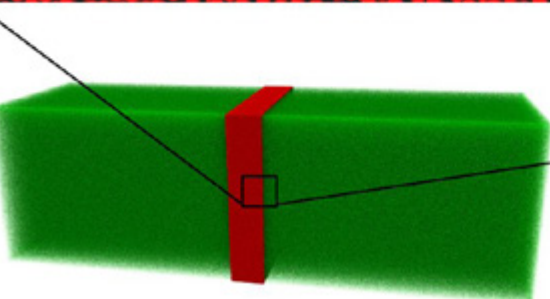
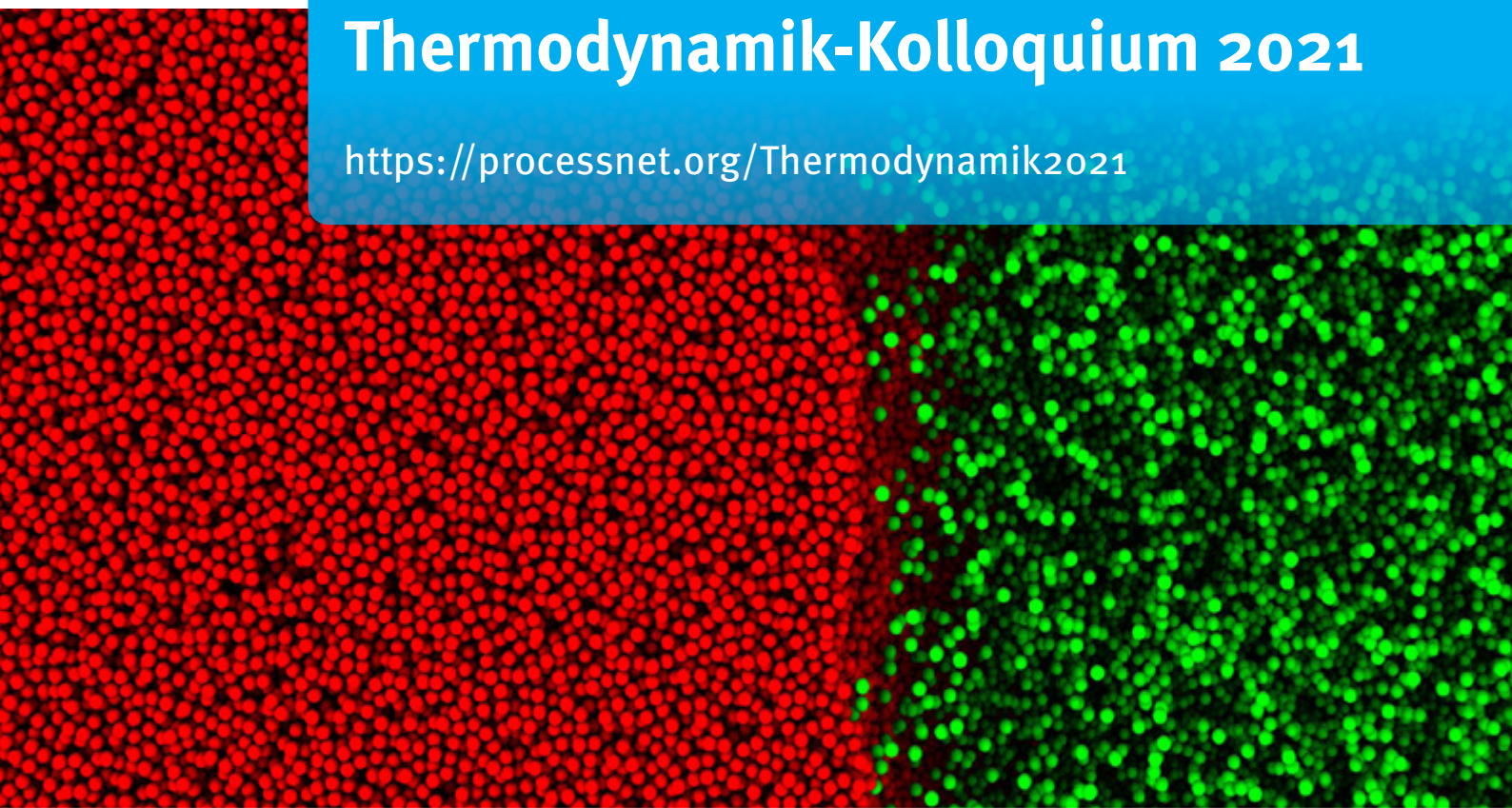


**PROGRAMM**

27. – 29. September 2021 · Online-Event

# Thermodynamik-Kolloquium 2021

<https://processnet.org/Thermodynamik2021>



PROGRAMMÜBERSICHT

Montag, 27. September 2021

	Virtueller Raum I	
13:00	ERÖFFNUNG	
13:20	PLENARVORTRAG Kofke	
14:10	PLENARVORTRAG Schnabel	
14:45	Pause	
	Virtueller Raum I	Virtueller Raum II
	Thermodynamische Modelle	Arbeitsfluide
15:00	Müller	Roskosch
15:15	Marx	Mickoleit
15:30	Neumann	Loth
15:45	Specht	Klein
16:00	Pause	
	Komplexe Gemische	Reaktive Systeme
16:15	Krummnow	Bauer
16:30	Baumeister	Grimm
16:45	Alhadid	Schmalz
17:00	Pause	
	Adsorption	Modellierung und Experimente
17:15	Eller	Radici
17:30	Mayer	Wilde
17:45	Klauck	Quenel
18:00	Ende des 1. Tages	

Dienstag, 28. September 2021

	Virtueller Raum I	
12:40	CHEMPlant	
13:30	WATT-Vortrag	
13:50	Pause	
	Virtueller Raum I	Virtueller Raum II
	Angewandte molekulare Thermodynamik	Industrielle Thermodynamik
14:05	Bauer	Dohm
14:20	Kulkarni	Eckert
14:35	Nagl	Koch
14:50	Herrmann	Schaefer
15:05	Pause	
	Mizellare Systeme	Wärmepumpen und Energiespeicher
15:20	Rehner	Aps
15:35	Rauh	Xiao
15:50	Kroll	Griesbach
16:05	Reinhardt	Pinnau
16:20	Pause	
	Virtueller Raum I	
16:35	POSTER SESSION I	
18:00	Ende des 2. Tages	

PROGRAMMÜBERSICHT

Mittwoch, 29. September 2021

11:00	Geschäftssitzung (gesonderte Einladung, 11:00 – 12:00)	
	Virtueller Raum I	Virtueller Raum II
	Molekularsimulationen	Energiesystemanalyse
13:00	Stephan	Koksharov
13:15	Zimmermann	Damati
13:30	Meier	Wittenburg
13:45	Wöhl	Böckmann
14:00	Pause	
	Virtueller Raum I	
14:15	Poster Session II	
15:45	Pause	
	Virtueller Raum I	Virtueller Raum II
	Polymere	Elektrolyte
15:50	Roth	Semrau
16:05	Bormann	González de Castilla
16:20	Pause	
	Virtueller Raum I	
16:35	PLENARVORTRAG Gurikov	
17:10	PLENARVORTRAG Span	
18:00	SCHLUSSWORTE / PREISVERLEIHUNGEN	
	Ende der Veranstaltung	

Stand: 23.06.2021

## VORTRAGSPROGRAMM

Montag, 27. September 2021

Virtueller Raum I

Chair:

13:00	<b>ERÖFFNUNG</b>
13:20	<b>PLENARVORTRAG</b> <b>The role of molecular modeling in applied thermodynamics</b> D. Kofke <sup>1</sup> ; <sup>1</sup> University at Buffalo, /USA
14:10	<b>PLENARVORTRAG</b> <b>Kompakte Propan-Kältekreise für Wärmepumpen – Entwicklungsfragen zwischen Kältemittelreduktion und Thermodynamik</b> L. Schnabel <sup>1</sup> ; <sup>1</sup> Fraunhofer ISE, /D
14:45	Pause

Virtueller Raum I

## THERMODYNAMISCHE MODELLE

Chair:

15:00	<b>An open source COSMO-RS implementation beyond the sigma profile: including multiple descriptors efficiently</b> S. Müller <sup>1</sup> ; T. Gerlach <sup>1</sup> ; A. González de Castilla <sup>1</sup> ; I. Smirnova <sup>1</sup> ; <sup>1</sup> Hamburg University of Technology (TUHH), Hamburg/D
15:15	<b>Molecular Orientation Structure: Molecular Dynamics Simulation and Perturbation Theory</b> J. Marx <sup>1</sup> ; K. Langenbach <sup>1</sup> ; <sup>1</sup> Universität Innsbruck, Innsbruck/A
15:30	<b>Eine neue Kombination von Zustandsgleichungen in Form der Helmholtz-Energie und von Exzess-Gibbs-Energie Modellen zur Beschreibung reaktiver Gemische</b> T. Neumann <sup>1</sup> ; J. Poplsteinova Jakobsen <sup>2</sup> ; M. Thol <sup>1</sup> ; R. Span <sup>1</sup> ; <sup>1</sup> Ruhr-Universität Bochum, Bochum/D; <sup>2</sup> NTNU - Norwegian University of Science and Technology, Trondheim/N
15:45	<b>NEAT 2.0 – Thermodynamic Modeling of Poorly Specified Mixtures with NMR Spectroscopy and Machine Learning</b> T. Specht <sup>1</sup> ; K. Münnemann <sup>1</sup> ; F. Jirasek <sup>1</sup> ; H. Hasse <sup>1</sup> ; <sup>1</sup> TU Kaiserslautern, Lehrstuhl für Thermodynamik (LTD), Kaiserslautern/D
16:00	Pause

Virtueller Raum I

## KOMPLEXE GEMISCHE

Chair:

16:15	<b>Auflösungs- und Rekristallisationskinetik pharmazeutischer Formulierungen</b> A. Krummnow <sup>1</sup> ; A. Krummnow <sup>2</sup> ; A. Danzer <sup>1</sup> ; K. Lehmkeper <sup>2</sup> ; S. Kyeremateng <sup>2</sup> ; M. Degenhardt <sup>2</sup> ; G. Sadowski <sup>1</sup> ; <sup>1</sup> TU Dortmund, Lehrstuhl für Thermodynamik, Dortmund/D; <sup>2</sup> AbbVie Deutschland GmbH & Co. KG, Ludwigshafen am Rhein/D
16:30	<b>Measurement and modeling of the solubility of <math>\alpha</math>-lactose in water-ethanol electrolyte solutions</b> E. Baumeister <sup>1</sup> ; M. Kohns <sup>2</sup> ; J. Burger <sup>1</sup> ; <sup>1</sup> TU München, Professur für Chemische und Thermische Verfahrenstechnik, Straubing/D; <sup>2</sup> Technische Universität Kaiserslautern, Lehrstuhl für Thermodynamik, Kaiserslautern/D
16:45	<b>Solid-Liquid Equilibria in Deep Eutectic Solvents with Solid Complexes Formation: Experimental Investigation and Modeling</b> A. Alhadid <sup>1</sup> ; C. Jandl <sup>2</sup> ; L. Mokrushina <sup>3</sup> ; M. Minceva <sup>1</sup> ; <sup>1</sup> TUM School of Life Sciences, Freising/D; <sup>2</sup> Technische Universität München, Garching/D; <sup>3</sup> Friedrich Alexander Universität Erlangen-Nürnberg (FAU), Erlangen/D
17:00	Pause

Virtueller Raum I

## ADSORPTION

Chair:

17:15	<b>PC-SAFT Dichtefunktionaltheorie in 3 Dimensionen: Adsorption in geordneten porösen Medien und Freie Lösungsenergien</b> J. Eller <sup>1</sup> ; J. Groß <sup>1</sup> ; <sup>1</sup> Universität Stuttgart, Institut für Technische Thermodynamik und Thermische Verfahrenstechnik, Stuttgart/D
17:30	<b>Computergestützter Entwurf von Kältemitteln für Adsorptionskältemaschinen basierend auf Dichtefunktionaltheorie und PC-SAFT</b> F. Mayer <sup>1</sup> ; L. Spiekermann <sup>1</sup> ; L. Neumaier <sup>1</sup> ; P. Rehner <sup>2</sup> ; J. Schilling <sup>1</sup> ; J. Groß <sup>2</sup> ; A. Bardow <sup>3</sup> ; <sup>1</sup> Energy and Process Systems Engineering, ETH Zürich, Zürich/CH; <sup>2</sup> Institut für Technische Thermodynamik und Thermische Verfahrenstechnik, Universität Stuttgart, Stuttgart/D; <sup>3</sup> Energy and Process Systems Engineering, ETH Zürich / Institut für Energie- und Klimaforschung (IEK-10), Forschungszentrum Jülich, Jülich/CH
17:45	<b>Liquid adsorption equilibria on carbon molecular sieves</b> M. Klauack, J. Guhlmann, T. Hähnel, G. Kalies <sup>1</sup> ; <sup>1</sup> Hochschule für Technik und Wirtschaft Dresden, Dresden/D
18:00	Ende des ersten Veranstaltungstages

## VORTRAGSPROGRAMM

Montag, 27. September 2021

Virtueller Raum I

Chair:

13:00	<b>ERÖFFNUNG</b>
13:20	<b>PLENARVORTRAG</b> <b>The role of molecular modeling in applied thermodynamics</b> D. Kofke <sup>1</sup> ; <sup>1</sup> University at Buffalo, /USA
14:10	<b>PLENARVORTRAG</b> <b>Kompakte Propan-Kältekreise für Wärmepumpen – Entwicklungsfragen zwischen Kältemittelreduktion und Thermodynamik</b> L. Schnabel <sup>1</sup> ; <sup>1</sup> Fraunhofer ISE, /D
14:45	Pause

Virtueller Raum II

## ARBEITSFLUIDE

Chair:

15:00	<b>Sechs Jahre F-Gas-Verordnung: Wo stehen wir heute?</b> D. Roskosch <sup>1</sup> ; <sup>1</sup> Energy and Process Systems Engineering, ETH Zürich, Zürich/CH
15:15	<b>Screening ternärer Gemische für eine Wärmepumpenanwendung</b> E. Mickoleit <sup>1</sup> ; C. Grau Turuelo <sup>1</sup> ; A. Jäger <sup>1</sup> ; K. Stöckel <sup>2</sup> ; U. Hesse <sup>2</sup> ; C. Breitkopf <sup>1</sup> ; <sup>1</sup> TU Dresden/Institut für Energietechnik/Professur für Technische Thermodynamik, Dresden/D; <sup>2</sup> TU Dresden/Institut für Energietechnik/Bitzer-Professur für Kälte-, Kryo- und Kompressorentchnik, Dresden/D
15:30	<b>Bewertung von natürlichen Arbeitsfluidgemischen in der Kompressionswärmepumpe mit Lösungskreis im Vergleich zu reinen synthetischen Arbeitsfluiden</b> M. Loth <sup>1</sup> ; S. Kabelac <sup>1</sup> ; <sup>1</sup> Leibniz Universität Hannover, Institut für Thermodynamik, Hannover/D
15:45	<b>Thermophysical Properties of Liquids with Dissolved Gases as Working Fluids in Chemical and Energy Engineering</b> T. Klein <sup>1</sup> ; M. Rausch <sup>1</sup> ; T. Koller <sup>1</sup> ; A. Fröba <sup>1</sup> ; <sup>1</sup> Friedrich Alexander Universität Erlangen-Nürnberg (FAU), Erlangen/D
16:00	Pause

Virtueller Raum II

## REAKTIVE SYSTEME

Chair:

16:15	<b>UV-Vis-Absorptionsspektroskopie zur in situ Untersuchung des Rußbildungsprozesses</b> F. Bauer <sup>1</sup> ; F. Huber <sup>2</sup> ; S. Will <sup>2</sup> ; <sup>1</sup> Friedrich-Alexander-Universität (FAU), Erlangen-Nürnberg, Erlangen/D; <sup>2</sup> Lehrstuhl für Technische Thermodynamik, FAU Erlangen-Nürnberg, Erlangen/D
16:30	<b>Gasphasen-Reaktionen von Ferrocen: Produktidentifikation per Vakuum-Ultraviolett (VUV)-Photoionisation</b> S. Grimm <sup>1</sup> ; S. Baik <sup>2</sup> ; P. Hemberger <sup>3</sup> ; T. Kasper <sup>4</sup> ; A. Kempf <sup>2</sup> ; B. Atakan <sup>1</sup> ; <sup>1</sup> Universität Duisburg-Essen, Lehrstuhl für Thermodynamik, Duisburg/D; <sup>2</sup> Universität Duisburg-Essen, Lehrstuhl für Fluidodynamik, Duisburg/D; <sup>3</sup> Paul Scherrer Institut (PSI), Villigen/CH; <sup>4</sup> Universität Duisburg-Essen, Fachgebiet für Massenspektrometrie in reaktiven Strömungsprozessen, Duisburg/D
16:45	<b>Exploration von Reaktionspfaden mit dem ChemTraYzer</b> C. Huang <sup>1</sup> ; F. Schmalz <sup>1</sup> ; W. Kopp <sup>1</sup> ; L. Krep <sup>1</sup> ; K. Leonhard <sup>1</sup> ; <sup>1</sup> RWTH Aachen, Aachen/D
17:00	Pause

Virtueller Raum II

## MODELLIERUNG UND EXPERIMENTE

Chair:

17:15	<b>Charakterisierung von Polymerelektrolytmembranen mittels Impedanzspektroskopie unter Berücksichtigung der Thermodynamik irreversibler Prozesse</b> P. Radici <sup>1</sup> ; M. Willke <sup>1</sup> ; S. Kabelac <sup>1</sup> ; <sup>1</sup> Gottfried Wilhelm Leibniz Universität Hannover, Garbsen/D
17:30	<b>Experimentelle Bestimmung und vereinfachte Modellierung des Extinktionskoeffizienten von offenzelligen keramischen Schäumen</b> T. Fieback <sup>1</sup> ; L. Wilde <sup>1</sup> ; K. Markuske <sup>1</sup> ; E. Wertzner <sup>1</sup> ; R. Wulff <sup>1</sup> ; <sup>1</sup> TU Bergakademie Freiberg, Freiberg/D
17:45	<b>Zeotrope Propan – Isobutan Gemische in Wärmepumpen mit höherem Temperaturhub: Eine experimentelle Untersuchung</b> J. Quenel <sup>1</sup> ; M. Anders <sup>1</sup> ; B. Atakan <sup>1</sup> ; <sup>1</sup> Universität Duisburg-Essen/D
18:00	Ende des ersten Veranstaltungstages

## VORTRAGSPROGRAMM

Dienstag, 28. September 2021

Virtueller Raum I

12:40 **chemPLANT-Wettbewerb** (12:40 – 13:25)

Chair:

13:30 **WATT-Vortrag**

13:50 Pause

Virtueller Raum I

## ANGEWANDTE MOLEKULARE THERMODYNAMIK

Chair:

14:05 **Framework zur Implementierung von Thermischen Zustandsgleichungen**  
 G. Bauer<sup>1</sup>; P. Rehner<sup>1</sup>; J. Groß<sup>2</sup>; <sup>1</sup> Universität Stuttgart, Institut für Technische Thermodynamik und Thermische Verfahrenstechnik, Stuttgart/D; <sup>2</sup> Universität Stuttgart, Institut für Technische Thermodynamik und Thermische Verfahrenstechnik, Stuttgart/D

14:20 **Multi-Criteria Optimisation of Molecular Models of Water Using the Reduced Units Method**  
 A. Kulkarni<sup>1</sup>; M. Bortz<sup>2</sup>; K. Küfer<sup>2</sup>; M. Kohns<sup>1</sup>; H. Hasse<sup>1</sup>; <sup>1</sup> Technische Universität Kaiserslautern, Lehrstuhl für Thermodynamik, Kaiserslautern/D; <sup>2</sup> Fraunhofer ITWM, Kaiserslautern/D

14:35 **Grenzflächeneigenschaften in reaktiven Flüssig-Flüssig-Systemen**  
 R. Nagl<sup>1</sup>; P. Zimmermann<sup>1</sup>; T. Zeiner<sup>1</sup>; <sup>1</sup> Technische Universität Graz, Graz/A

14:50 **Eine verbesserte Referenzformulation für die Viskosität von Propan**  
 S. Herrmann<sup>1</sup>; R. Hellmann<sup>2</sup>; E. Vogel<sup>3</sup>; <sup>1</sup> Hochschule Zittau/Görlitz, Zittau/D; <sup>2</sup> Helmut-Schmidt-Universität, Hamburg/D; <sup>3</sup> Universität Rostock, Rostock/D

15:05 Pause

Virtueller Raum I

## MIZELLARE SYSTEME

Chair:

15:20 **Eigenschaften von mizellaren Systemen mit klassischer Dichtefunktionaltheorie**  
 P. Rehner<sup>1</sup>; B. Bursik<sup>1</sup>; J. Gross<sup>1</sup>; <sup>1</sup> Universität Stuttgart, Stuttgart/D

15:35 **Berechnung der Bildung von inversen Mizellen**  
 S. Rau<sup>1</sup>; S. Enders<sup>2</sup>; <sup>1</sup> KIT - Karlsruhe Institute of Technology, Karlsruhe/D; <sup>2</sup> KIT - Karlsruher Institut für Technologie, Karlsruhe/D

15:50 **Solubilisierung unpolarer Komponenten in mizellaren Systemen**  
 P. Kroll<sup>1</sup>; C. Brandenbusch<sup>1</sup>; S. Enders<sup>2</sup>; G. Sadowski<sup>1</sup>; <sup>1</sup> TU Dortmund, Lehrstuhl für Thermodynamik, Dortmund/D; <sup>2</sup> KIT Institut für Technische Thermodynamik und Kältetechnik, Karlsruhe/D

16:05 **Beschreibung des Aggregationsverhalten wässriger Tensidsysteme in Anwesenheit schwach polarer Komponenten**  
 A. Reinhardt<sup>1</sup>; S. Enders<sup>2</sup>; <sup>1</sup> KIT - Karlsruhe Institute of Technology, Karlsruhe/D; <sup>2</sup> KIT - Karlsruher Institut für Technologie, Karlsruhe/D

16:20 Pause

Virtueller Raum I

16:35 **POSTER SESSION I**

18:00 Ende des zweiten Veranstaltungstages

## VORTRAGSPROGRAMM

Dienstag, 28. September 2021

Virtueller Raum I

12:40 **chemPLANT-Wettbewerb** (12:40 – 13:25)

Chair:

13:30 **WATT-Vortrag**

13:50 Pause

Virtueller Raum II

## INDUSTRIELLE THERMODYNAMIK

Chair:

14:05 **Thermodynamik und Transporteigenschaften – EFCE-Umfrage 2020 zum Bedarf der Industrie**  
 R. Dohrn<sup>1</sup>; G. Kontogeorgis<sup>2</sup>; I. Economou<sup>3</sup>; J. de Hemptinne<sup>4</sup>; A. ten Kate<sup>5</sup>; S. Kuitunen<sup>6</sup>; M. Mooijer<sup>7</sup>; L. Fele Zilnik<sup>8</sup>; V. Vesovic<sup>9</sup>;  
<sup>1</sup> Bayer AG, Leverkusen/D; <sup>2</sup> DTU Chemical Engineering, Technical University of Denmark (DTU), Lyngby/DK; <sup>3</sup> Texas A&M University at Qatar, Doha/Q; <sup>4</sup> IFP Energies nouvelles (IFPEN), Rueil-Malmaison/F; <sup>5</sup> Nouryon, Deventer/NL; <sup>6</sup> Neste Engineering Solutions, Porvoo/FIN; <sup>7</sup> Shell Global Solutions, Amsterdam/NL; <sup>8</sup> National Institute of Chemistry, Ljubljana/SLO; <sup>9</sup> Imperial College, London/UK

14:20 **Vom Labor zum Modell – Verständnis und Optimierung von Direct Air Capture Prozessen**  
 M. Eckert<sup>1</sup>; R. Joh<sup>1</sup>; <sup>1</sup> Siemens Energy Global GmbH & Co KG, Frankfurt am Main/D

14:35 **Abschätzung der NOx-Restmenge in einer Rauchgaswasserwäsche**  
 F. Menezes<sup>1</sup>; O. Koch<sup>1</sup>; <sup>1</sup> Linde GmbH - Linde Engineering, Pullach/D

14:50 **Mass Flux Through Vapor-Liquid Interfaces: A Molecular Simulation Study**  
 D. Schaefer<sup>1</sup>; S. Stephan<sup>1</sup>; K. Langenbach<sup>1</sup>; H. Hasse<sup>1</sup>; <sup>1</sup> TU Kaiserslautern, Kaiserslautern/D

15:05 Pause

Virtueller Raum II

## WÄRMEPUMPEN UND ENERGIESPEICHER

Chair:

15:20 **Theoretische Untersuchung von Kapillarwärmeübertragern in Wärmepumpen**  
 M. Aps<sup>1</sup>; B. Atakan<sup>2</sup>; <sup>1</sup> Universität Duisburg-Essen, Duisburg/D; <sup>2</sup> Universität Duisburg - Essen, Duisburg/D

15:35 **Großwärmepumpen zur Nahwärmeversorgung – Untersuchung von Betriebsstrategien**  
 S. Xiao<sup>1</sup>; D. Nefodov<sup>1</sup>; M. Richter<sup>1</sup>; T. Urbaneck<sup>1</sup>; M. Wördemann<sup>2</sup>; <sup>1</sup> Technische Universität Chemnitz, Chemnitz/D; <sup>2</sup> Viessmann Deutschland GmbH, Berlin/D

15:50 **Numerische Analyse von kombinierten Wärmepumpen-Eis-Energiespeicher-Systemen zur Nutzung gebäudeintern anfallender Abwärme in Nicht-Wohngebäuden**  
 M. Griesbach<sup>1</sup>; A. König-Haagen<sup>1</sup>; D. Brüggemann<sup>1</sup>; <sup>1</sup> Universität Bayreuth, Bayreuth/D

16:05 **Thermische Analyse von Salzhydraten für die Anwendung als Phase Change Materials**  
 S. Pinnau<sup>1</sup>; C. Grau Turuelo<sup>1</sup>; M. Glorius<sup>1</sup>; C. Breitkopf<sup>1</sup>; <sup>1</sup> Technische Universität Dresden, Dresden/D

16:20 Pause

Virtueller Raum I

16:35 **POSTER SESSION I**

18:00 Ende des zweiten Veranstaltungstages

## VORTRAGSPROGRAMM

Mittwoch, 29. September 2021

Virtueller Raum I

## MOLEKULARSIMULATIONEN

Chair:

- 13:00 **The Lennard-Jones fluid revisited**  
S. Stephan<sup>1</sup>; J. Staubach<sup>1</sup>; U. Deiters<sup>2</sup>; J. Vrabec<sup>3</sup>; H. Hasse<sup>1</sup>; <sup>1</sup> TU Kaiserslautern, Kaiserslautern/D; <sup>2</sup> University of Cologne, Köln/D; <sup>3</sup> TU Berlin, Berlin/D
- 13:15 **Einblicke in die Thermodiffusion molekularer Fluide: Bottom-Up-Simulationen hin zu komplexen Systemen**  
N. Zimmermann<sup>1</sup>; D. Markthaler<sup>1</sup>; N. Hansen<sup>1</sup>; <sup>1</sup> Universität Stuttgart, Stuttgart/D
- 13:30 **Berechnung thermodynamischer Eigenschaften einfacher Fluide durch MC-Simulationen mit ab initio-Potentialen**  
P. Ströker<sup>1</sup>; R. Hellmann<sup>1</sup>; K. Meier<sup>1</sup>; <sup>1</sup> Helmut-Schmidt-Universität / Universität der Bundeswehr Hamburg, Hamburg/D
- 13:45 **Kombination von Ab-initio Molekulardynamik und Indirect Hard Modeling zur quantitativen Spektrenauswertung von messtechnisch unzugänglichen Systemen**  
J. Wöhl<sup>1</sup>; W. Kopp<sup>1</sup>; L. Bahr<sup>1</sup>; K. Leonhard<sup>1</sup>; H. Koß<sup>1</sup>; <sup>1</sup> RWTH Aachen Universität, Aachen/D

14:00 Pause

Virtueller Raum I

## 14:15 POSTER SESSION II

15:45 Pause

Virtueller Raum I

## POLYMERE

Chair:

- 15:50 **Modellierung des Salzeinflusses auf den Quellgrad von vernetztem Poly-N-isopropylacrylamid in wässriger Lösung**  
A. Roth<sup>1</sup>; S. Enders<sup>2</sup>; <sup>1</sup> KIT - Karlsruhe Institute of Technology, Karlsruhe/D; <sup>2</sup> KIT - Karlsruher Institut für Technologie, Karlsruhe/D
- 16:05 **Modellierung anormaler Sorptionskinetiken in Polymeren**  
D. Borrmann<sup>1</sup>; A. Danzer<sup>1</sup>; G. Sadowski<sup>1</sup>; <sup>1</sup> TU Dortmund, Lehrstuhl für Thermodynamik, Dortmund/D

16:20 Pause

Virtueller Raum I

Chair:

- 16:35 **PLENARVORTRAG**  
**Thermodynamic considerations in processing of highly porous materials**  
P. Gurikov<sup>1</sup>; <sup>1</sup> Technische Universität Hamburg (TUHH), Hamburg/D
- 17:10 **PLENARVORTRAG**  
**Von Punkt-zu-Punkt-Verbindungen zu industriellen CO<sub>2</sub>-Transport Netzwerken**  
R. Span<sup>1</sup>; <sup>1</sup> Ruhr-Universität Bochum, Bochum/D

18:00 **Schlussworte / Preisverleihungen / Ende der Veranstaltung**

## VORTRAGSPROGRAMM

Mittwoch, 29. September 2021

Virtueller Raum II

## ENERGIESYSTEMANALYSE

Chair:

- 13:00 **Thermodynamische und Ökonomische Analyse von Strom-Wärme- Strom-Speichersystemen**  
J. Koksharov<sup>1</sup>; <sup>1</sup> Technische Universität Darmstadt, Darmstadt/D
- 13:15 **Der Beitrag von Müllverbrennungsanlagen zur Dekarbonisierung von Wärmenetzen**  
R. Damati<sup>1</sup>; C. Schäfer<sup>1</sup>; N. Topuz<sup>1</sup>; F. Alsmeyer<sup>1</sup>; A. Graßmann<sup>1</sup>; B. Dohmes<sup>2</sup>; A. Benz<sup>2</sup>; T. Brangers<sup>3</sup>; H. Roos<sup>3</sup>; <sup>1</sup> Hochschule Niederrhein, Krefeld/D; <sup>2</sup> SWK ENERGIE GmbH, Krefeld/D; <sup>3</sup> EGK Entsorgungsgesellschaft Krefeld GmbH & Co. KG, Krefeld/D
- 13:30 **Transiente Exergieanalyse und Verbesserung des dynamischen Betriebs eines GuD-Kraftwerks**  
R. Wittenburg<sup>1</sup>; K. Müller<sup>1</sup>; D. Holtz<sup>1</sup>; <sup>1</sup> Universität Rostock, Rostock/D
- 13:45 **Modellierung und Simulation eines fassadenintegrierten Adsorptionssystems zur solaren Gebäudekühlung**  
O. Böckmann<sup>1</sup>; M. Schäfer<sup>2</sup>; <sup>1</sup> Universität Stuttgart, Stuttgart/D; <sup>2</sup> Universität Stuttgart, Stuttgart/D

14:00 Pause

Virtueller Raum I

## 14:15 POSTER SESSION II

15:45 Pause

Virtueller Raum II

## ELEKTROLYTE

Chair:

- 15:50 **Konsistente Modellierung von CO<sub>2</sub>-reichen Gemischen und Salzlaken mit Helmholtz-Gemischmodellen**  
B. Semrau<sup>1</sup>; D. Rowland<sup>2</sup>; M. Tholt<sup>1</sup>; R. Span<sup>1</sup>; <sup>1</sup> Ruhr Universität Bochum, Bochum/D; <sup>2</sup> The University of Western Australia, Perth/AUS
- 16:05 **A Gibbs-Duhem consistent extension of the Pitzer-Debye-Hückel term for dielectric decrement and underscreening**  
A. González de Castilla<sup>1</sup>; S. Müller<sup>2</sup>; I. Smirnova<sup>2</sup>; <sup>1</sup> Technische Universität Hamburg (TUHH), Hamburg/D; <sup>2</sup> Technische Universität Hamburg (TUHH), Hamburg/D

16:20 Pause

Virtueller Raum I

Chair:

- 16:35 **PLENARVORTRAG**  
**Thermodynamic considerations in processing of highly porous materials**  
P. Gurikov<sup>1</sup>; <sup>1</sup> Technische Universität Hamburg (TUHH), Hamburg/D
- 17:10 **PLENARVORTRAG**  
**Von Punkt-zu-Punkt-Verbindungen zu industriellen CO<sub>2</sub>-Transport Netzwerken**  
R. Span<sup>1</sup>; <sup>1</sup> Ruhr-Universität Bochum, Bochum/D

18:00 **Schlussworte / Preisverleihungen / Ende der Veranstaltung**

## kontakt

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

Jacqueline Luque-Hornero  
Telefon: + 49 69 7564 243  
E-Mail: [jacqueline.luque@dechema.de](mailto:jacqueline.luque@dechema.de)  
[www.dechema.de/LVT\\_MIS\\_GFSP21](http://www.dechema.de/LVT_MIS_GFSP21)