹ ; M. Petermann ¹ ; ¹ Ruhr-Universität Bochum/D
14:30	Inactivation of selected spores and formation of food processing contaminants in model and real food system under high pressure thermal sterilization (HPTS) conditions R. Sevenich ¹ ; ¹ Technische Universität Berlin/D
15:00	Zum Strahlzerfall überhitzter Kohlendioxidstrahlen L. Engelmeier ¹ ; S. Pollak ¹ ; E. Weidner ¹ ; ¹ Ruhr-Universität Bochum/D
15:30	Kaffeepause
HOCHDRUCKVERFAHRENSTECHNIK Neue Prozesse unter Druck 2	
16:00	Technische Sicherheit von Hochdruckanlagen – Simulationen und Messungen am CSE-High Pressure Loop zur Auslegung von Sicherheitseinrichtungen J. Schmidt ¹ ; ¹ CSE Center of Safety Excellence gGmbH, Pfinztal/D
16:30	SONDERVERANSTALTUNG
18:00	Wanted Technologies: Status und neue Initiativen S. Zeck; Consulting SZ, Freinsheim/D

PROGRAMM

Donnerstag, 9. März 2017

Max-Buchner-Hörsaal

MIKROVERFAHRENSTECHNIK 1

- 10:25 **Begrüßung und Einführung**
- 10:30 **PLENARVORTRAG**
Mikroreaktoren unter Druck
R. von Rohr¹; ¹ ETH Zürich, Zürich/CH
- 11:00 **Kaffeepause**
- 11:30 **Vergleich unterschiedlicher Strukturierungsmethoden zur Herstellung mikroverfahrenstechnischer Apparate**
T. Gietzelt¹; T. Wunsch¹; V. Toth¹; A. Hüll¹; R. Dittmeyer¹; ¹ KIT, IMVT, Karlsruhe/D
- 12:00 **Nutzung additiver Fertigungsverfahren für die Realisierung metallischer mikro-/milli-strukturierter Reaktoren**
P. Löb¹; C. Hofmann¹; U. Krtschil¹; G. Menges-Flanagan¹; ¹ Fraunhofer ICT-IMM, Mainz/D
- 12:30 **3D-Druck von Mikroreaktoren auf Polymerbasis: Potential und Limitierungen**
M. Franzreb¹; ¹ Karlsruher Institut für Technologie (KIT), Eggenstein-Leopoldshafen/D
- 13:00 **Mittagspause**
- 14:00 **Entwicklung und Validierung eines skalierbaren kontinuierlichen Prozesses zur Grignard Reagenz Herstellung**
G. Menges-Flanagan¹; E. Deitmann²; C. Hofmann¹; P. Löb¹; ¹ Fraunhofer ICT-IMM, Mainz/D; ² Hochschule Emden/Leer, Emden/D
- 14:30 **Mikroreaktoren aus Polymeren für Chemie und Biologie**
W. Schomburg¹; J. Sackmann¹; J. Kosloh¹; P. Maurer¹; ¹ RWTH Aachen University, Aachen/D
- 15:00 **Gas-Liquid Mass Transfer and Chemical Reactions in Helical Capillary Flow Reactors with Alternating Bends**
W. Krieger¹; S. Kurt¹; F. Warnebold¹; E. Bayraktar²; O. Mierka²; S. Turek²; N. Kockmann¹; ¹ TU Dortmund, Arbeitsgruppe Apparatedesign, Dortmund/D; ² TU Dortmund, Angewandte Mathematik und Numerik, Dortmund/D
- 15:30 **Kaffeepause**

MIKROVERFAHRENSTECHNIK 2

PROGRAMM

Donnerstag, 9. März 2017

Max-Buchner-Hörsaal

MIKROVERFAHRENSTECHNIK 3

- 16:00 **Prozessintensivierung durch millistrukturierte Reaktoren für energieeffiziente Syntheseverfahren**
S. Schwolow¹; T. Röder²; N. Kockmann³; ¹ Hochschule Mannheim/D; ² Institut für Chemische Verfahrenstechnik, Hochschule Mannheim/D; ³ TU Dortmund, BCI, AD, Dortmund/D
- 16:30 **Elektrochemische CO₂ Reduktion an Gasdiffusionselektroden im Mikrostrukturierten Reaktor**
D. Kopljar¹; A. Löwe¹; E. Klemm¹; N. Wagner³; ¹ Universität Stuttgart/D; ² Deutsches Zentrum für Luft- und Raumfahrt (DLR), Stuttgart/D
- 17:00 **Fouling in mikrostrukturierten Apparaten: Ein Überblick über den Stand der Forschung**
W. Augustin¹; S. Scholl¹; ¹ TU Braunschweig, Institut für Chemische und Thermische Verfahrenstechnik, Braunschweig/D
- 17:30 **Beiratssitzung FGr Mikroverfahrenstechnik (nur für berufene Mitglieder)**
- 19:00 **Geselliger Abend** (Restaurant Dauth-Schneider, Selbstzahler)

PROGRAMME

Thursday, 9 March 2017

Franz-Patat-Lecture Hall

- 11:00 **Opening**
Jadran Vrabec¹; ¹ Universität Paderborn/D
- 11:10 **INVITED TALK**
Insight into Phase Behavior, Microstructure and Interfacial Behavior of Complex Fluids
W. Chapman¹; ¹ Rice University, Houston, Texas/USA
- 11:50 **Short break**
- MOLECULAR MODELLING**
Session A1
- 12:00 **Metadata for Interoperability in Materials Modelling**
G. Goldbeck¹; J. Friis²; T. Hagelien²; G. Schmitz³; A. Hashibon³; ¹ Goldbeck Consulting Ltd, Cambridge/UK; ² SINTEF Materials and Chemistry, Trondheim/N; ³ ACCESS e.V., Aachen/D; ⁴ Fraunhofer IWM, Freiburg/D
- 12:20 **Prediction of properties in metastable conditions**
P. Ungerer¹; M. Yiannourakou¹; J. Teuler²; V. Lachet³; ¹ Materials Design S.A.R.L., Montrouge/F; ² LCP-Université Paris Saclay-CNRS, Orsay/F; ³ IFP Energies nouvelles (IFPEN), Rueil-Malmaison/F
- 12:40 **Round Robin Study of Molecular Simulation Programs**
M. Schappals¹; A. Mecklenfeld²; L. Kröger³; V. Botan³; A. Köster⁴; S. Stephan¹; E. Garcia¹; G. Rutkai⁴; G. Raabe²; P. Klein⁵; K. Leonhard³; J. Vrabec⁴; H. Hasse¹; ¹ Lehrstuhl für Thermodynamik, TU Kaiserslautern/D; ² Institut für Thermodynamik, TU Braunschweig/D; ³ Lehrstuhl für Technische Thermodynamik, RWTH Aachen University, Aachen/D; ⁴ Lehrstuhl für Thermodynamik und Energietechnik, Universität Paderborn/D; ⁵ Fraunhofer-Institut für Techno- und Wirtschaftsmathematik ITWM, Kaiserslautern/D
- 13:00 **Lunch**
- MOLECULAR MODELLING**
Session A2
- 14:00 **INVITED TALK**
Molecular simulation prediction of thermodynamic and transport properties of CO₂ – brine mixtures from non-polarizable and polarizable force fields
I. Economou¹; ¹ Texas A&M University of Qatar, Doha/Q
- 14:40 **Short break**

PROGRAMME

Thursday, 9 March 2017

Franz-Patat-Lecture Hall

- 14:50 **Adsorption and Diffusion Study of Small Hydrocarbons in ZIF-8, ZIF-9 and ZIF-71**
S. Bendt¹; M. Hovestadt²; M. Döpken³; J. Köster³; U. Böhme²; C. Paula²; M. Hartmann²; F. Keil³; ¹ Hamburg University of Technology, Hamburg/D; ² Erlangen Catalysis Resource Center, Friedrich-Alexander-Universität Erlangen-Nürnberg/D; ³ Institute of Chemical Reaction Engineering, Hamburg University of Technology, Hamburg/D
- 15:10 **A new view on surface diffusion from molecular dynamics simulations of solute mobility at chromatographic interfaces**
U. Tallarek¹; ¹ Philipps-Universität Marburg/D
- 15:30 **Coffee break**
- MOLECULAR MODELLING**
Session A3
- 16:00 **INVITED TALK**
Efficient storage mechanisms for building better supercapacitors
M. Salanne¹; ¹ Université Pierre et Marie Curie, Paris/F
- 16:40 **Short break**
- 16:50 **Simulations of protein diffusion and aggregation for bioprocess design and optimization**
V. Ferrario¹; J. Pleiss¹; ¹ University of Stuttgart - Institute of Technical Biochemistry, Stuttgart/D
- 17:10 **Transport diffusion of multi-component liquids**
T. Janzen¹; J. Vrabec¹; ¹ Lehrstuhl für Thermodynamik und Energietechnik, Universität Paderborn/D
- 17:30 **Beiratssitzung FG Molekulare Modellierung** (nur für berufene Mitglieder)
- 17:30 **Poster Party** (Foyer Max-Buchner-Lecture Hall, ground floor)
- 19:00 **Social Programme – Dinner** (Restaurant Dauth-Schneider, self-pay)

PROGRAMME

Thursday, 9 March 2017

Treppenhaus-(THT) Lecture Room

11:00	Opening: see Franz-Patat-Lecture-Hall
11:10	INVITED TALK see Franz-Patat-Lecture-Hall
11:50	Short break
MOLECULAR MODELLING Session B1	
12:00	Influence of Backbone Hydrogen Bonding on the Stability of the WW domain of the Protein Pin1 D. Markthaler ¹ ; ¹ Universität Stuttgart/D
12:20	Compressible Lattice Cluster Theory for Application of Small Molecules P. Zimmermann ¹ ; S. Enders ² ; ¹ KIT Institut für Technische Thermodynamik und Kältetechnik, Karlsruhe/D; ² Karlsruhe Institute of Technology (KIT), Karlsruhe/D
12:40	Analysis of perturbed H₂O vibrations beyond Fourier transform W. Langel ¹ ; ¹ Universität Greifswald/D
13:00	Lunch
MOLECULAR MODELLING Session B2	
14:00	INVITED TALK see Franz-Patat-Lecture-Hall
14:40	Short break
14:50	Virial equation of state for CH₄-CO₂ gas mixtures from accurate intermolecular potential energy surfaces R. Hellmann ¹ ; ¹ Universität Rostock/D
15:10	Computing phase diagrams including solid phases utilizing the multistate Bennett acceptance ratio estimator G. Bauer ¹ ; J. Groß ¹ ; ¹ Institute of Thermodynamics and Thermal Process Engineering, University of Stuttgart/D
15:30	Coffee break

PROGRAMME

Thursday, 9 March 2017

Treppenhaus-(THT) Lecture Room

MOLECULAR MODELLING Session B3	
16:00	INVITED TALK see Franz-Patat-Lecture-Hall
16:40	Short break
16:50	Efficient Molecular Simulations of the Free Energy of Solvation A. Mecklenfeld ¹ ; G. Raabe ¹ ; ¹ Institut für Thermodynamik, TU Braunschweig/D
17:10	Prediction of gas solubility in glassy and semicrystalline polymers using mechanics and thermodynamics M. Fischschweiger ¹ ; S. Enders ² ; ¹ OTTRONIC Technology Laboratory, OTTRONIC GmbH, Zeltweg/A; ² Karlsruhe Institute of Technology (KIT), Karlsruhe/D
17:30	Poster Party (Foyer Max-Buchner-Lecture Hall)
19:00	Social Programme – Dinner (Restaurant Dauth-Schneider, self-pay)

PROGRAMME

Friday, 10 March 2017

Carl-Duisberg-Lecture Hall

09:00	INVITED TALK Interfacial free energies from thermodynamic integration: Novel simulation techniques J. Horbach ¹ ; ¹ Universität Düsseldorf/D
09:40	Short break
MOLECULAR MODELLING Session A4	
09:50	Molecular simulation and theory of homogeneous cavitation M. Horsch ¹ ; K. Langenbach ¹ ; M. Lautenschläger ¹ ; H. Hasse ¹ ; ¹ TU Kaiserslautern, Lehrstuhl für Thermodynamik (LTD), Kaiserslautern/D
10:10	Dynamic Density Functional Theory – Thermodynamics of Droplets R. Stierle ¹ ; J. Groß ¹ ; ¹ Universität Stuttgart/D
10:30	Modeling and Simulation of Wetting of Component Surfaces M. Heier ¹ ; S. Becker ¹ ; F. Diewald ² ; M. Kohns ¹ ; M. Horsch ¹ ; R. Müller ² ; H. Hasse ¹ ; ¹ Lehrstuhl für Thermodynamik, TU Kaiserslautern,/D; ² Lehrstuhl für Technische Mechanik, TU Kaiserslautern/D
10:50	Coffee break
11:20	INVITED TALK Validating MD Polymer Simulation with Single-Molecule Experiments R. Netz ¹ ; ¹ Freie Universität Berlin/D
12:00	Short break
MOLECULAR MODELLING Session A5	
12:10	Aqueous Ionic Liquids and Their Influence on Peptide Conformations: Denaturation and Dehydration Mechanisms D. Diddens ¹ ; V. Lesch ¹ ; A. Heuer ¹ ; J. Smiatek ² ; ¹ Institute of Physical Chemistry, University of Münster/D; ² Institute for Computational Physics, University of Stuttgart/D
12:30	Molecular Simulation of Activities in Electrolyte Solutions M. Kohns ¹ ; M. Schappals ¹ ; M. Horsch ¹ ; H. Hasse ¹ ; ¹ Laboratory of Engineering Thermodynamics (LTD), University of Kaiserslautern/D
12:50	Monte Carlo Simulations of Vapor-Liquid Equilibria of Mixtures of Alcohols and Ionic Liquids D. Kerlé ¹ ; A. Appelhagen ² ; B. Rathke ¹ ; J. Kiefer ¹ ; E. Maginn ³ ; ¹ Universität Bremen/D; ² Universität Rostock/D; ³ University of Notre Dame/USA

PROGRAMME

Friday, 10 March 2017

Carl-Duisberg-Lecture Hall

13:10	Preferential solvation and ion association properties in aqueous dimethyl sulfoxide solutions A. Narayanan Krishnamoorthy ¹ ; J. Zeman ¹ ; C. Holm ¹ ; J. Smiatek ¹ ; ¹ University of Stuttgart/D
13:30	Lunch
14:30	INVITED TALK Self-Assembly of Block Copolymers with Soft Coarse-Grained Models S. Schneider ¹ , D.W. Sun ¹ , M. Müller ¹ ; ¹ Universität Göttingen/D
15:10	Short break
MOLECULAR MODELLING Session A6	
15:20	Enabling Transient Multi-Instance Molecular-Continuum Simulation on Supercomputers P. Neumann ¹ ; X. Bian ² ; ¹ Universität Hamburg, Hamburg/D; ² Technische Universität München, Garching/D
15:40	Highly parallel force field parameterization using combined optimization algorithms for industrially relevant applications M. Hülsmann ¹ ; A. Krämer ¹ ; R. Elfgén ² ; K. N. Kirschner ¹ ; D. Reith ¹ ; ¹ Hochschule Bonn-Rhein-Sieg, Sankt Augustin/D; ² Mulliken Center of Theoretical Chemistry, Bonn/D
16:00	Modification of the Wolf Summation and Application to Molecular Simulation of Phase Equilibria for Molecules with Electrostatic Interactions C. Waibel ¹ ; J. Gross ¹ ; ¹ Universität Stuttgart, Institut für Technische Thermodynamik und Thermische Verfahrenstechnik, Stuttgart/D
16:20	Concluding Remarks

PROGRAMME

Friday, 10 March 2017

Franz-Patatz-Lecture Hall

09:00 **INVITED TALK**
see Carl-Duisberg-Lecture Hall

09:40 **Short break**

MOLECULAR MODELLING
Session B4

09:50 **Thermodynamics of Self-Assembly of Perylene Derivatives**
J. Baz¹; N. Hansen¹; ¹ Universität Stuttgart/D

10:10 **A New Simulation Scenario for the Coil-to-globule Transition of Thermoresponsive Polymers**
E. Garcia¹; M. Horsch¹; H. Hasse¹; ¹ TU Kaiserslautern, Lehrstuhl für Thermodynamik (LTD), Kaiserslautern/D

10:30 **Investigation of phase equilibria and dynamics of NIPAM oligomers in water by atomistic simulations, coarse graining and lattice Boltzmann simulations**
V. Božan¹; V. Ustach²; R. Faller²; K. Leonhard³; ¹ RWTH Aachen University, Aachen/D; ² University of California Davis/USA; ³ Universität Greifswald/D

10:50 **Coffee break**

11:20 **INVITED TALK**
see Carl-Duisberg-Lecture Hall

12:00 **Short break**

MOLECULAR MODELLING
Session B5

12:10 **ms2 – Release 3.0 of a molecular simulation tool**
G. Rutkai¹; A. Köster²; G. Guevara-Carrion¹; T. Janzen¹; M. Schappals³; C. Glass⁴; M. Bernreuther⁴; A. Wafai⁴; S. Stephan³; M. Kohns³; S. Deublein³; M. Horsch³; H. Hasse³; J. Vrabec¹; ¹ Lehrstuhl für Thermodynamik und Energietechnik, Universität Paderborn/D; ² Universität Paderborn/D; ³ Lehrstuhl für Thermodynamik, Universität Kaiserslautern/D; ⁴ Höchstleistungsrechenzentrum Universität Stuttgart (HLRS), Stuttgart/D

12:30 **Multiscale modeling of ion transport through nanopores: the case study of a rectifying bipolar nanofluidic diode**
D. Boda¹; Z. Ható¹; M. Valiskó¹; T. Kristóf¹; D. Gillespie²; B. Matejczyk³; M. Wolfram³; J. Pietschmann⁴; S. Furini⁵; C. Berti²; ¹ University of Pannonia Institute of Chemistry, Veszprém/H; ² Rush University Medical Center, Chicago/USA; ³ University of Warwick/UK; ⁴ University of Münster/D; ⁵ University of Siena/I

PROGRAMME

Friday, 10 March 2017

Franz-Patatz-Lecture Hall

12:50 **Molecular simulations of phospholipids at sucrose triglyceride interfaces**
M. Kindlein¹; E. Elts¹; M. Greiner¹; H. Briesen¹; ¹ TU München, Freising/D

13:10 **Pitfalls in vapor-liquid equilibrium simulations: Reliability of published data**
I. Nezbeda¹; ¹ J E Purkinje University, Usti nad Labem/CZ

13:30 **Lunch**

14:30 **INVITED TALK**
see Carl-Duisberg-Lecture Hall

15:10 **Short break**

MOLECULAR MODELLING
Session B6

15:20 **Ab initio reaction models from hybrid reactive molecular dynamics and quantum chemistry simulations**
M. Döntgen¹; M. Przybylski-Freund¹; F. Schmalz¹; W. Kopp¹; L. Kröger¹; K. Leonhard¹; ¹ RWTH Aachen University, Aachen/D

15:40 **Reliable Computational Design of Biological-Inorganic Materials to the Large Nanometer Scale Using INTERFACE-FF**
H. Heinz¹; ¹ University of Colorado - Boulder/USA

16:00 **Influence of fixed partial atomic charges on relative potential energies and selected physicochemical observables**
M. Schenk¹; K. Kirschner¹; D. Reith¹; ¹ Hochschule Bonn-Rhein-Sieg, Sankt Augustin/D

16:20 **Concluding Remarks**

PROGRAMM

Freitag, 10. März 2017

Max-Buchner-Hörsaal

MIKROVERFAHRENSTECHNIK 4

- 09:30 **High resolution micro-resonator for chemo-selective sensing in liquids**
 J. Menges¹; P. Peiker²; S. Klingel²; H. Bart¹; E. Oesterschulze²; ¹ TU Kaiserslautern, Lehrstuhl für Thermische Verfahrenstechnik, Kaiserslautern/D; ² TU Kaiserslautern, Physics Technology Nano, Kaiserslautern/D
- 10:00 **Ultra-compact micro structured membrane reactor for spatial-resolved in-operando XAS measurements**
 F. Dallmann¹; G. Cavusoglu²; T. Gietzelt¹; P. Pfeifer¹; H. Lichtenberg²; J. Grunwaldt²; R. Dittmeyer¹; ¹ Karlsruher Institut für Technologie, Institut für Mikroverfahrenstechnik (IMVT), Eggenstein-Leopoldshafen/D; ² Karlsruhe Institute of Technology, Institute of Catalysis Research and Technology (IKFT), Eggenstein-Leopoldshafen/D

10:30 Kaffeepause

MIKROVERFAHRENSTECHNIK 5

- 11:00 **Einsatz von Mikromischern für die Hochdruckextraktion flüssiger Ausgangsmaterialien**
 C. Campos Dominguez¹; T. Gamse¹; ¹ TU Graz/Institut für Chemische Verfahrenstechnik und Umwelttechnik, Graz/A
- 11:30 **Auslegung von Extraktionsapparaten mit Mikrotrenntechnik**
 S. Willersinn¹; H. Bart¹; ¹ TU Kaiserslautern, Lehrstuhl für Thermische Verfahrenstechnik, Kaiserslautern/D
- 12:00 **Plate-and-Frame Microreactor with Local Electrical Monitoring of Laminar Mixing Processes**
 K. Cobry¹; N. Mokhtarifar¹; M. Talebi¹; P. Woias¹; ¹ Universität Freiburg/D
- 12:30 **Posterkurzvorträge**
- 13:00 **Schlussbemerkung**
- 13:10 Mittagspause

POSTER

HOCHDRUCKVERFAHRENSTECHNIK (HDVT)

- P1.01 **Aufreinigung von Naturwachsen mittels überkritischem Kohlendioxid**
 V. Herdegen¹; J. Repke²; ¹ TU Bergakademie Freiberg/D; ² TU Berlin, Fachgebiet DBTA, Berlin/D
- P1.02 **Experimental solubility studies on the high-pressure absorption of small molecules for optimization of catalytic aerobic ethanol oxidation**
 K. Grübel¹; ¹ Ruhr-Universität Bochum/D
- P1.03 **Microencapsulation via emulsification and spraying**
 L. Davico¹; R. Scholz²; S. Kareth³; E. Weidner⁴; ¹ Ruhr-Universität Bochum/D; ² Chair of Process Technology, Ruhr-University Bochum/D; ³ Chair of Process Technology, Ruhr-University Bochum, Oberhausen/D; ⁴ Fraunhofer Institute Umsicht, Oberhausen/D
- P1.04 **Kontinuierliches Verfahren zur Herstellung von Biopolymerschäumen**
 J. Janowski¹; S. Frerich¹; ¹ Ruhr-Universität Bochum/D

MOLECULAR MODELLING (MOL)

- P2.01 **Validation of biomolecular force fields regarding structural and thermodynamic properties of cyclodextrins and their complexes**
 J. Gebhardt¹; N. Hansen¹; ¹ Institute of Thermodynamics and Thermal Process Engineering, University of Stuttgart/D
- P2.02 **Methodical Evaluation of Entropy Scaling of the Transport Properties of Mixtures using Molecular Simulations**
 M. Fischer¹; J. Groß¹; ¹ Universität Stuttgart/D
- P2.03 **Extension of Wertheim's Thermodynamic Perturbation Theory to include dimer-dimer contributions**
 W. Zmpitas¹; J. Groß¹; ¹ Universität Stuttgart/D
- P2.04 **Mesoscale modeling of dimethacrylates for dental materials**
 L. Bußfeld¹; M. Duderstadt¹; A. Schneider²; P. Behrens¹; ¹ Institut für Anorganische Chemie, Leibniz Universität Hannover/D; ² Universität Hannover/D
- P2.05 **A dsDNA model optimized for electrokinetic applications**
 C. Holm¹; F. Weik¹; T. Rau¹; ¹ Universität Stuttgart/D
- P2.06 **Interplay between particle microstructure, network topology and sample shape in magnetic gels – A molecular dynamics simulation study**
 C. Holm¹; R. Weeber¹; ¹ Universität Stuttgart/D
- P2.07 **Simulating phase transitions on every arbitrary conditions by means of a time dependent equation of state**
 P. Friedel¹; ¹ Leibniz-Institut für Polymerforschung Dresden e.V., Dresden/D

POSTER

- P2.08 **Adsorption of a Fluid on a Planar Solid Wall in Lennard-Jones Systems**
M. Heier¹; M. Horsch¹; H. Hasse¹; ¹ Lehrstuhl für Thermodynamik, TU Kaiserslautern/D
- P2.09 **Validation of trimethylamine N-oxide (TMAO) force fields based on properties of aqueous TMAO solutions**
J. Baz¹; D. Markthaler¹; J. Zeman²; J. Smiatek²; N. Hansen¹; ¹ Institute of Thermodynamics and Thermal Process Engineering, University of Stuttgart/D; ² Institute for Computational Physics, University of Stuttgart/D
- P2.10 **Simulation of the Binary Mixtures Carbon Dioxide + Methanol and Carbon Dioxide + Ethanol with ms2 at Low Temperatures**
A. Jäger¹; S. Schröder¹; E. Mickoleit¹; C. Breitkopf²; ¹ TU Dresden/D
- P2.11 **Study of the Binary Mixture Perfluoropolyether + Carbon Dioxide Using COSMO-RS**
E. Mickoleit¹; A. Jäger¹; C. Breitkopf¹; ¹ TU Dresden/D
- P2.12 **Mobility of solutes in binary solvents at polar and nonpolar modified silica surfaces from molecular dynamics simulations**
J. Rybka¹; A. Höltzel¹; A. Seidel-Morgenstern²; U. Tallarek¹; ¹ Philipps-Universität Marburg/D; ² Max Planck Institute for Dynamics of Complex Technical Systems, Magdeburg/D
- P2.13 **Molecular Dynamics Simulation of nanoscopic Processes: Couette-Flow and Lubricated Nano-Indentation**
S. Stephan¹; M. Lautenschläger²; M. Horsch²; H. Hasse²; ¹ TU Kaiserslautern/D; ² TU Kaiserslautern, Lehrstuhl für Thermodynamik, Kaiserslautern/D

MIKROVERFAHRENSTECHNIK (MIKRO)

- P3.01 **Oxidation of isobutane to TBHP – a chemical process with high energy saving potential**
T. Willms¹; H. Kryk²; U. Hampel¹; ¹ Helmholtz-Zentrum Dresden-Rossendorf, Dresden/D
- P3.02 **Ultra-compact micro structured membrane reactor for production of pure hydrogen at elevated pressures**
F. Dallmann¹; T. Böltken¹; P. Pfeifer¹; A. Kot²; M. Bram²; R. Dittmeyer¹; ¹ Karlsruher Institut für Technologie, Institut für Mikroverfahrenstechnik (IMVT), Eggenstein-Leopoldshafen/D; ² Forschungszentrum Jülich GmbH IEK-2, Jülich/D
- P3.03 **Aufbau komplexer Prozessautomatisierungssysteme basierend auf prozessspektroskopischen Daten**
A. Mendl¹; D. Boskovic¹; S. Panic¹; T. Klahn¹; ¹ Fraunhofer Institute Chemical Technology ICT, Pfinztal/D
- P3.04 **Untersuchungen zur Direktsynthese von Wasserstoffperoxid in einem suspensionsdurchströmten Membranmikroreaktor**
B. Deschner¹; M. Kraut¹; M. Selinsek¹; R. Dittmeyer¹; ¹ Karlsruher Institut für Technologie, Institut für Mikroverfahrenstechnik (IMVT), Eggenstein-Leopoldshafen/D

POSTER

- P3.05 **Charakterisierung des millistrukturierten ART-Plattenreaktors**
A. Rave¹; R. Kuwertz²; G. Fieg³; J. Heck²; ¹ Technische Universität Hamburg-Harburg, Institut für Prozess- und Anlagentechnik, Hamburg/D; ² Ehrfeld Mikrotechnik BTS GmbH, Wendelsheim/D; ³ Technische Universität Hamburg, Institut für Prozess- und Anlagentechnik, Hamburg/D
- P3.06 **Investigation of fouling in continuously operated, milli-structured reactors for solution polymerization**
C. Zander¹; M. Hellmund²; U. Nieken¹; ¹ University of Stuttgart - Institute of Chemical Process Engineering, Stuttgart/D; ² University of Stuttgart – Institute of Chemical Process Engineering, Stuttgart/BASF SE, Ludwigshafen/D
- P3.07 **Verbesserter Wärmeübergang durch Strömungsleitenelemente**
A. Hensel¹; E. Hansjosten¹; A. Wenka¹; W. Benzinger¹; R. Dittmeyer¹; ¹ KIT, IMVT, Eggenstein-Leopoldshafen/D
- P3.08 **Entwicklung eines Mikrosieb basierten Mikrokontaktor für die gas/flüssig Phasentrennung**
K. Dyrda¹; ¹ Karlsruher Institut für Technologie (KIT), Eggenstein-Leopoldshafen/D
- P3.09 **Silica-based hierarchical supports in heterogeneous high-pressure solid-liquid catalysis (HPSLC)**
C. Haas¹; T. Müllner¹; U. Tallarek¹; ¹ Philipps-Universität Marburg/D
- P3.10 **Plate-and-Frame Microreactor with Local Electrical Monitoring of Laminar Mixing Processes**
K. Cobry¹; ¹ Universität Freiburg/D

Stand: 22. Februar 2017

Änderungen vorbehalten. Beitragstitel und Autoren wie vom Einreicher angegeben.

Keine Korrektur durch die DECHEMA.

Subject to alterations. Submission title and authors information as given by the submitter.

No proof by DECHEMA.

DECHEMA e.V.
Theodor-Heuss-Allee 25
60486 Frankfurt am Main
Germany

Dr. Rolf Lenke
Tel.: + 49 69 7564-267
Fax: + 49 69 7564-441
E-Mail: lenke@dechema.de

www.dechema.de