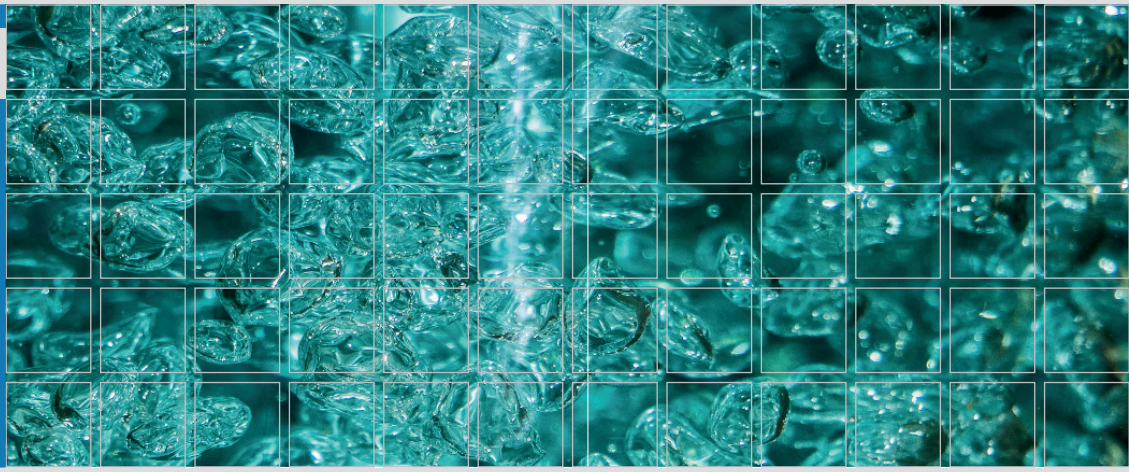
TU Graz

Institut für Chemische Verfahrenstechnik und Umwelttechnik

CEET



CEET Konkret 2019

Impressum

Herausgeber	Matthäus Siebenhofer
Layout	Annika Grafschafter
Redaktion	Annika Grafschafter, Georg Rudelstorfer
Lektorat	Annika Grafschafter
Titelbild	Vorderseite: Detailaufnahme des Strömungsmuster in einem Airlift Reaktor (fotografiert von Thomas Pichler)
	Rückseite: Ausschnitt eines Taylor-Couette Disc Contactors - DN300 (fotografiert von Annika Grafschafter)
	Die Rechte liegen beim Institut für Chemische Verfahrenstechnik und Umwelttechnik

© *2019* Verlag der Technischen Universität Graz
www.tugraz-verlag.at

ISBN 978-3-85125-719-9

DOI 10.3217/978-3-85125-719-9



Dieses Werk ist lizenziert unter einer
Creative Commons Namensnennung 4.0 International Lizenz.
https://creativecommons.org/licenses/by/4.0/deed.de


CEET
pioneering
the future

Inhalt

Editorial 3
Das Leben des Matthäus Siebenhofer 4
Direct Reduction of Iron Carbonate 10
Carbon Dioxide Hydrogenation 12
Solubility Assessment of Purified Kraft Lignin 14
Hydraulics of continuous multiphase flow 16
Droplet Interactions in Liquid-Liquid Systems 18
Modelling of Interfacial Mass Transfer 20
Strategy optimization of PEM fuel cell start-up process 24
High-pressure Hydrogen production for Polymer Electrolyte Fuel Cells from Renewable Ressources 26
EET erfolgreich am Markt 28
Highlights der Forschungsgruppe „Brennstoffzellen und Wasserstoffsysteme“ 30
Das war die AIChE 2019 in Orlando 33
ERASMUS+ sowie weitere internationale Aktivitäten 2019 38
Awards, Familiäres und allerlei Statistik 39
Abschlussarbeiten 2019 42
Veröffentlichungen 43
Lehrveranstaltungen 49
MitarbeiterInnen 51



Editorial

Dieses CEET Konkret 2019 ist der Arbeitsnachweis unseres Institutes für das Jahr 2019 und wir dürfen in dieser Broschüre mit Freude den wissenschaftlichen Erfolg unseres Institutes zusammenfassen.

Wir haben die Ergebnisse und Erkenntnisse unserer Wissenschaftlerinnen und Wissenschaftler fleißig publiziert, und wir haben sie erfolgreich bei internationalen Tagungen präsentiert. Mehrere Awards belegen das. Zweifellos war die Teilnahme am AIChE Annual Meeting 2019 in Orlando heuer der Höhepunkt in der wissenschaftlichen Öffentlichkeitsarbeit unseres Institutes, Höhepunkt sowohl in Bezug auf die Anzahl unserer Vorträge, aber auch in Bezug auf die Anzahl der Teilnehmerinnen und Teilnehmer des Institutes.

Wir haben in diesem Jahr wieder erfolgreich Studierende zum Abschluss des Masterstudiums und zum Abschluss des Dissertationsstudiums geführt, und wir haben in der Lehre trotz personeller Mangelwirtschaft unsere Studierenden mit Freude und Engagement unterstützt.

Neben unserem Auftrag der Weiterentwicklung von Forschung und Lehre konnten wir auch in diesem Jahr unsere Kontakte zur Industrie durch erfolgreiche Serviceleistung verdichten.

Für unser Institut ist das zu Ende gehende Jahr auch eine Zeit des Umbruches. Durch Vertragsablauf verlassen mehrere „tragende Säulen“ in Forschung und Lehre das Institut.

Auch ich übergebe nach zwölf Jahren die Institutsleitung an die nächste Generation und bereite mich auf meinen nächsten Lebensabschnitt vor. Mit Zuversicht freue ich mich aber schon jetzt auf die Dokumentation der erfolgreichen Arbeit dieses Institutes im kommenden Jahr.

Als Institutsleiter darf ich mich bei allen Mitarbeiterinnen und Mitarbeitern des Institutes für Chemische Verfahrenstechnik und Umwelttechnik dafür bedanken, dass sie dafür gesorgt haben, dass dieses Jahr 2019 ein großartiges Jahr gewesen ist.

Bedanken möchte ich mich bei allen Mitarbeiterinnen und Mitarbeitern des Institutes für Chemische Verfahrenstechnik und Umwelttechnik auch dafür, dass sie mir während meiner gesamten Zeit als Institutsleiter vertraut haben und mich in jeder Hinsicht unterstützt haben.

Und bei Frau Dr. Grafschafter möchte ich mich dafür bedanken, dass sie in den letzten drei Jahren als Chefredakteurin für das „Outfit“ des CEET Konkret gesorgt hat.

Ich wünsche allen Leserinnen und Lesern des CEET Konkret 2019, es ist bestimmt eine sehr spannende Lektüre, erholsame Weihnachtsfeiertage und ein erfolgreiches Jahr 2020.

Matthäus Siebenhofer

Das Leben des Matthäus Siebenhofer

Annika Grafschafter



Univ.-Prof. Dipl.-Ing. Dr.techn. darf sich nicht jeder schimpfen, aus gutem Grund, denn es steckt eine Menge Arbeit dahinter. Aber bevor ich davon erzählen werden, wie man sich im Laufe des Lebens so viele Titel verdienen kann, folgt ein kurzer Überblick über „Das Leben des Matthäus Siebenhofer“.

Geboren wurde Matthäus, in späterer Folge auch MSi genannt, am 13.02.1955 im Elternhaus in Krakauschatten. Falls Ihr euch jetzt auch fragt: „Wo zum Kuckuck ist Krakauschatten?“ Es versteckt sich zwischen den Schladminger Tauern und den Murbergen. Seine Kindheit durfte Matthäus ebenso in Krakauschatten verbringen, wo er ab und an jemanden einen Lausbubenstreich spielte, oder „potschat“ mit einem scharfen Messer seine Nase malträtierte. Nichtsdestotrotz überstand er diesen Lebensabschnitt, mehr oder weniger ohne schwerwiegende Verletzungen, und beschloss nach seiner Reifezeit Krakauschatten vorübergehend hinter sich zu lassen um studieren zu gehen.

Dafür verschlug es ihn 1973 nach Graz wo er sein Studium als Chemie-Ingenieur begann. Seine beste Erfahrung während dieser Zeit war es Teil einer Gruppe zu sein, die er als „problemlösungsfixiert“ bezeichnete. 9 junge Studierende halfen sich bei jedem aufkommenden Problem gegenseitig weiter und ohne jeglichen Konkurrenzkampf wurden Lösungsansätze gemeinsam entwickelt. Vergleicht man dies mit der jetzigen Ellbogen-Gesellschaft, würde sich unsereins solche Zeiten gerne zurückwünschen. Umso schöner war es zu hören, dass der Kontakt zu dieser neunköpfigen Gruppe nach wie vor besteht, jedoch mit dem Unterschied, dass sich die Anzahl der Gruppenmitglieder im Laufe der Jahre verdoppelt hat, da nun jeder, um es mit Matthäus Worten auszudrücken: „unter der Fuchtel steht“. Weiters erzählte Matthäus bei einem kurzen Interview, dass die Triebkraft dieser „Problemlösungsorientiertheit“ in späterer Folge auch die Jugend infizierte, und dass diese Erkenntnis ihm immer in guter Erinnerung bleiben wird. Nach dem Motto „Geht nicht, gibt’s nicht“ motivierte Matthäus seit 2005 als Institutsleiter am Institut für Chemische Verfahrenstechnik und Umwelttechnik (früher: Institut für Verfahrenstechnik) seine Mitarbeiter und brachte dadurch auch eine unbeschreibliche Dynamik mit ans Institut.

Zwischen Studiumabschluss und Institutsleiter liegt jedoch ein langer Weg, der hier kurz tabellarisch dargestellt werden soll:

- 1973 - 1979 Studium der Technischen Chemie-Chemieingenieurwesen an der Technischen Universität Graz
- 1979 - 1983 Dissertation bei Professor Marr auf dem Gebiet der Solventbeschreibung in der Extraktion mit chemischer Reaktion
- 1983 Promotion zum Doktor der Technischen Wissenschaften
- 1982 - 1986 Vertragsassistent am Institut für Verfahrenstechnik der Technischen Universität Graz
- 1986 - 1987 Universitätsassistent am Institut für Verfahrenstechnik der Technischen Universität Graz
- 1987 Ziviltechnikerprüfung für Technische Chemie
- 1987 - 1992 F&E, Firma Refractories Consulting & Engineering GmbH in Radenthein
- 1992 - 1996 F&E und Engineering für Sonderverfahren bei Firma VTU GmbH in Graz
- 1994 Konzessionsprüfung für die befugten bewilligungspflichtigen Gewerbe der Technischen Büros
- 1996 - 1997 Technische Leitung des gesamten Versuchs- und Produktionsbetriebes der Firma ABRG GmbH in Arnoldstein

- 1997- 2005 F&E und Engineering für Sonderverfahren bei Firma VTU GmbH in Graz
- Seit 1995 Lehrbeauftragter an der Montanuniversität Leoben
- Seit 2000 Lehrbeauftragter an der Technischen Universität Graz
- 2005 Ruf an die Technische Universität Graz

Seitdem Matthäus am 02. Mai 2005 seine Stiftungsprofessur für Reaktive Systeme am Institut für Chemische Verfahrenstechnik und Umwelttechnik angetreten ist, betreute oder beurteilte er von 2006 - 2019 in Summe 52 Dissertationen und 58 Diplomarbeiten bzw. Masterarbeiten. Diese Zahlen scheinen schier unvorstellbar zu sein, wobei ich mir sicher bin, dass es weit mehr Arbeiten gibt bei denen er seine Finger mit im Spiel hatte.

Nicht nur die Betreuung studentischer Arbeiten, sondern auch das Lehren ist und bleibt eine Leidenschaft von Matthäus. So durfte beispielsweise auch ich während meines Studiums in den Vorlesungen Erzählungen aus der Praxis lauschen und industrienahe Rechenbeispiele lösen. In der Zeit von 2000 - 2019 wurden insgesamt 313 Lehrveranstaltung von MSi gehalten oder mitbetreut.

Die meisten unserer InstitutsmitarbeiterInnen schätzen an Matthäus, dass er jedem ein offenes Ohr schenkt, gleich ob es sich um Anmerkungen, Fragen, verfahrenstechnische, chemische, reaktionstechnische oder aber auch persönliche Probleme handelt. Dank seiner „Problemlösungsfixiertheit“ die er als Student erlernte, wird schnell, aber auch überlegt gehandelt, wodurch sich fast alle Stolpersteine aus dem Weg räumen lassen. Man könnte somit sagen, dass er schon vielen aus dem Schlamassel geholfen hat, wahrscheinlich auch sich selbst.

Will man eine Besprechung mit Matthäus haben, so kann man sich schon mal um 6 Uhr morgens auf der Dachterrasse in der Inffeldgasse 13 wiederfinden, wo sich Matthäus fast täglich (sofern es die Lichtverhältnisse zulassen) ums perfekte Sonnenaufgangsfoto bemüht. Als ein weiterer, obligatorischer Besprechungsplatz dient das „Raucherplatzerl“ am Hinterausgang des Institutes, dass schon sehr oft zum Brainstorming verwendet wurde.

Würde mich jemand Fragen womit ich Matthäus assoziiere, würde mir „The Chemical Engineer’s Bible“, auch bekannt als „Perry’s Chemical Engineers‘ Handbook“ einfallen, da er ein schier unendliches Wissen in allen verfahrenstechnischen und chemischen Bereichen zu haben scheint und dieses trotz seines etwas höheren Alters (entschuldige mich Matthäus) jederzeit abrufen kann. Da kann sich so manch junge KandidatInn ein Beispiel daran nehmen.

Abseits der Verfahrenstechnik und des Institutes liegen seine Interessen bei der Fotografie (wie schon erwähnt) und beim „Speed-Hiking“ seines Hausberges. Weiters ist zu erwähnen, dass er auch Teilhaber eines Kraftwerkes in Krakauschatten ist. Sein größtes Interesse widmet er, so möchte man hoffen, jedoch seiner Gattin und seiner Familie.

Lieber Matthäus, auch wenn du noch zwei Monate vor dir hast, möchte das ICVT diese Gelegenheit nutzen um sich von ganzem Herzen bei dir zu bedanken. Ich glaube ich kann im Namen aller sagen, dass wir dir immer gerne „zugelost“ haben, wenn du von deinen Erfahrungen und Geschichten erzählt und dein Wissen weitergegeben hast. Du wirst uns allen nicht nur als Institutsleiter, sondern auch als Mensch fehlen. Das Niveau mit dem du wissenschaftlich und zwischenmenschlich das Institut geleitet hast, muss „Mann“ dir erst mal nachmachen.

In diesem Sinne wünscht dir das ganze ICVT:

„Einen sicheren und erfolgreichen neuen Lebensabschnitt!“

P.S.: Lass dich auch im Ruhestand manchmal am Institut blicken!

A soft sensor methodology for the precise spatial and temporal prediction of thermodynamic states inside a tubular reactor

Fabian Zapf, Elisabeth Rammerstorfer, Erich Jeitler, Günther Holzer, Thomas Wallek

Motivation

Inside a continuous chemical reactor, in which phase transitions occur during the reaction, thermodynamic conditions as well as compositions of the process stream are subjected to significant spatial and temporal changes. As exothermic chemical reactions often show temperature peaks which are likely to destroy catalysts and components or adversely affect their service life, this limited information about internal reactor states poses a considerable risk with regard to product quality and process reliability. Therefore, this work proposes a novel approach, which enables a more detailed prediction of the reaction progress in view of avoiding undesired temperature peaks, based on measured process parameters of the input and output streams only.

Approach

As a reference model, a production plant for ethyl tert-butyl ether (ETBE) as part of the gasoline line of a refinery is chosen. The reactor configuration is shown in Fig. 1.

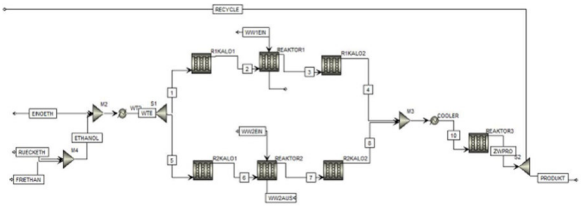


Fig. 1: Reference model in Aspen Plus®

The liquid educts of the reaction, in particular ethanol and iso-butene, are fed into a cooled tubular reactor in a counterflow arrangement, and the products also leave the reactor in a liquid state. Although the exothermic nature of the reaction leads to partial evaporation inside the reactor, the reaction solely occurs in the liquid phase. The reaction network (abbreviations see Tab. 1) for this type of ETBE synthesis and its kinetics has most recently been published by [1] and [2]:

Main reaction:

$$EtOH + IB \leftrightarrow ETBE$$

Side reactions:

$$2\,IB \leftrightarrow DIB$$
$$2\,EtOH \leftrightarrow DEE + H_2O$$
$$H_2O + NB \leftrightarrow ESBE$$
$$IB + H_2O \leftrightarrow TBA$$

Abbreviation	Name
ETBE	Ethyl-tert-butylether
EtOH	Ethanol
IB	iso-butene
NB	n-butene
DIB	Diisobutenes
DEE	Diethylether
ESBE	Ethyl sec-butylether
TBA	Tert-butyl alcohol

Tab. 1: Reactions and used abbreviations

The influence of the phase equilibrium on the kinetics has been described in literature [3]. Via a user kinetic extension, the kinetics for ETBE and related side reactions [4] are implemented into the commercial flow-sheet simulator KBC PetroSIM®, which allows for static and dynamic simulations. The combination of a user kinetic model with a commercial process simulation tool opens access to a broad variety of thermodynamic property models, i.e., activity coefficients and equations of state, which makes it possible to model reactions for practically all kinds of highly non-ideal systems. Because the kinetic model for the reference reaction is based on activities, the liquid phase fugacities in the course of vapor-liquid equilibrium calculations are described by the NRTL activity coefficient

model [5], where missing binary parameters are estimated using the modified UNIFAC (Dortmund) group contribution approach. The formation of a vapor phase has a significant influence on the hydrodynamics inside the reactor because, for reasons of continuity, the flow rate increases. Thereby, residence time of the reactants in the liquid phase and consequently reaction yields decrease significantly.

Results

The resulting output of the model is a real-time visualization of the key process parameters, including the precise spatial and temporal prediction of temperatures inside the reactor as well as wall surface temperatures. Fig. 2 and Fig. 3 show the calculated temperature and reactant concentration profile inside the reactor for a reference case.

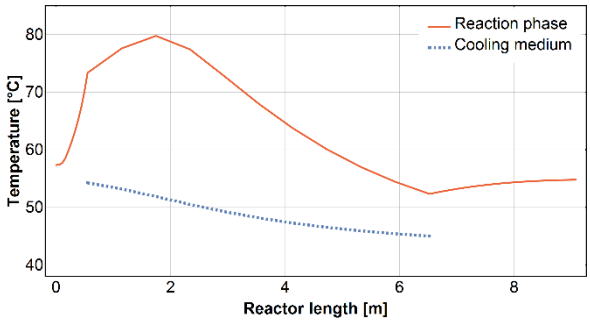


Fig. 2: Temperature Profile

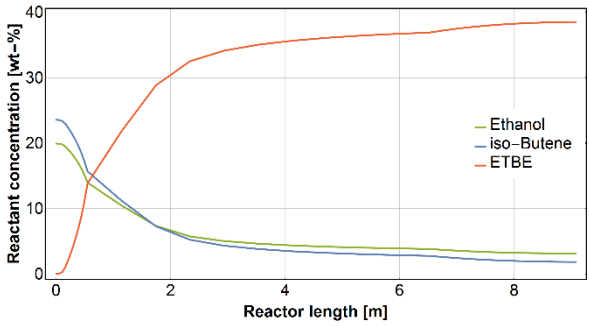


Fig. 3: Reactant concentration

Fig. 4 shows the byproduct concentrations for two different C4 feed streams and a 1:1 mixture of them. Based on this information, destructive temperature peaks as well as undesired byproduct formation can be avoided and plant throughputs can be optimized precisely, taking into account material life and catalyst life cycle. For the reference plant at hand, the throughput-related catalyst life cycle could be increased by up to 10%.

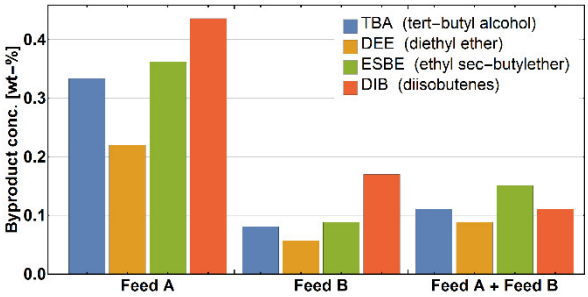


Fig. 4: Byproduct formation for different feeds streams

References

[1] Soto, R., Fité, C., Ramírez, E., Bringué, R. and Cunill, F.: “Kinetic modeling of the simultaneous etherification of ethanol with C 4 and C 5 olefins over Amberlyst™ 35 using model averaging”, Chemical Engineering J., vol. 307, pp. 122–134, 2017.

[2] Badia, J. H., Fité, C., Bringué, R., Ramírez, E. and Cunill, F.: “Byproducts formation in the ethyl tert-butyl ether (ETBE) synthesis reaction on macroreticular acid ion-exchange resins”, Applied Catalysis A: Gen. vol. 468, pp. 384–394, 2013.

[3] Caetano, N.S., Loureiro, J.M., and Rodrigue, A.E.: “MTBE synthesis catalysed by acid ion exchange resins: Kinetic studies and modeling of multiphase batch reactors”, Chem. Eng. Sci., vol. 49, no.24, pp. 4589–4604, 1994.

[4] Schwarzer, S., Horst, C., Kunz, U., and Hoffmann, U.: “Revision of microkinetic approaches to the liquid-phase synthesis of ethyl tert-butyl ether (ETBE)”, Chem. Eng. Techn., vol. 23, no.5, pp. 417–421, 2000.

[5] Renon, H., and Prausnitz, J.M.: “Local compositions in thermodynamic excess functions for liquid mixtures”, AIChE J., vol. 14, no.1, pp. 135–144, 1968.

Acknowledgement

Dieses Projekt wird aus Mitteln des Bundesministeriums für Verkehr, Innovation und Technologie (bmvit) gefördert und im Rahmen des Programms „Produktion der Zukunft“ durchgeführt.

Fragen und Anregungen bitte an:
Fabian Zapf
Tel.: +43 (316) 873 - 4989
E-Mail: fabian.zapf@tugraz.at

A Discrete Modeling Approach for Excess Gibbs-energy Models using Dice-like Molecules

Christoph Mayer, Thomas Wallek

Discrete modeling

Thermodynamic models for fluid phase equilibria calculations, such as equations of state and activity coefficients, are being challenged by the need to describe complex and/or strongly oxygenated molecules. In this context, previous papers proposed ‘discrete modeling’ as a novel approach to incorporate a more detailed molecular picture into thermodynamics from scratch. The approach is characterized by the rigorous use of Shannon information as thermodynamic entropy. As a proof of concept, the thermal and caloric equations of state, heat capacity and Maxwell-Boltzmann distribution for ideal gas were derived on the basis of discrete states of individual molecules [1]. To further extend this approach to strongly interacting condensed-phase systems [2], a previous application of discrete Markov-chains to thermodynamic modeling [3] was modified and extended from a flat lattice towards a three-dimensional, Ising-type lattice model, as depicted in Figure 1. The initial step of this model was the description of spherical molecules [4]. Here, the molecules are modeled with a dice-like geometry, allowing there to be up to six different interaction sites per molecule.

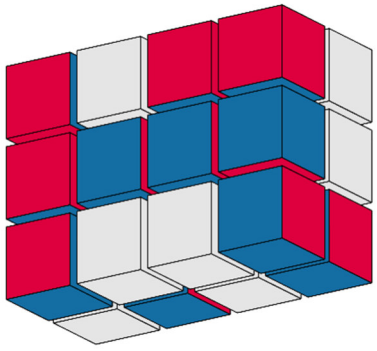


Fig. 1: Example segment of a lattice containing dice-like molecules with three different interaction sites.

Lattice construction

From the whole lattice system, a small, three-dimensional subgroup respective cluster of sites is picked out as a representative part of the system and the basis for thermodynamic modeling. Its stepwise formation is described by starting from one lattice site and successively adding further nearest-neighbor sites using conditional probabilities in terms of discrete Markov-chains. Such clusters can be treated as statistically independent subsystems, yet account sufficiently for cooperative effects due to molecular interactions inside the cluster. The according probability of occurrence of clusters can more vividly be rewritten in terms of probabilities of pairwise interactions which are also used by local compoition based approaches. Next, the internal energy and the Shannon entropy of the system are formulated on the basis of these pairwise probabilities. The Shannon entropy is then used equivalently to thermodynamic entropy.

Constrained minimization of the Helmholtz free energy yields the equilibrium distribution for the probabilities of pairwise interactions.

Results for dice-like molecules

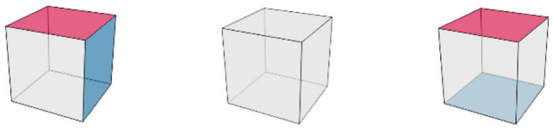


Fig. 2: Site distribution of simple dice-like isomers ‚stretched‘, ‚angled‘ and an intert component.

In a first step of adapting the proposed modeling methodology to more realistic molecules, they are modeled as dice-like components, where a die has six interaction sites and each site can represent an individual energetic property, aiming at accounting for components with varying charge distribution. A key aspect of the latter model is the fact that it retains the three-dimensional geometrical information about the interaction sites

within the cluster and therefore is intrinsically able to distinguish between isomers that only differ in relative charge positions. The simplest possible isomers are given in Figure 2. The result of this system is compared with Monte-Carlo simulations and state-of-the-art excess Gibbs-energy models in Figure 3.

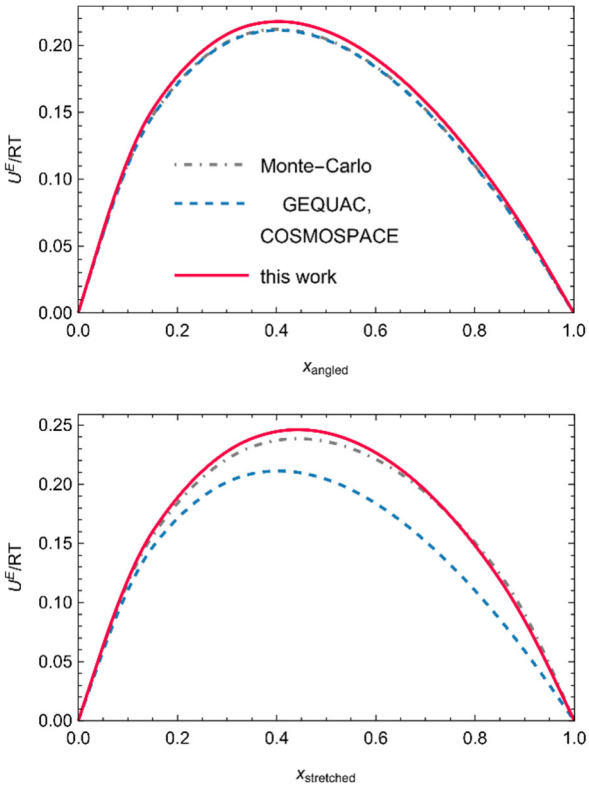


Fig. 3: Comparison of dimensionless excess internal energy of Monte-Carlo data, GEQUAC [5], COSMOSPACE [6], and this work for angled-inert and stretched-inert mixtures.

For the angled-inert mixture the models GEQUAC and COSMOSPACE which are identical for dice-like molecules offer slightly smaller deviations with Monte-Carlo simulations. However, these models are not able to distinguish between the geometric differences of components stretched and angled. Therefore their description of the stretched-inert mixture is numerically identical tot he angled case. This leads to larger deviations compared to Monte-Carlo simulation data. The model proposed here is able to distingiush between the isomers and shows similar deviations in both cases.

Conclusion

Due to its better representation of uniform molecules and its ability to distinct between isomers, the proposed modeling approach is a promising basis for further developing the method towards an activity coefficient model for liquid mixtures.

Acknowledgement

FWF
Der Wissenschaftsfonds.
Austrian Science Fund (FWF): P 32609-N

References

[1] M. Pfleger, T. Wallek, and A. Pfennig, “Discrete modeling: Thermodynamics based on Shannon entropy and discrete states of molecules,” Ind. Eng. Chem. Res., vol. 54, no. 16, pp. 4643–4654, 2015.

[2] T. Wallek, M. Pfleger, and A. Pfennig, “Discrete Modeling of Lattice Systems: The Concept of Shannon Entropy Applied to Strongly Interacting Systems,” Ind. Eng. Chem. Res., vol. 55, no. 8, pp. 2483–2492, 2016.

[3] V. L. Vinograd and L. L. Perchuk, “Informational models for the configurational entropy of regular solid solutions: flat lattices,” J. Phys. Chem., vol. 100, no. 39, pp. 15972–15985, 1996.

[4] T. Wallek, C. Mayer, and A. Pfennig, “Discrete Modeling Approach as a Basis of Excess Gibbs-Energy Models for Chemical Engineering Applications,” Ind. Eng. Chem. Res., vol. 57, no. 4, pp. 1294–1306, 2018.

[5] K. Egner, J. Gaube, and A. Pfennig, “GEQUAC, an excess Gibbs energy model describing associating and nonassociating liquid mixtures by a new model concept for functional groups,” Fluid Phase Equilib., vol. 158–160, no. 1, pp. 381–389, 2002.

[6] A. Klamt, G. J. P. Krooshof, and R. Taylor, “COSMOSPACE: Alternative to conventional activity-coefficient models,” AIChE J., vol. 48, no. 10, pp. 2332–2349, 2002.

Fragen und Anregungen bitte an:
Christoph Mayer
Tel.: +43 (316) 873 - 4986
E-Mail: cmayer@tugraz.at

Direct Reduction of Iron Carbonate

Astrid Loder, Susanne Lux

Motivation

In the iron- and steel industry large amounts of CO_2 are emitted during the production process [1]. By remodeling the production route, these CO_2 emissions can be reduced tremendously. One alternative is the direct iron carbonate ($FeCO_3$) reduction with hydrogen. In the direct iron carbonate reduction, a change of the reducing agent, compared to the state of the art, leads to fewer CO_2 emissions.

In the state of the art the main reducing agent is coke or coal, both of which are carbon based. By changing the reducing agent from a carbon based one to hydrogen, the reduction byproducts change and up to 60 % less CO_2 is emitted [2]. Hydrogen reduces iron carbonate directly to elemental iron (Fe).

$$FeCO_3 + 2\ H_2 \xrightarrow{Q} Fe + CO + 2\ H_2O$$

A possible hydrogen source for the direct reduction could be coker gas, which has a high hydrogen content [2].

The project DiREkt (Direktreduktion von Eisenkarbonat) started in 2018 to investigate the direct reduction of iron carbonate with hydrogen for an industrial application. The project is funded by the FFG and the work is done in cooperation with the VA Erzberg GmbH and the Montanuniversität Leoben. Iron carbonate is for example mined at the Styrian Erzberg in Eisenerz.



Fig. 1: Tubular reactor being filled with iron ore sample from the Styrian Erzberg

For an industrial application the optimum process parameters and the ideal sequential arrangement of reduction and separation processes need to be known. The aims of this research are to find the process parameters that achieve high iron carbonate conversion and a high selectivity to elemental iron.

Experimental Method

The direct reduction of iron carbonate is investigated in a bench scale fixed bed tubular reactor from Parr Industries (Fig. 1 and Fig. 2). The reactor connects to a continuous gas analyser.



Fig. 2: Setup of the tubular reactor from Parr Industries

The process parameters were investigated in regard to the gas and solid products. A special focus in the experiments were given to the influence of the temperature and the feed gas.

Research progress

Different solid and gas products are possible in the iron carbonate reduction. Fig. 3 shows the Gibbs' free energy for the reduction to different gas and solid products. CO_2 is formed during the formation of wustite (FeO) and iron.

$$FeCO_3 \xrightarrow{Q} FeO + CO_2$$

CO is formed as a byproduct during the reaction of iron carbonate to elemental iron.

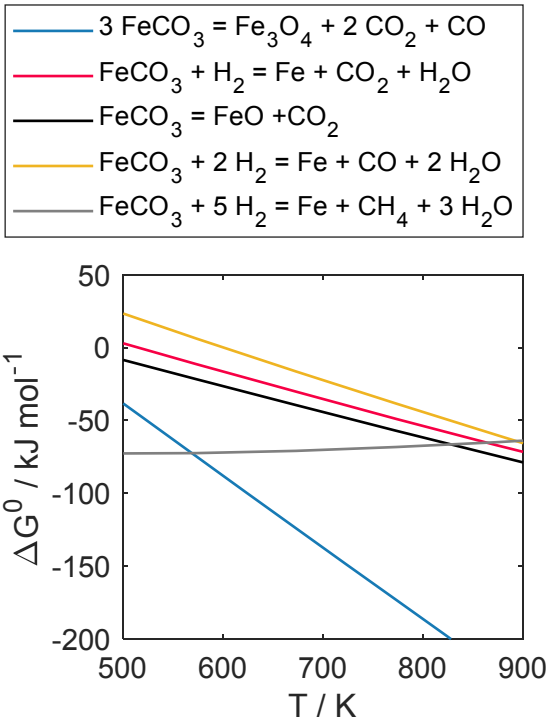


Fig. 3: Gibbs' free energy for different solid and gas products formed during the iron carbonate reduction.

A typical gas product feed during the reduction is shown in Fig. 4.

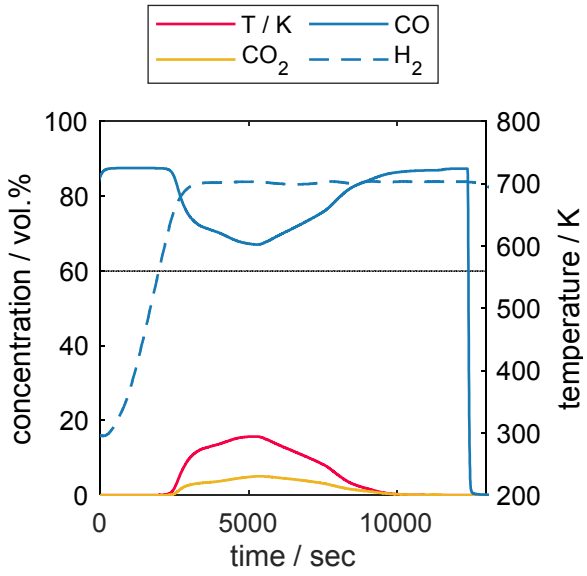


Fig. 4: Composition of the gas product for an experimental run at with 703°C, H_2:N_2=9:1, particle size 1–2 mm and 100 g iron ore.

Conclusion

CO_2 emissions in the iron carbonate beneficiation can be reduced through the direct iron carbonate reduction with hydrogen. Knowledge of the influence of the process parameters is necessary for a future industrial application.

Acknowledgment

This project is funded from the Austrian ‚Klima-und Energiefond' in the framework oft he programm „Energieforschung (e!MISSION)". The authors wish to thank A. Stadtschnitzer and A. Kogelbauer (VA Erzberg GmbH, Austria) and A. Böhm (Montanuniversität Leoben) for their valuable collaboration in the project.

Literature

[1] M. Abdul Quader, S. Ahmed, S. Z. Dawal, and Y. Nukman, "Present needs, recent progress and future trends of energy-efficient Ultra-Low Carbon Dioxide (CO_2) Steelmaking (ULCOS) program," Renew. Sustain. Energy Rev., vol. 55, pp. 537–549, 2016.

[2] G. Baldauf-Sommerbauer, S. Lux, and M. Siebenhofer, "Sustainable iron production from mineral iron carbonate and hydrogen," Green Chem., vol. 18, no. 23, pp. 6255–6265, 2016.

Questions and remarks to:
Astrid Loder
Tel.: +43 (316) 873 - 4974
E-mail: astrid.loder@tugraz.at

Carbon Dioxide Hydrogenation

Sascha Kleiber, Astrid Loder, Susanne Lux, Matthäus Siebenhofer

Motivation

The ecological impact of carbon dioxide (CO_2) in the atmosphere necessitates a reduction of CO_2 emissions and demands utilization strategies. From a thermodynamics perspective CO_2 is a very stable molecule and utilization requires strong reducing agents, harsh reaction conditions and sophisticated catalysts.

Hydrogenation processes may contribute to reduction of CO_2 emissions, and furthermore can be used in energy storage to raise the energy density of hydrogen based energy carriers by orders of magnitude [1]. The hydrogenation products methane (CH_4) and methanol (CH_3OH) provide the physical properties for improved energy density of hydrogen based energy carriers. Both components do also easily release hydrogen by steam reforming, making them highly feasible for fuel cell powering.

Large scale hydrogenation of CO_2 does need robust catalysts with sufficient activity at moderate reaction conditions, which are easy to prepare, easy to recycle, and stable for long term usage.

Approach

State of the art catalyst systems in industrial CH_3OH and CH_4 production are based on Al_2O_3 or SiO_2 backbones with different active sides. Changing the catalyst backbone from Al_2O_3 to MgO is very promising due to the appreciable CO_2 capture capacity of MgO as well as the low technological demand for the recycling of spent catalysts. Due to the caustic properties of MgO based catalyst systems a product yield close to equilibrium conversion can even be obtained at moderate operation pressure.

Exemplarily Ni doped MgO catalysts offer great performances in methanation of CO_2 at ambient pressure with very high selectivity for CH_4 of > 99 %. For catalyst optimization the Ni-load of MgO has been varied. Figure 1 shows experimental results for Ni/MgO catalysts systems with 11 wt%, 20 wt%, and 27 wt% Ni-load, respectively. Each catalyst was investigated at four different temperatures. The experimental results were compared to different kinetic models. A Langmuir-Hinshelwood based approach fitted the experimental results best and is also shown in figure 1.

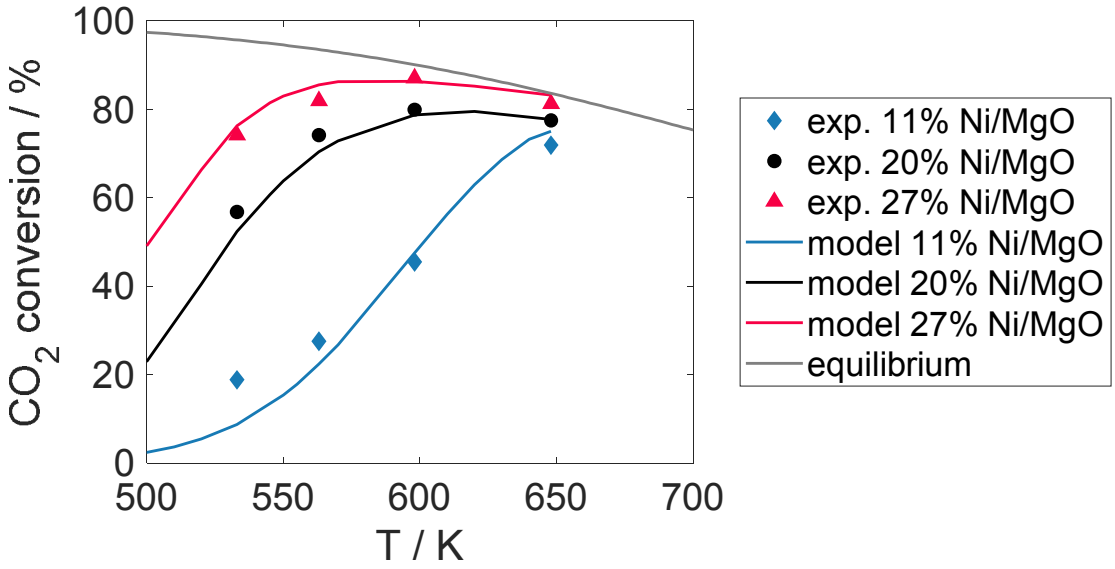


Fig. 1: Comparison of different Ni/MgO catalysts in methanation of CO_2 with a Langmuir-Hinshelwood based kinetic model [2]

Experimental Set Up

For CH_3OH synthesis suitable catalyst systems are investigated either in a bench scale fixed bed tubular reactor or a bench scale batch reactor. The fixed bed tubular reactor has a volume of 40 mL of which 30 mL can be heated. It can withstand pressures up to 200 bar, and a maximum temperature of 550 °C. The reactor is heated by one heating section. Heterogeneous catalysts can be placed inside the reactor. The temperatures of the gas flow and the catalyst are detected by a thermo-sensor at three locations inside the reactor. Condensable products, such as water and CH_3OH are condensed and analyzed by gas chromatography. The gaseous products are detected by an online gas analyzer. The experimental set up of the bench scale fixed bed tubular reactor is depicted in figure 2.

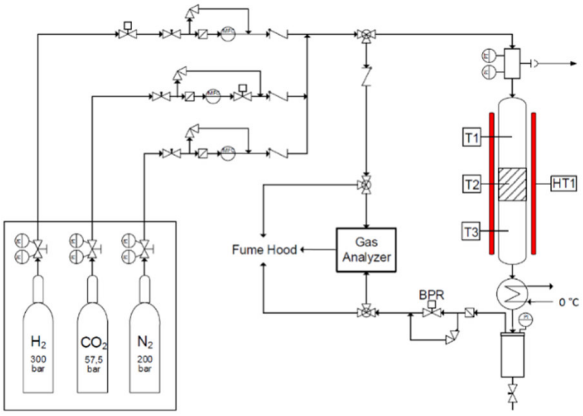


Fig. 2: Experimental set up for a bench scale fixed bed tubular reactor for heterogeneously catalyzed CO_2 hydrogenation

The bench scale batch reactor has a volume of 1100 mL and can withstand pressures up to 200 bar, and a maximum temperature of 400 °C. The temperature inside the reactor is controlled by electrical heating and water cooling system inside a double jacket. Heterogeneous catalysts can be placed in a basket inside the reactor. Temperature, pressure, and mass flow rates are monitored and recorded. The gas flow rates for both reactors are adjusted by mass flow controllers. The experimental set up of the bench scale batch reactor is depicted in figure 3.

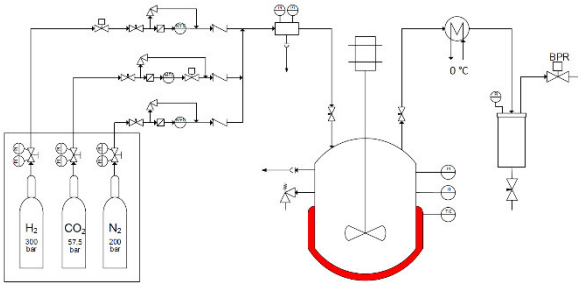


Fig. 3: Experimental set up for a bench scale batch reactor for heterogeneously catalyzed CO_2 hydrogenation

Outlook

Catalyst optimization for CH_4 synthesis at ambient pressure with Ni/MgO based catalysts has been successfully finished. Spent Ni/MgO catalysts can easily be recycled in the blast oxygen furnace.

For CH_3OH synthesis the catalytic activity of Cu/MgO and Cu/ZnO/MgO catalysts has been confirmed, although Studt et al. report negative impact of MgO on catalyst activity [3]. Optimization of Cu/MgO catalysts, also easy to recycle, focuses on the mineralogical quality of the MgO backbone and additional promotors, such as ZnO.

Literature

[1] Gurau, B. et al., 2002: Methanol crossover in direct methanol fuel cells: a link between power and energy density. Journal of Power Sources 2002, Volume 112, Issue 2, Pages 339-352.

[2] Baldauf-Sommerbauer, G. et al., 2018: Steady-state and controlled heating rate methanation of CO_2 on Ni/MgO in a bench-scale fixed bed tubular reactor. Journal of CO_2 Utilization 2018, Volume 23, Pages 1-9.

[3] Studt, F. et al., 2015 The Mechanism of CO and CO_2 Hydrogenation to Methanol over Cu-Based Catalysts. ChemCatChem 2015, Volume 7, Pages 1105-1111

Questions and remarks to:
Sascha Kleiber
Tel.: +43 (316) 873 - 7981
E-Mail: kleiber@tugraz.at

Solubility Assessment of Purified Kraft Lignin

Maitz Silvia, Lukas Hopf, Paul Demmelmayer, Thomas Pichler, Marlene Kienberger

Introduction

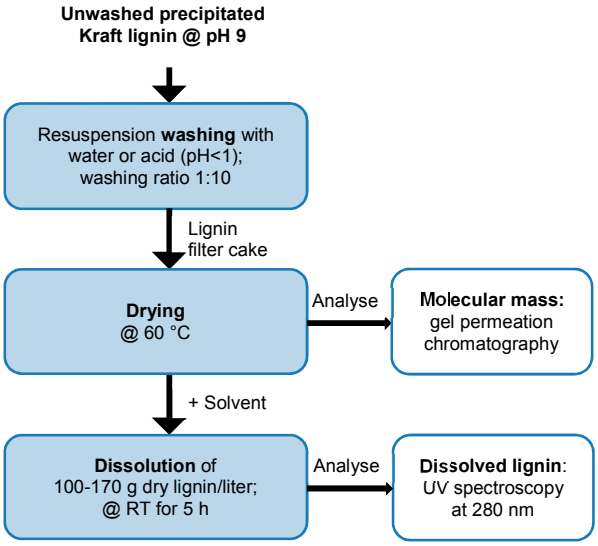
Kraft lignin is a bio-based raw material generated in vast quantities in the course of chemical pulping. This lignin can be isolated by acid precipitation with CO_2, followed by an acidic washing step. Even though the production of value added materials from kraft lignin has been investigated for many decades, the majority is still solely produced on lab-scale. Reasons for that are the heterogeneous structure and varying quality of the available kraft lignin, as well as the complexity of the isolation and purification processes available. [1]

For purification of the isolated lignin as well as for various processing strategies, its solubility is of major importance. The dissolution characteristics of kraft lignin in different solvents vary significantly, depending on the pH maintained during lignin purification. For example, only alkaline lignin can be dissolved in water because in alkaline media the phenolic and carboxylic groups of the lignin are negatively charged, rendering it at least partially soluble in aqueous media. Acidified and thus completely protonated lignin is known to be insoluble in water. [2]

For this study, the dissolution of acidic and alkaline purified Kraft lignin was investigated. The tested solvents were water, acetic acid, methanol and ethanol.

Methods

Kraft lignin was precipitated from intermediate black liquor at a local pulp and paper mill. Precipitation was performed with CO_2 until a pH of 9 was reached. The precipitated lignin was then filtered in a filter press. Scheme 1 illustrates the preparation and experimental steps performed with the precipitated lignin.
The solvents used for the dissolution experiments with the purified lignin were deionized water, as well as ethanol, methanol and acetic acid of analytical grade. Prior to measurement of the dissolved lignin concentration, the samples taken were centrifuged for complete separation of residual undissolved solid lignin (see Figure 1). Previous experiments have shown that after incubation for 5 h, the equilibrium concentration of dissolved lignin was reached for all solvents except acetic acid.



Scheme 1. Experimental procedure for lignin purification, characterisation and solubility experiments.

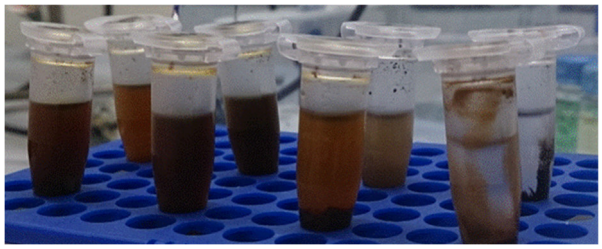


Fig. 1. Examples of dissolved lignin in various solvents after centrifugation.

Results

Figure 2 shows the molecular weight distribution of the unwashed, acid washed and water washed lignin fractions. It is evident that the unwashed lignin had the lowest molecular weight, followed by the acid washed sample and the water washed lignin.

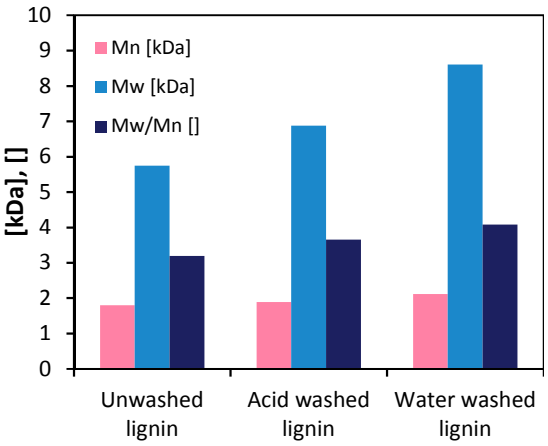


Fig. 2. Molecular weight moments of the different lignin fractions.

This shows that part of the original lignin is lost throughout the washing procedure. The water washed lignin has the highest molecular weight, indicating that the largest fraction of low molecular weight lignin is dissolved during water washing.

The acid washed and water washed lignin samples were subjected to solubility studies in water and polar organic solvents. Both samples were also added to hexane, but no detectable lignin dissolution took place. Hence, no further experiments were performed with hexane or other apolar solvents. The results of the other dissolution experiments are shown in Figure 3.
Acid washed lignin was completely insoluble in water, but had a significant solubility of about 50 % in the other tested solvents. In contrast, the much more polar water washed lignin had the highest solubility in water, despite its high molecular mass. The more polar alcohol, methanol, still dissolved 23 % of the water washed lignin, while this sample was completely insoluble in the more hydrophobic alcohol ethanol. The solubility in acetic acid was only 10 % lower for water washed lignin compared to the acid washed sample. The similar results obtained for acetic acid can be attributed to the fact that this solvent protonates the water washed lignin, which results in similar solubilities. After incubation for 24 h, the dissolved concentration of the water washed sample was almost identical to that of the acid washed one.

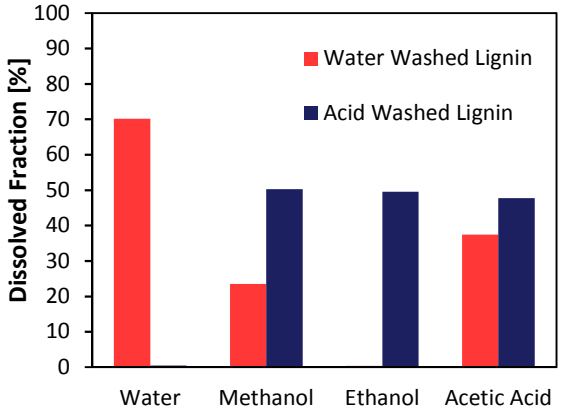


Fig. 3. Results of the solubility experiments of acid washed and water washed lignin in different solvents; experiments performed at room temperature, dissolved fraction after incubation for 5 h.

Conclusion

It could be shown that the purification process for industrial kraft lignin has a significant influence on its solubility, which in turn is important for subsequent processing approaches. Lignin of higher pH is quite soluble in water, but insoluble in less polar solvents like ethanol, while the water-insoluble acid washed lignin can be dissolved in the common organic solvents to about 50 %.

Acknowledgement

The collaboration and financial support of the Flippr^2 project consortium as well as the FFG Austria are gratefully acknowledged.

Literature

[1] P. Fatehi and J. Chen, “Extraction of Technical Lignins from Pulping Spent Liquors, Challenges and Opportunities,” in *Production of Biofuels and Chemicals from Lignin*, Fang, Z.; Smith Jr., R.L., 2016, pp. 35–54.

[2] M. Norgren, H. Edlund, L. Wågberg, B. Lindström, and G. Annergren, “Aggregation of kraft lignin derivatives under conditions relevant to the process, part I: phase behaviour,” *Colloids Surfaces A Physicochem. Eng. Asp.*, vol. 194, no. 1–3, pp. 85–96, Dec. 2001.

Questions or Suggestions to:
Silvia Maitz
Tel.: +43 (316) 873 - 7967
E-Mail: silvia.maitz@tugraz

Hydraulics of continuous multiphase flow

Georg Rudelstorfer, Annika Grafschafter, Matthäus Siebenhofer

Introduction

Global and sustainable implementation of biobased raw materials has become a high priority task. Unfortunately, downstream processing in the biobased industry often faces highly dilute multicomponent mixtures, making product isolation a challenge. For instance, black liquor condensate from pulping contains carboxylic acids at low concentration. Isolation of these low value constituents from aqueous effluents fails because state of the art downstream processes like distillation cannot achieve economic feasibility. When talking about highly dilute carboxylic acids, process optimization can be obtained by properly chosen chemical conversion of acids by esterification combined with solvent extraction. [1-6]

Following the fundamental characteristic of equilibrium reactions such as esterification reactions, 100 % reaction yield can be achieved theoretically when the products ester and water are removed as fast as they are formed [4]. This example indicates the potential of combining such reactions with solvent extraction processes. Via continuous phase transfer of the product by solvent extraction, the limitation of single phase equilibrium conversion is shifted to the product side. The consecutive isolation of extracted esters by distillation will contribute to economically feasible whole-plant usage of renewable resources. [6]

This work focuses on the implementation of continuous multiphase flow (liquid-liquid-solid) in a Taylor-Couette Disc Contactor (TCDC) for combining heterogeneously catalyzed esterification and solvent extraction with the main focus of hydraulic investigation. The TCDC is an agitated column type extraction device with a simple design of internals providing flexible operation under harsh operation conditions with excellent mixing behavior. In a first series of experiments hydraulics as well as the on-set of appropriate liquid-liquid-solid (LLS) operation was investigated for different rate of rotation and total hydraulic load. Subsequently, the dispersed phase holdup at liquid-liquid flow (LL) was determined for several operation points. Finally, solid phase holdup measurements in the aqueous phase (SL) were performed for different rate of rotation, hydraulic load and mass flow rate of the solid phase.

Experimental

For continuous multiphase operation, LLS flow was implemented in a TCDC with 50 mm column diameter and 700 mm active column height. The setup was operated in counter current mode. ShellSol-T (SST) was used as dispersed phase, Amberlyst15® as solid phase and deinozied water als continuous phase. The continuous aqueous phase was used as carrier phase of the solid catalyst and was fed at the top of the column. The solvent phase was fed at the bottom. At the bottom, the solid catalyst was separated from the aqueous phase via sedimentation and was collected in a downstream collector pin. From the pin, the solid catalyst was pumped continuously to the water tank.

Results

Fig. 1 depicts the flow pattern in a single compartment of the TCDC at total hydraulic load of 5 $m^3m^{-2}h^{-1}$ and 10 $m^3\,m^{-2}h^{-1}$ for varying rate of rotation. Beyond the critical rate of rotation of 150 rpm, the vorticity of the continuous phase overcomes sedimentation force of the solid phase and the solid catalyst is dragged by the toroidal vortexes, indicating the on-set for operation. The solid phase is mainly accumulating in the lower area of the compartment (lower vortex) due to the flow direction of the continuous carrier phase from top to the bottom. Buoyancy of the dispersed phase dominates the flow pattern up to ~ 350 rpm. The dispersed phase accumulates below the rotor discs with low holdup values and large droplet size. Beyond 350 rpm the vorticity of the continuous phase also overcomes buoyancy of the dispersed phase and drags the dispersed phase in the compartment for a reasonable residence time. The vortex in the upper area of the compartment becomes visible and indicates the on-set for the dispersed phase.

Beyond 800 rpm, a fully developed flow pattern is achieved, ensuring intensive phase contact of the three phases. Fully developed flow pattern shows high mixing performance in the single compartment with high holdup values and small droplet size and thus high specific mass transfer area. [6]

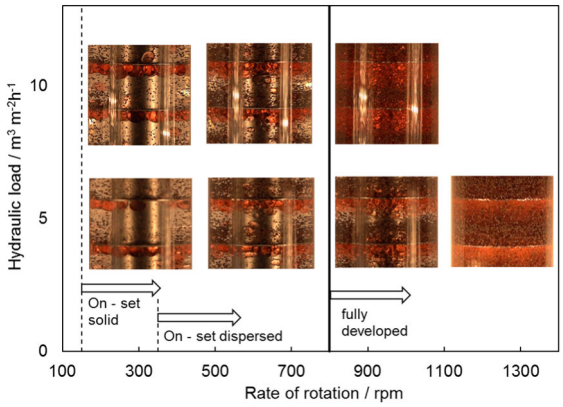


Fig. 1: Flow pattern of continuous LLS flow at 5 $m^3m^{-2}h^{-1}$ and 10 $m^3m^{-2}h^{-1}$ [6]

Fig. 2 depicts the experimental data of the dispersed phase holdup at liquid-liquid flow for varying hydraulic load and rate of rotation. The holdup increases steadily with increasing rate of rotation. At low hydraulic load (B = 6 m^3 $m^{-2}h^{-1}$) and high rate of rotation, holdup values of even 35 % allowed stable operation. With increasing hydraulic load, higher holdup values at same rate of rotation were measured and flooding was observed at same holdup values but lower rate of rotation. [6]

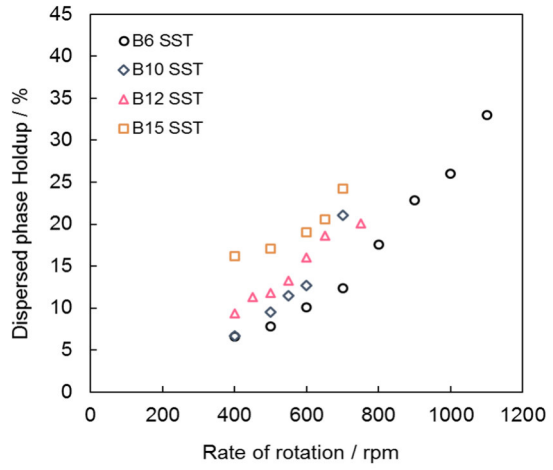


Fig. 2: Dispersed phase holdup for varying hydraulic load B = 6 - 15 m^3 $m^{-2}h^{-1}$ and rate of rotation at w/o = 1 [6]

Fig. 3 shows the solid phase holdup of the catalyst for varying hydraulic load of solids, in the aqueous carrier phase and different rate of rotation. With increasing rate of rotation, the solid phase holdup increases too. Higher mass fraction of the solid phase in the carrier phase and lower hydraulic load leads to increased holdup values in the active mixing height. Maximum solid holdup values of 8 % were achieved, resulting in a specific mass transfer area for the acceleration of the esterification reaction of a = 496 m^2 m^{-3} when assuming a mean particle diameter of 0.725 mm. The hydraulic mean residence time of the catalyst in a single compartment for the solid phase holdup of φ_S = 7 % and B = 5 m^3 $m^{-2}h^{-1}$ is τ_S = 25 seconds. [6]

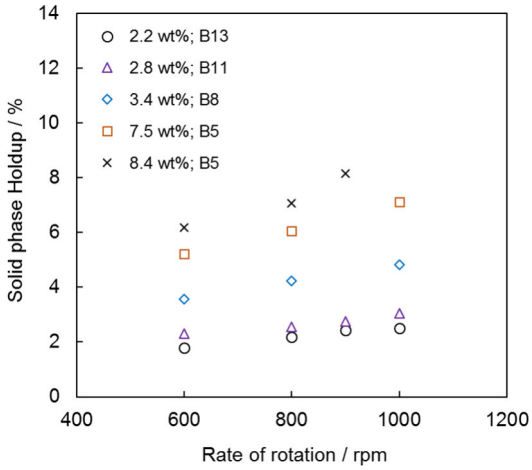


Fig. 3: Solid phase holdup at hydraulic load of B = 5, 8, 11 and 13 m3 m-2h-1, rate of rotation and mass fraction of the solid phase [6]

Literature

[1] H. T. R. Teo and B. Saha, J. Catal., 2004, 228 (1), 174. DOI: 10.1016/j.jcat.2004.08.018.

[2] Y. Liu, E. Lotero, and J. G. Goodwin, J. Catal., 2006, 242 (2), 278. DOI: 10.1016/j.jcat.2006.05.026.

[3] T. F. Dossin, M. F. Reyniers, and G. B. Marin, Appl. Catal. B Environ., 2006, 62 (1–2), 35. DOI: 10.1016/j.apcatb.2005.04.005.

[4] D. B. Keyes, Ind. Eng. Chem., 1932, 24 (10), 1096. DOI: 10.1021/ie50274a003.

[5] T. Pöpken, L. Götze, and J. Gmehling, Ind. Eng. Chem. Res., 2000, 39 (7), 2601. DOI: 10.1021/ie000063q.

[6] A. Grafschafter, Ph.D. Thesis, Graz University of Technology, 2019.

For questions kindly contact:

Georg Rudelstorfer
Tel.: +43 (316) 873 - 7474
rudelstorfer@tugraz.at

Annika Grafschafter
Tel.: +43 (316) 873 4977
a.grafschafter@tugraz.at

Droplet Interactions in Liquid-Liquid Systems

Patrick Zimmermann, Tim Zeiner

Introduction

The evolution of droplet plays an essential role in extraction columns. Since optical access requires significant effort when building an experimental setup, it might be desirable to use computational fluid dynamics simulations to support apparatus and process design as well as optimization. State of the art is given by approaches calculating continuous and disperse phase separately on dedicated grids (Euler-Euler or Euler-Lagrange approach) which require closure models like population balances. The parameter sets of those closure relations are quite large and need to be adjusted for each mixture. On smaller scales, the phase-field models provide a framework to directly simulate multi-phase flow on a single grid. Here, an additional partial differential equation for the phase-field or the interface is solved. Choosing the concentration of one phase-building constituent and describing the interfacial free energy using a square-gradient approach [1] results in the system of Cahn-Hilliard/Navier-Stokes equations [2]. Just a thermodynamic model is required as closure, for which the well-known NRTL model [3] was taken in this work [4]. Numerical simulations under different conditions could then help to reduce parametrizing effort for large scale simulations.

Theory

The Navier-Stokes equations for incompressible fluids build the starting point of the model. The mass leads to the condition of a divergence free velocity field $\mathbf{v}$ (eq. 1), the progress of the velocity field involves the viscosity ν, the volumetric forces due to chemical potential gradients $\mathbf{f}_v$ and a field $\tilde{P}$, introduced to satisfy the mass balance (eq. 2).

$$\nabla \cdot \mathbf{v} = 0 \tag{1}$$

$$\frac{\partial \mathbf{v}}{\partial t} = -(\mathbf{v} \cdot \nabla)\mathbf{v} - \nabla\tilde{P} + \nu\nabla^2\mathbf{v} + \frac{1}{\rho}\mathbf{f}_v \tag{2}$$

The pressure like field $\tilde{P}$ is calculated using a predictor corrector method utilizing eq. 1. The volumetric forces read

$$\mathbf{f}_v = -\rho\nabla(\mu_1 - \mu_2) \tag{3}$$

The molar fraction x_1 of one phase forming component serves as phase field and obeys the transport equation 3 involving convective and diffusive mass transport $\mathbf{J}_1$.

$$\frac{\partial x_1}{\partial t} = -\nabla(x_1 \cdot \mathbf{v}) - \nabla \cdot \mathbf{J}_1 \tag{4}$$

In equation 3, the diffusion flux rather depends on the chemical potential gradients than on the concentration gradients following eq. 5.

$$\mathbf{J}_1 = -\frac{M}{R}x_1(1 - x_1)\nabla\left(\frac{\mu_1 - \mu_2}{T}\right) \tag{5}$$

The term $\frac{M}{R}x_1(1 - x_1)$ in equation 5 describes the mobility of the component 1. The chemical potentials are calculated as functional derivatives from the Gibbs free energy G_{tot} that consists of a bulk phase expression g and an additional gradient contribution involving the so-called influence parameter κ [1].

$$G_{tot} = \int g(x_1) + \frac{\kappa}{2}(\nabla x_1)^2 \,\mathrm{d}V \tag{6}$$

The influence parameter is usually adjusted to one experimental interfacial tension and allows to predict the interfacial properties for differing conditions [5].

Results

As example calculation, an initial setup of two drop-like concentration profiles of the binary system methane (1) + hexane (2) is shown in figure 1. For numerical stability, a system with equilibrium compositions off the limitations was chosen. The simulation box is 2 cm x 2 cm wide and periodic boundary conditions are applied. The temperature is set to 5 °C. The concentration profiles are initialized using the Gauß normal distribution with a wide interface to provide numerically suitable values of the occurring gradients and the possibility to observe decomposition processes in the interfacial region. As figure 2 indicates, decomposition takes place and the concentration profiles exhibit Ostwald ripening.

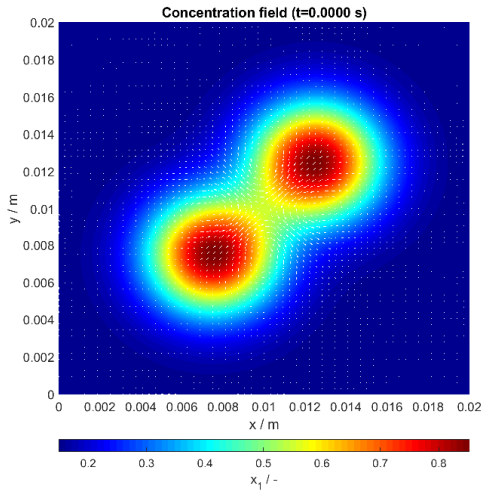


Fig. 1: Initial concentration profile of methane on a 768 x 768 grid.

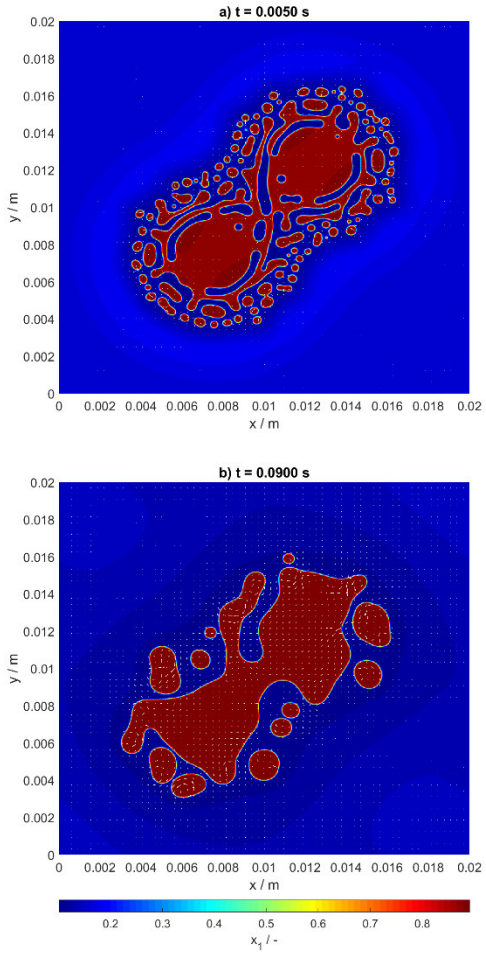


Fig. 2: Simulation snapshots after 5 ms (a) and 90 ms (b).

At first, many small droplets and fine morphologies are formed (fig. 2 a), which then coalesce to fewer larger droplets (fig. 2 b). The vectors indicate the profile of velocities of which significant values can be spotted only at the interfaces.

Conclusion

The ability to simulate droplet interactions bears high potential in supporting apparatus design and optimization, since it could be used to reduce the parameterization effort of large scale CFD simulations. Phase decomposition as well as coalescence can be simulated allowing for insights into the flow field and effects of certain influence parameters. Depending on concentrations and temperatures, the evolution of droplet populations could be followed without the need of many experimental data; just a -often already parametrized- thermodynamic model and a single experimental interfacial tension is required. Introducing differing densities and gravity enables to calculate sedimentation and considering a more components, extraction systems could be simulated.

References

[1] Cahn, J. W., Hilliard, J. E., 1958: Free energy of a nonuniform system. I. Interfacial free energy. The Journal of chemical physics, 28(2), 258-267.

[2] Gurtin, M.E., Polignone, D., Vinals, J., 1996:, Two-phase binary fluids and immiscible fluids described by an order parameter. Mathematical Models and Methods in Applied Sciences 6, 815-831.

[3] Renon, H., Prausnitz, J. M., 1968: Local compositions in thermodynamic excess functions for liquid mixtures. AIChE journal, 14, 135-144.

[4] Zimmermann, P., Mawbey, A., Zeiner, T., 2019: Calculation of Droplet Coalescence in Binary Liquid–Liquid Systems: An Incompressible Cahn–Hilliard/Navier–Stokes Approach Using the Non-Random Two-Liquid Model. Journal of Chemical & Engineering Data. doi.org/10.1021/acs.jced.9b00493

[5] Enders, S., Quitzsch, K., 1998: Calculation of interfacial properties of demixed fluids using density gradient theory. *Langmuir*, *14*, 4606-4614.

For questions and suggestions please contact:
Dr.-Ing. Patrick Zimmermann
Tel.: +43 (316) 873 - 7464
E-Mail: patrick.zimmermann@tugraz.at

Modelling of Interfacial Mass Transfer

Roland Nagl, Patrick Zimmermann, Tim Zeiner

Motivation

Interfacial mass transfer is an essential factor for thermal separation processes in the pharmaceutical and chemical industry. The interfacial properties are of special interest for the design of liquid-liquid extraction processes. These properties govern important phenomena that occur during extraction processes, such as droplet formation, droplet coalescence and the mass transfer across the liquid-liquid interface. It is therefore desirable to develop rigorous thermodynamic models, that describe the interfacial properties and apply them to describe interfacial mass transfer. Moreover these models can be used to investigate additional transport phenomena like the influence of the transferring component on the extraction process.

This research aims to determine the influence of the transferring component on the interfacial properties and interfacial mass transfer in liquid-liquid extraction processes. For that purpose the Density Gradient Theory (DGT) [1] is combined with the Koningsveld-Kleintjens (KK) g^E-model [2] to describe the interfacial mass transfer. Moreover, the interfacial tension and the concentration profile across the liquid-liquid interface are modeled by applying the DGT. As a first step multiple ternary systems with different transferring components are investigated. The recommended test system for liquid-liquid extraction studies, water + toluene + acetone [3], is chosen as reference system for the ternary systems. In this system acetone is replaced by other components that differ in polarity, molecular mass and equilibrium properties. For this study ethanol, tetrahydrofuran (THF) and acetonitrile (ACN) were chosen as other transferring components.

Experimental Method

First the interfacial tension for the systems with ethanol, THF or ACN as transferring component has to be measured due to a lack of experimental data in the literature. For that purpose several tie lines at T = 298.15 K were prepared for each system and the interfacial tension was measured with a spinning drop tensiometer.

Subsequently the interfacial mass transfer was determined by conducting experiments in a Nitsch-cell [4].

There the aqueous and organic phase are stirred individually to achieve equal Reynolds numbers in both phases, which ensures a constant and stable interface between the phases. Hence, purely diffusive mass transfer across the interface can be measured at constant temperature. For the experiments a two-phase mixture of water and toluene is prepared and the transferring component is injected in one or both phases. Samples are drawn from both bulk phases until the equilibrium state has been reached. The composition is determined by gas chromatography and Karl-Fischer titration. The mass transfer experiments are conducted multiple times with different injection phases and the time until the equilibrium state has been reached is measured in each experiment.

Modelling

Based on the experimental results the modelling approach can be developed. First, the ternary liquid-liquid equilibria are modeled with the KK-model (equ. 1). The KK-model is an extension of the Flory-Huggins model and yields the Gibbs mixing enthalpy Δg as a function of the segment molar fraction ϕ_i, the segment number r_i and the interaction parameter χ_{ij}.

$$\frac{\Delta g_{KK}}{RT} = \sum_{i=1}^{n} \frac{\varphi_i}{r_i} \ln(\varphi_i) + \sum_{i=1}^{n} \sum_{j>i}^{n} \chi_{ij}(T,\varphi_j)\,\varphi_i \varphi_j \qquad (1)$$

Furthermore the DGT is applied to calculate the interfacial tension σ (equ. 2) as well as the concentration profile across the liquid-liquid interface (equ. 3). Equ. 3 is evaluated numerically to calculate the spatial coordinate x‘ for each concentration φ_1^* between the bulk phase compositions. Both the interfacial tension and the concentration profile are a function of the grand

thermodynamic potential ΔΩ and the influence parameter κ_{12}.

$$\sigma = \int_{\varphi_1^{II}}^{\varphi_1^{I}} \sqrt{2\kappa_{12}\Delta\Omega\left(\varphi_1,\varphi_2\right)}\,d\varphi_1 \qquad (2)$$

$$x' = \int_{\varphi_1^{I}}^{\varphi_1^{*}} \sqrt{\frac{2\kappa_{12}}{\Delta\Omega\left(\varphi_1,\varphi_2\right)}}\,d\varphi_1 \qquad (3)$$

Subsequently the diffusion across the interface is modeled by applying instationary DGT as shown for the binary case in equ. 4.

$$\frac{\delta\varphi_1}{\delta t} = \nabla\left[B_{12}\varphi_1\varphi_2\nabla\left(\mu_1-\mu_2-\kappa_{12}\nabla^2\varphi_1\right)\right] \qquad (4)$$

The binary mobility coefficient B_{12} is adjusted to experimental mass transfer data from Nitsch cell experiments.

Results

The influence parameter κ_{12} was adjusted to the interfacial tension of the phase forming components water and toluene. The interfacial tension for ternary systems was calculated with stationary DGT and showed exceptional accordance to experimental data (Fig. 1). Moreover the interfacial mass transfer was modelled and compared to experimental data from Nitsch cell experiments. We could demonstrate that the diffusion across the liquid-liquid interface can be modelled with the instationary DGT in very good agreement with experimental data (Fig. 2).

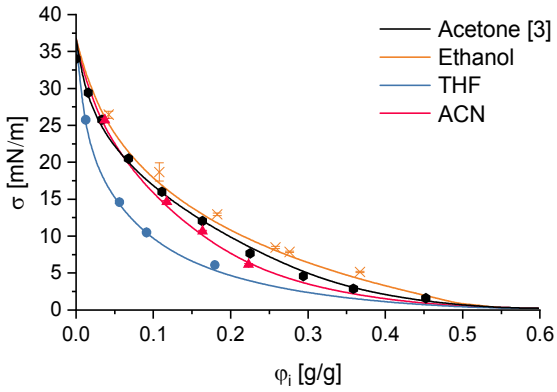


Fig. 1: Interfacial tension in investigated ternary systems. Points are experimental data, lines are modelled with stationary DGT.

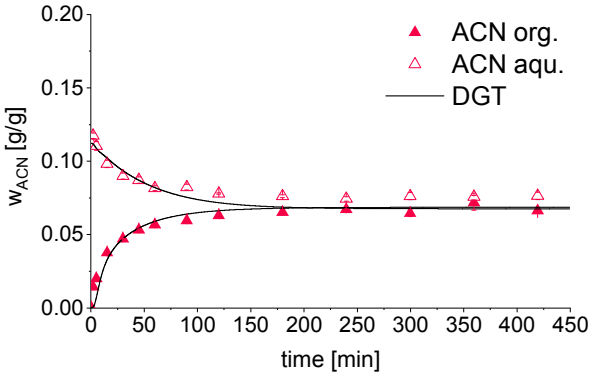


Fig. 2: Exemplary interfacial mass transfer of ACN in water/toluene. Points are experimental data, lines are modelled with instationary DGT.

Conclusion and Outlook

The DGT was successfully applied to ternary liquid-liquid systems. The interfacial tension and the interfacial mass transfer were modelled with the DGT and showed high accordance with experimental data. Our current research focusses on the extension to quaternary systems and reactive extraction systems.

Literatur

[1] Cahn, J.W. and Hilliard, J.E., “Free Energy of a Nonuniform System. I. Interfacial Free Energy”, Journal of Chemical Physics 1958, 28, 258–267.

[2] Koningsveld, R. and Kleintjens, L.A., “Liquid-Liquid Phase Separation in Multicomponent Polymer Systems. X. Concentration Dependence of the Pair-Interaction Parameter in the System Cyclohexane-Polystyrene”, Macromolecules 1971, 4, 637–641.

[3] Misek, T., Berger, R. and Schröter, J., Standard Test Systems for Liquid Extraction. Rugby: Institution of Chemical Engineers, 1985.

[4] Nitsch, W., “Metallionenextraktion”, Ber. Bunsenges. Phys. Chem. 1979, 83, 1171−1177.

Questions and remarks to:
Roland Nagl
Tel.: +43 (316) 873 - 7475
E-mail: nagl@tugraz

Modeling Solvent Absorption Kinetics in Thermosetting Polymers

Patrick Krenn, Patrick Zimmermann, Tim Zeiner

Motivation

The modeling of solvent absorption kinetics in thermosetting polymers is from great interest for applications such as encapsulations or coatings [1]. In order to dimension their thickness correctly, experiments can be – due to slow kinetics – very time consuming and therefore often unfeasible. By modeling the diffusion a proper dimensioning of the thickness of encapsulations or coatings can be achieved with a lesser experimental effort.

Modeling Approach

For solvent absorption kinetics modeling the Maxwell-Stefan approach is used. Hereby, the driving force is the gradient of the chemical potential μ_{solv} as seen in equation 1 [2]. In this equation x_{solv} and x_{poly} are the respective molar fractions of solvent and polymer, u_{solv} and u_{poly} are the velocities of solvent and polymer molecules, R is the universal gas constant, T is the temperature and D_{MS} is the Maxwell-Stefan diffusion coefficient.

$$\frac{x_{solv}}{R \cdot T} \cdot \nabla \mu_{solv} = \frac{x_{solv} \cdot x_{poly}(u_{poly} - u_{solv})}{D_{MS}} \qquad (1)$$

If the velocity of the polymer u_{poly} is set 0 and a differential component balance of the solvent is carried out, the derivative of the solvent concentration c_{solv} in the polymer rich phase with respect to the time t can be formulated as illustrated in equation 2. Additionally, it should be mentioned, that the total concentration of the mixture c_{tot} in equation 2 is depending on the molar fraction of solvent x_{solv} because u_{poly} is set 0 and therefore c_{tot} is increasing with increasing x_{solv}.

$$\frac{\partial c_{solv}}{\partial t} = \nabla\left(c_{tot} \cdot D_{MS} \cdot \frac{x_{solv}}{(1 - x_{solv}) \cdot R \cdot T} \cdot \frac{\partial \mu_{solv}}{\partial x_{solv}} \cdot \nabla x_{solv}\right) \qquad (2)$$

The chemical potential of the solvent μ_{solv} can be calculated by a g^E-model or an equation of state. In order to be able to calculate the solvent absorption kinetics in polymers not just in liquid but also in gaseous mixtures an equation of state has to be taken. An equation of state that showed great results for polymer/solvent-mixtures is the PC-SAFT equation of state by Gross and Sadowski [3] and therefore PC-SAFT is chosen in this work. If the solvent absorption kinetics in polymers is modeled, it has to be considered, that the polymer chains are stretched due to absorption of solvent. This stretching of the chains causes an elastic force that counteracts a further solvent uptake, which has to be taken into account [4]. Therefore, the PC-SAFT equation of state is combined with the network term of Miao et al. [5] leading to the expression for the residual Helmholtz free energy shown in equation 3. This combination was already applied by Arndt and Sadowski [6] to model the hydrogel Poly(N-isopropylacrylamide) and is now used to model thermosetting polymers in this work. With the Helmholtz free energy, the chemical potential can by calculated applying standard thermodynamics.

$$A_{res} = A_{hc} + A_{disp} + A_{assoc} + A_{elastic} \qquad (3)$$

Results

Figure 1 shows a model calculation for the solvent uptake of a typical thermosetting polymer for two different temperatures in saturated steam. Therefore, it was modeled as one-phase system, assuming that the outermost grid point is in equilibrium at the beginning of the simulation, whereas all other grid points are set to a solvent uptake of 1e-4 mg/g. In figure 1, it can be seen that the equilibrium value of solvent uptake at 100 °C is 17 percent lower compared to the value at 130 °C. The penetration depth is similar, which was expectable due to the fact that D_{MS} – which increases with increasing temperature – has no influence on the dimensionless results in figure 1.

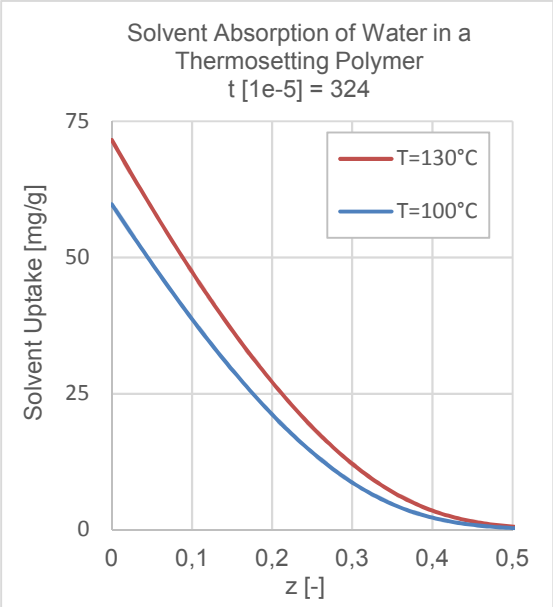


Fig. 1: Local solvent uptake of water in a thermosetting polymer at temperatures of 100 °C and 130 °C (model calculation).

In order to apply the model to dimension encapsulations or coatings, D_{MS} and the parameters for PC-SAFT and the network term have to be determined experimentally. This could be done by measuring the solvent uptake of the investigated polymer by gravimetric measurement. Therefore, the dry polymer is placed into the solvent and the mass increase is measured until equilibrium is reached. The Maxwell-Stefan diffusion coefficient can then be fitted to the measured mass increase of the time, whereas the PC-SAFT and the network parameters can be fitted to the measured equilibrium values.

Outlook

The developed model for the solvent absorption kinetics of pure components in thermosetting polymers will be expanded to mixtures and electrolytes. For the latter, a Debye-Hückel term will be added to equation 3. Furthermore, the influence of temperature gradients will be taken in to account. Therefore, the heat equation (equation 4) will be solved simultaneously with equation 2, which will be extended by a term which takes thermophoresis into account (equation 5). In equation 4 λ is the thermal conductivity, ϱ is the density of the mixture, c_P is the heat capacity at constant pressure, z is the spatial coordinate and $D_{T,\mu}$ is a thermodiffusion coefficient which works as factor to the term $\frac{\partial \mu_{solv}}{\partial T} \cdot \frac{\partial T}{\partial z}$. This term takes the local differences in the chemical potential to the energy balance into account. In equation 5 D_T is another thermodiffusion coefficient.

$$\frac{\partial T}{\partial t} = \frac{\lambda}{\varrho \cdot c_P} \cdot \frac{\partial^2 T}{\partial z^2} + D_{T,\mu} \cdot \frac{\partial \mu_{solv}}{\partial T} \cdot \frac{\partial T}{\partial z} \quad (4)$$

$$\frac{\partial c_{solv}}{\partial t} = \nabla \left(c_{tot} \cdot D_{MS} \cdot \frac{x_{solv}}{(1 - x_{solv}) \cdot R \cdot T} \cdot \frac{\partial \mu_{solv}}{\partial x_{solv}} \cdot \nabla x_{solv} \right) + D_T \cdot \nabla T \quad (5)$$

Acknowledgement

This work was funded by the Austrian Research Promotion Agency (FFG) from funds of the IEPPpM project. The IEPPpM project is done in cooperation with the Ottronic Regeltechnik GmbH in Zeltweg, Austria.

Literature

[1] Mullins, M. J.; Liu D.; Sue H. In Thermosets: Structure, Properties, and Applications, 2nd ed.; Qipeng, G. Ed.; 2017; Elsevier: Amsterdam; pp 35-68.

[2] Stefan J. Sitzungsberichte der Kaiserlichen Akademie der Wissenschaften Wien, 1871, 63, 63–124.

[3] Gross, J.; Sadowski, G. Perturbed-Chain SAFT: An Equation of State Based on a Perturbation Theory for Chain Molecules. Ind. Eng. Chem. Res. 2001, 40 (4), 1244–1260.

[4] Flory, P. J.; Rehner, J. Statistical Mechanics of Cross-Linked Polymer Networks II. Swelling. J. Chem. Phys. 1943, 11, 521–526.

[5] Miao, B.; Vilgis, T. A.; Poggendorf, S.; Sadowski, G. Effect of Finite Extensibility on the Equilibrium Chain Size. Macromol. Theory Simulations 2010, 19 (7), 414–420

[6] Arndt, M. C.; Sadowski, G. Modeling Poly(N-Isopropylacrylamide) Hydrogels in Water/Alcohol Mixtures with PC-SAFT. Macromolecules 2012, 45 (16), 6686–6696.

Questions and remarks to:
Patrick Krenn
Tel.: +43 (316) 873 - 4973
E-mail: patrick.krenn@tugraz.at

Strategy optimization of PEM fuel cell start-up process

Katharina Kocher, Viktor Hacker

Motivation

Efficient electric drive concepts are continuing to pick up pace around the globe. Whether in trucks or buses, e-mobility offers conciderable potential in commercial vehicles with regard to resource conservation, environmental protection and economy. Because innovative mobility has to be sustainable, the focus is on renewable energies. PEM fuel cells are expected to gradually replace internal combustion engines as electrical power sources due to high efficiency and environmental awareness. However, for transportation power applications, the durability of PEM fuel cells is a major challenge to the commercialization of these systems. The lifetime of each component is influenced by various factors, including material characteristics as well as operating parameters and conditions. The practical working conditions for automotive fuel cells can be divided into four dynamic operation processes [1]:

- Load changing
- Start-Stop processes
- High power operation
- Idling

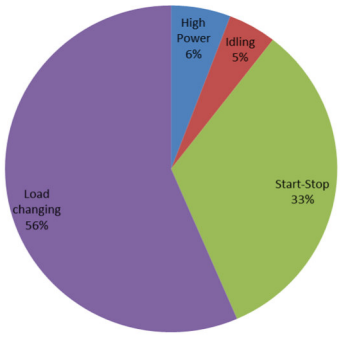
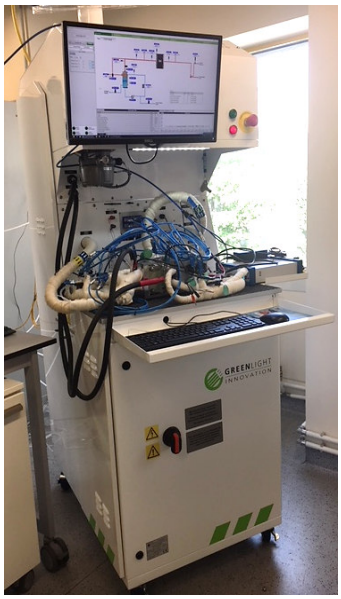


Fig. 1: PEM fuel cell lifetime limiting degradation caused by different practical operation conditions.

Regarding this, it is found, that start-stop processes contribute 33% to the degradation in PEM fuel cells. At present, solutions to mitigate degradation caused by start-up and shut-down mainly focus on the key materials for catalyst layer and system control strategies [2]. Therefore, the primary aim of this study is to find a suitable start-up procedure for single PEM fuel cell running on hydrogen gas.

Fuel cell testing on laboratory scale

The fuel cell used consisted of a 25 cm^2 commercial membrane electrode assembly (MEA), assembled in a commercial single cell fixture made of graphite bipolar plates with a serpentine flow pattern. The cell was tested using a Greenlight G60 fuel cell test station (Fig.2) and operated at 80 °C at atmospheric pressure with pure hydrogen and synthetic air with a relative humidity of 80% and 30% on anode and cathode, respectively.



Specifications

- Anode flow, 2x MFC: H_2 (3 NLPM), N_2
- Cathode flow, 2x MFC: Air/O_2 switchable (6 NLPM), N_2
- Humidification module (up to 90 °C)
- Bypass permits delivery of gas directly to stack
- Electircal reheat module (up to 110 °C)
- Stack end-plate heater (2x 2 A max)
- Nitrogen purge rotameter
- Back pressure control (0-3 Barg)
- 650 W electronic load bank, up to to 1.4 kW, air cooled
- Zero volt compensation
- CVM (cell voltage monitoring), 5 channels
- Emerald control and automation software

Fig. 2: Greenlight G60 fuel cell test station and main system specifications for single PEM fuel cell testing on laboratory scale.

Start-up and shut-down conditions are simulated according to the sequence summarized in table 1. In addition, Fig. 3 shows the cell voltage and current densitiy plotted as a function of time for one applied start-stop cycle [3].

Start-up strategy	Action	Time [s]
O_2 consumption$_{OCV}$	1. Fuel supply turned on and run cell at OCV	5
	2. Run cell at 0.5 A cm^{-2}	60
	3. OCV	10
	4. Shut off load and air supply	5
	5. Run cell at 2.5 A to consume O_2	10
	6. Potentiostatically reduce voltage to 20 mV	5
	7. Shut off load when current drops below 50 mA	30

Tab.1: Summarizes each action and duration time implemented during the start-up strategy.

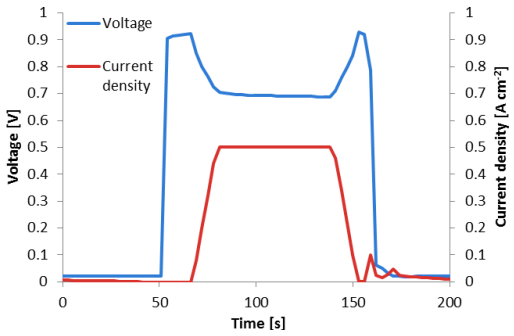


Fig. 3: Progress of cell potential and current density during one start-stop cycle.

Results

The cell was subjected to repeated start-stop processes and its performance was evaluated in-situ. Throughout testing the proposed strategy, the overall cell potential was monitored (Fig. 4). This O_2 consuming strategy is commonly referred to as a strategy minimizing degradation. Herein, the lowering of the cell potential of about 5.7% over 200 cycles points to electrode degradation originating from gas crossover during operation.

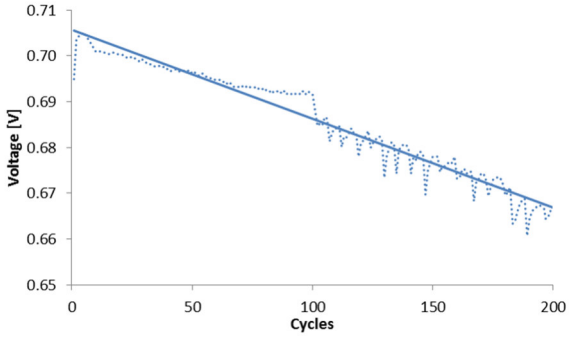


Fig. 4: Potential behavior of the single PEM fuel cell over 200 start-stop cylces applying the proposed strategy.

Literature

[1] T. Zhang et al., 2018: A review of automotive proton exchange membrane fuel cell degradation under start-stop operating condition, Applied Energy 223, p. 249-262.

[2] A. Oyarce et al., 2014: Comparing shut down strategies for proton exchange membrane fuel cells, Journal of Power Sources 254, p. 232-240.

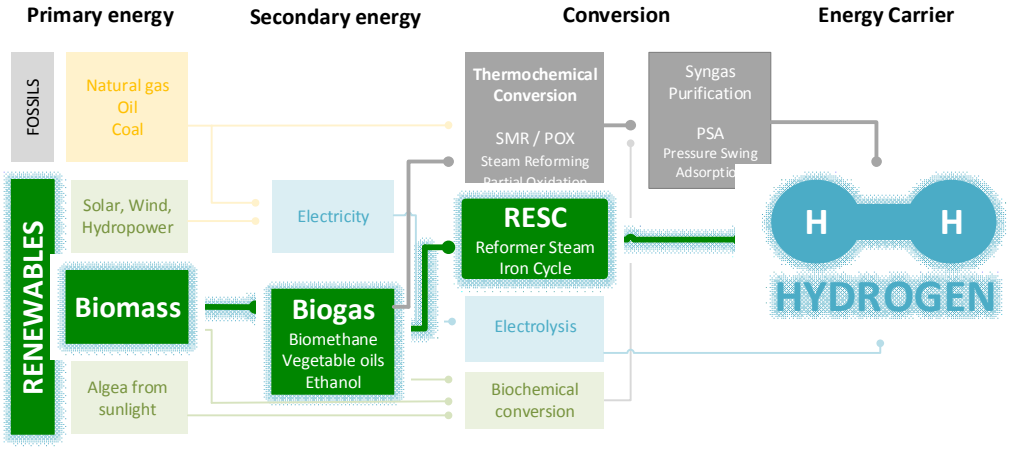
[3] K. Kocher et al., 2019: Behavior of single PEFC during start-up/shut-down, 12th Summer School on Advanced Studies of Polymer Electrolyte Fuel Cells.

Fragen und Anregungen bitte an:
Katharina Kocher
Tel.: +43 (316) 873 - 8793
E-Mail: katharina.kocher@tugraz.at

Viktor Hacker
Tel.: +43 (316) 873 - 8780
E-Mail: viktor.hacker@tugraz.at

High-pressure Hydrogen production for Polymer Electrolyte Fuel Cells from Renewable Ressources

Sebastian Bock, Robert Zacharias, Karin Malli, Viktor Hacker



Introduction

The regional utilization of locally available renewable resources is of crucial importance within a hydrogen-based energy system, as long-distance transport is avoided for both the feedstock and for hydrogen as a secondary energy carrier. The Reformer Steam Iron Cycle (RESC) is proposed to convert biomass decentrally into hydrogen, a high-quality energy carrier for mobility. The process is based on a fixed-bed chemical looping combined with an upstream syngas generation, e.g. gasification of biomass or reforming of biogas, to utilize different renewable feedstocks. Through the storage of the reduced metal and on-time hydrogen generation via oxidation the system can be employed to uncouple availability and demand for a future volatile energy system.

The system was investigated in the cooperative research project “HyStORM – Hydrogen Storage via Oxidation and reduction of metals” by Graz University of Technology, AVL List GmbH and Rouge H2 Engineering GmbH. The consortium addressed several key challenges for future implementation.

High-pressure hydrogen discharge

High-pressure hydrogen generation has been demonstrated in lab systems achieving a hydrogen release pressure of up to 100 bar [1]. The iron oxide based oxygen carrier (95% Fe_2O_3, 5% Al_2O_3) was reduced with syngas and oxidized with steam at 1023 K. The pressure of 100 bar for hydrogen production in steam oxidation phase significantly reduces the energy demand for 900 bar compression in mobility applications.

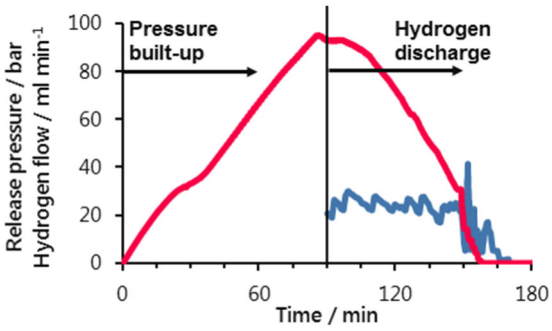


Fig. 1: Pressure build-up to 100 bar during steam oxidation followed by hydrogen discharge via opening the outlet valve.

Furthermore, the proof of concept for the production of pure pressurized hydrogen in combination with the sequestration of a pure carbon dioxide stream with the reformer steam iron cycle was presented. The carbon dioxide separation is achieved via partial reduction of the oxygen carrier from Fe_2O_3 to Fe_3O_4 level. After each steam oxidation phase, air oxidation was performed to bring the oxygen carrier back to hematite level. Product gas pressures of up to 30 bar and hydrogen purity of over 99% were achieved.

Pure hydrogen from synthetic biogas in a 10 kW lab research system

As part of the research activities [2], an experimental plant capable of hydrogen generation with an output power of 10 kW from methane and 18 kg total inventory of oxygen carrier was presented 2018 [3]. The system was capable to produce high purity hydrogen exceeding 99.999% from methane. Ongoing research especially focuses on the utilization of biogenic resources as biogas or gasified biomass for hydrogen generation. Within the experimental research, the applicability of synthetic biogas mixtures was demonstrated 2019 [4]. Several biogas compositions were investigated regarding their suitability for hydrogen generation.

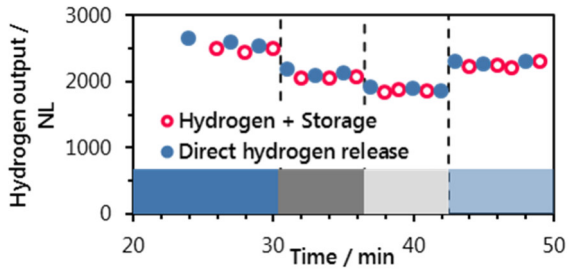


Fig. 2: Hydrogen output during 10 kW hydrogen production experiments from hydrocarbons with- and without hydrogen overnight storage

The results confirm the high potential of biogas as a resource for high-purity hydrogen generation with 99.99% to 99.999%, as required by low temperature fuel cells. Nevertheless, the application of synthetic biogas also led to increased carbon contamination compared to earlier experiments with methane as feedstock. No negative influence of the prolonged storage of the reduced oxygen carrier for energy storage was determined on the hydrogen output (see Fig. 2).

The influence of several trace gases of the biogas on the purity of the hydrogen was investigated. The most important impurities in common biogas and gaseous biomass raw materials were identified and model compounds were defined and tested in a fixed bed system. Carbon deposits were observed in particular when alcohols and cyclic compounds were added during reduction, even when additional steam was added to achieve a complete conversion of the compounds.

Acknowledgements

Financial support by the Klima- and Energiefonds through the Energy Research Program 2015 is gratefully acknowledged.

Literature

[1] R. Zacharias, S. Visentin, S. Bock, V. Hacker, High-pressure hydrogen production with inherent sequestration of a pure carbon dioxide stream via fixed bed chemical looping, Int. J. Hydrogen Energy. 44 (2019) 7943–7957. doi:10.1016/j.ijhydene.2019.01.257.

[2] S. Nestl, G. Voitic, R. Zacharias, S. Bock, V. Hacker, High-Purity Hydrogen Production with the Reformer Steam Iron Cycle, Energy Technol. 6 (2018) 563–569. doi:10.1002/ente.201700576.

[3] S. Bock, R. Zacharias, V. Hacker, High purity hydrogen production with a 10kWth RESC prototype system, Energy Convers. Manag. 172 (2018) 418–427. doi:10.1016/j.enconman.2018.07.020.

[4] S. Bock, R. Zacharias, V. Hacker, Experimental study on high-purity hydrogen generation from synthetic biogas in a 10 kW fixed-bed chemical looping system, RSC Adv. 9 (2019) 23686–23695. doi:10.1039/C9RA03123E.

Fragen und Anregungen bitte an:
Sebastian Bock
Tel.: +43 (316) 873 - 4984
E-Mail: sebastian.bock@tugraz.at

EET erfolgreich am Markt

Christoph Grimmer, Stephan Weinberger
und Florian Gebetsroither

SolMate – das Kraftwerk für den Balkon

SolMate ist ein kleines Kraftwerk für den Balkon, dass jede und jeder selbst installieren kann. Es besteht aus fünf leichten, flexiblen Photovoltaikpanelen und einer kompakten Speichereinheit. Die Panele werden genauso wie ein Sichtschutz am Balkongeländer montiert, mithilfe eines Kabels mit dem Speicher verbunden und dieser wird bei einer gewöhnlichen Steckdose angesteckt. Der eigene grüne Strom wird direkt in diese Steckdose zurückgespeist und steht somit in der gesamten Wohnung zur Verfügung – ganz ohne Baustelle, Installateur oder Papierkrieg.

So kann auch jeder Mieter, Freigeist und Lebemensch seinen eigenen Grünstrom produzieren, ohne eine Großinvestition tätigen oder diverse Ämter aufsuchen zu müssen. Und sollte irgendwann ein Umzug anstehen, siedelt SolMate einfach mit.



Abb. 1: SolMate Photovoltaik- und Speichersystem

Crowdfunding überspringt 200.000 Euro-Hürde

Um genügend Kapital für die Serienproduktion zu generieren, startete EET eine Crowdfunding-Kampagne mit Kickstarter als Vorverkaufsplattform. Exakt 300 Minuten nach Start der Kampagne fiel die erste Hürde: Das selbstgesteckte Ziel von einem Vorbestellungswert von 50.000 Euro für das nachhaltige Kleinkraftwerk SolMate wurde erreicht. „Der große Andrang ist eine Bestätigung für den hohen Innovationsgrad unseres Produkts und zeigt das immense persönliche Interesse der Menschen, etwas zum Schutz des Klimas und der persönlichen Energiewende beizutragen", betont EET-Gründer Christoph Grimmer. Mit der Entwicklung haben er und die Co-Gründer Stephan Weinberger und Florian Gebetsroither das weltweit erste Solarkleinkraftwerk für den Balkon entwickelt, das erneuerbaren Strom für den eigenen Haushalt erzeugt. Rund 25 Prozent des Strombedarfs eines gewöhnlichen Haushalts können damit abgedeckt werden. Darüber hinaus senkt SolMate auch den CO_2-Verbrauch um bis zu 6700 Kilogramm.



Abb. 2: SolMate am Balkon

Messtechnologie als Innovationskern

Innovationskern des Produkts ist die von EET entwickelte Speichereinheit: Diese dient als Pufferspeicher für die durch Solarpaneele eingefangene Sonnenenergie. Über die Steckdose misst SolMate, ob und wie viel Strom im Haus benötigt wird – im Bedarfsfall kann der Strom vom Pufferspeicher eingespeist werden. Ist der Verbrauch hingegen niedrig, bleibt der Sonnenstrom im

Kleinkraftwerk gespeichert und wird erst später freigegeben. Im Gegensatz zu vielen klassischen Photovoltaikanlagen ermöglicht SolMate einen gezielten Verbrauch des selbst erzeugten Stroms – und ist wesentlich einfacher in der Installation: „Innerhalb von 30 Minuten kann das System angebracht und gestartet werden", hebt der Geschäftsführer hervor. Kostenpunkt für die steirische Erfindung: In etwa 2.500 Euro wird ein neuer SolMate wert sein.

Auszeichnungen

Seit Gründung wurde EET mit zahlreichen Preisen, Grants und Auszeichnungen prämiert:

- Verbund Innovation Challenge 2017
- TÜV Wissenschaftspreis 2017
- Glaub-an-dich Challenge 2018
- Climate KIC 2016-2018 (Stage 1,2 und 3)
- Greenstart 2017 (Klima- und Energiefonds)
- Elevator Pitch 2017
- SFG Unternehmen des Monats (Oktober 2017)
- PitchX 2018 (Enera von EWE)
- Kelag GreenUp 2018
- Energiegenie 2019
- EES Innovationspreis 2019 (Intersolar)
- 15 Seconds Festival Start-up award 2019
- Trend@Venture Start-up des Jahres 2019

Über das Gründerteam und die EET GmbH

In der Arbeitsgruppe von Viktor Hacker am Institut für Chemische Verfahrenstechnik und Umwelttechnik haben sich Christoph, Stephan und Florian ein fundiertes Wissen im Bereich Elektrochemie und Elektrotechnik angeeignet. Mit diesem technologischen Hintergrund und der Überzeugung, dass die Energiewende nur gelingen kann, wenn Energie dezentral und intelligent gespeichert wird, wurde Ende 2016 der Entschluss gefasst das Unternehmen EET zu gründen.

Die EET - Efficient Energy Technology GmbH wurde im Mai 2017 von den ehemaligen CEET Mitarbeitern ins Leben gerufen. Der Hauptsitz des Unternehmens ist in Graz, Österreich. EET verfolgt mit ihrem Produkt ein Ziel: es jedem Menschen möglich zu machen, einen Beitrag für die Energiewende zu leisten. In erneuerbarer, grüner Energie liegt die Zukunft dieses Planeten und der Menschen, die darauf leben.



Abb. 3: Gründerteam EET, v.l.n.r: Stephan Weinberger, Christoph Grimmer und Florian Gebetsroither

Da es längst möglich ist grüne Energiequellen zu nutzen und auf fossile Rohstoffe zu verzichten, hat sich das junge Start-Up der Realisierung dieser Energiewende verschrieben. EET ist im Hightech-Inkubator Science Park Graz angesiedelt, der das Unternehmen im Wachstum unterstützt. Mehr Informationen unter www.eet.energy.

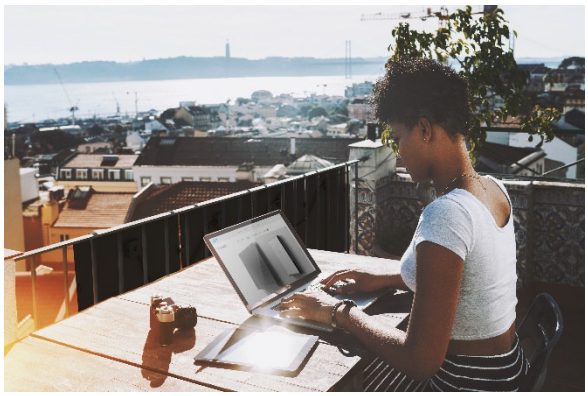


Abb. 4: SolMate im Einsatzbereich Balkon.

Fragen und Anregungen bitte an:
Christoph Grimmer
Tel.: +43 (316) 232203
E-Mail: info@eet.energy

Highlights der Forschungsgruppe „Brennstoffzellen und Wasserstoffsysteme“

Die MitarbeiterInnen der Arbeitsgruppe Brennstoffzellen und Wasserstoffsysteme haben auch im Jahr 2019 Preise und Ehrungen erhalten, welche die steigende wissenschaftliche und gesellschaftliche Relevanz dieser fortschrittlichen Technologien bestätigen.

Energy Globe Styria Award 2019

In der Alten Universität Graz wurde am 15. April 2019 das Projekt *Dezentrale Wasserstoffversorgung aus erneuerbaren Rohstoffen* unserer Forschungsgruppe ausgezeichnet. Als eines von 57 steiermarkweit bearbeiteten Projekten überzeugten wir die Fachjury mit unserem Know-How zur dezentralen Wasserstoffversorgung aus erneuerbaren Rohstoffen.



Abb. 1: Auszeichnung beim Energy Globe (vlnr) DI Sebastian Bock, DI^{in} Karin Malli, Robert Zacharias, MSc, DI Michael Lammer und Prof. Viktor Hacker, mit Rubrikpate Mag. (FH) Urs Harnik-Lauris.

OEAD Wissenschaftliches Austauschprogramm mit Frankreich

Unsere Arbeitsgruppe kooperiert mit der Universität Poitiers Im OEAD Projekt zur Entwicklung von regenerativen Brennstoffzellen. Wechselseitige Forschungsaufenthalte an den jeweiligen Universitäten sorgen für tiefergehende Einblicke in Katalyse, Charakterisierung und Anwendung von Brennstoffzellensystemen.



Abb. 2: OEAD Projekt mit Gastforschern aus Frankreich (vlnr) Prof. Aurélien Habrioux, DI^{in} Karin Malli, DI^{in} Sigrid Wolf, Prof. Viktor Hacker, Charlie Lemoine, MSc und Michaela Roschger, BSc.

Ehrung der Erfinderinnen und Erfinder

Am 11. November 2019 wurden in der Aula der Alten Universität Graz akademische Erfinderinnen und Erfinder geehrt. Bei dieser gemeinsamen Veranstaltung der Medizinischen Universität, der Karl-Franzens-Universität und der Technischen Universität Graz wurden DI Sebastian Bock, DI Bernd Cermenek, DI^{in} Katharina Kocher und Robert Zacharias, MSc für ihre Leistungen ausgezeichnet.



Abb. 3: Die ErfinderInnen 2019 unserer Forschungsgruppe (vlnr) DI Sebastian Bock, DI^{in} Katharina Kocher, DI Bernd Cermenek und Robert Zacharias, MSc.

TV-Dokumentation *Quanten-sprung*

Forschung und Innovation sichtbar zu machen ist von zentraler Bedeutung, um die Gesellschaft für zukunftsträchtige Technologien zu gewinnen. Andreas Jäger und sein Team vom ORF haben uns im Labor besucht und im persönlichen Gespräch mit Prof. Viktor Hacker alles über fortschrittliche Brennstoffzellsysteme und Wasserstoff als Energieträger der Zukunft erfahren. Die daraus entstandene TV-Dokumentation aus der Serie Quantensprung wurde am 9. Oktober auf ORF III ausgestrahlt.

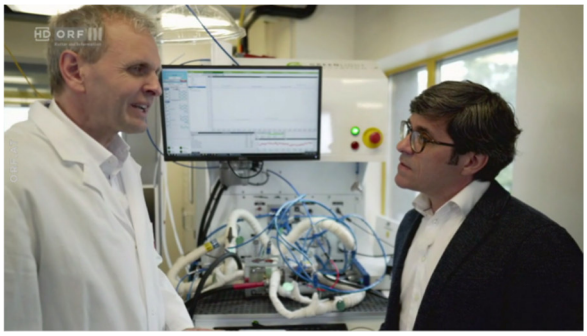


Abb. 4: Prof. Viktor Hacker und Andreas Jäger im Gespräch in der ORF-Dokumentation Quantensprung.

Posterpreise

Die heurige Summer School an der Yokohama National University war wieder ein ganz besonderes Erlebnis für Lehrende und Lernende gleichermaßen. Im internationalen Austausch mit zahlreichen TeilnehmerInnen international-renommierter Institutionen ist wie jedes Jahr die Präsentation der eigenen Arbeit und Prämierung durch eine international besetzte Jury von Professor*innen ein besonderes Highlight. Die Summer School findet jährlich-alternierend in Yokohama und Graz statt.



Abb. 4: Die TeilnehmerInnen der Internationalen Summer School am Campus der Yokohama National University.

- Bettina Lechner, BSc “Regeneration of catalysts for hydrogen production”.
- DI^{in} Sigrid Wolf “Development and characterzation of carbon supported ternary palladium-nickel-bismuth anode catalysts for the alkaline direct ethanol fuel cell”.

Konferenzreisestipendien

Alexander Henkes, BSc, Stefan Kolar, BSc, Bettina Lechner, BSc, Matthias Ranz, BSc, Michaela Roschger, BSc, Elisabeth Suntinger und DI^{in} Sigrid Wolf wurden von Seiten des Büros für Internationale Beziehungen der TU Graz mit einem Stipendium unterstützt. DI^{in} Sigrid Wolf erhielt einen Travel Grant von der Doctoral School Verfahrenstechnik.

DI^{in} Karin Malli wurde von der Doctoral School Verfahrenstechnik mittels Travel Grant finanziell unterstützt, um das heurige AIChE Meeting in Orland, Florida, zu besuchen.

Fragen und Anregungen bitte an:
Prof. Viktor Hacker,
Brigitte Hammer, Bakk.
Tel.: +43 (316) 873 – 8781
E-Mail: brigitte.hammer@tugraz.at

Brennstoffzellen Sommerakademie

12th International Summer School on *Advanced Studies of Polymer Electrolyte Fuel Cells*, Yokohama National University, Japan, 26. – 31. August 2019

Seit nunmehr 12 Jahren findet die „International Summer School on Advanced Studies of Polymer Electrolyte Fuel Cells“ als ein interdisziplinäres Fortbildungsprogramm für junge ForscherInnen im Rahmen einer Kooperation zwischen der TU Graz und der Yokohama National University statt.

An der diesjährigen internationalen Sommerakademie in Yokohama nahmen zwanzig Studierende aus Graz teil. Zudem konnten Vortragende aus Japan, Österreich, Deutschland, Italien, und Frankreich für die Veranstaltung gewonnen werden.

Die Inhalte der Vorträge der Summer School umfassen Themenbereiche wie Forschung, Entwicklung und Anwendung von Brennstoffzellensystemen sowie Elektrochemie, Thermodynamik, Kinetik, Wasserstoffproduktion und –speicherung. Auf der diesjährigen Technical Tour konnte das Isogo Fuel Cell Center von Toshiba Energy Systems besichtigt werden.



Abb. 1: TeilnehmerInnen der internationalen Sommerakademie.

Eine Poster-Session gab allen teilnehmenden Master- und PhD-StudentenInnen die Möglichkeit, aktuelle Forschungsarbeiten und Ergebnisse zu präsentieren und zu diskutieren. Anschließend organisierten die japanischen TeilnehmerInnen eine Sushi-Party. So konnte in lockerer Umgebung bei Sushi und Getränken mehr über die japanische Kultur und Mentalität erfahren werden. Dieses „come together“ bot zudem die Möglichkeit neben wissenschaftlichem Austausch auch neue Kontakte zu knüpfen.

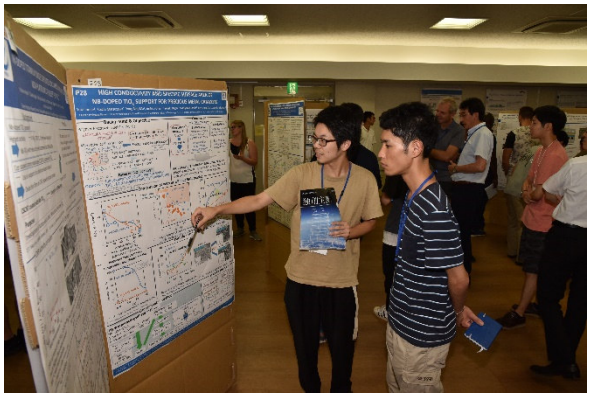
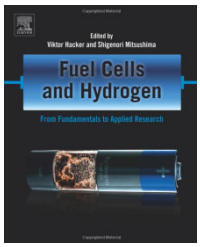


Abb. 2: Student Poster-Session

Der abschließende Höhepunkt der Summer School 2019 war ein Ausflug auf die Insel Sarushima (Monkey Island) mit gemeinsamen BBQ am Strand.

Die Vorträge der Sommerakademie wurden veröffentlicht unter: *Fuel Cells and Hydrogen: From Fundamentals to Applied Research*, Hacker, V. & Mitsushima, S. (eds.), 19 Jul 2018, Amsterdam, Elsevier.



Fragen und Anregungen bitte an:
Prof. Viktor Hacker
Brigitte Hammer
Tel.: +43 (316) 873 – 8781
E-Mail: brigitte.hammer@tugraz.at,
www.tugraz.at/fcsummerschool

Das war die AIChE 2019 in Orlando

Georg Rudelstorfer, Annika Grafschafter

Der Plan

Bereits bei der Weihnachtsfeier 2018 erfolgte die Ankündigung durch Matthäus Siebenhofer, dass sowohl das wissenschaftliche als auch das nicht wissenschaftliche Personal unseres Institutes im November 2019 am AIChE Annual Meeting in Orlando teilnehmen wird. Im Jänner 2019 ging es dann mit der Planung los. Die Finanzierung wurde geregelt, Abstracts eingereicht und Flüge gebucht. Gegenseitig unterstützten sich die MitarbeiterInnen unseres Institutes bei Konferenzanmeldungen und der Einreisegenehmigung (ESTA) für die USA. Bereits im Jänner stand fest, dass einige MitarbeiterInnen nach dem Ende der Konferenz den Bundestaat Florida genauestens inspizieren werden.

Die Anreise

Am Freitag den 8.11.2019 war es dann soweit. Am Vortag wurde gemeinsam für den Flug nach Orlando eingecheckt, obwohl es zu diesem Zeitpunkt noch nicht klar war, ob dieser Flug tatsächlich stattfinden würde. Die Lufthansa rief genau zwischen 7 - 8.11.2019 zum Streik auf und tausende Flüge wurden abgesagt. Doch als hätte die Lufthansa extra für uns eine Ausnahme gemacht, klappte alles wie am Schnürchen und wir konnten uns alle in Graz zum Abflug bereitmachen.



Abb. 1: Abreise der AIChE Task-Force am Grazer Flughafen

Pünktlich ging es von Graz nach Frankfurt und ohne Verzögerungen weiter nach Orlando. Nach einem 11 stündigen Flug kamen wir müde aber glücklich in Orlando an. Auch bei der Einreise gab es keinerlei Probleme, da auch die schrägsten Vögel unter uns in die USA eintreten durften, und somit konnten wir den ersten Abend gemütlich bei einem gemeinsamen Abendessen und Gin Tonic ausklingen lassen um uns vom Flug zu erholen.

Das erste Wochenende

Am Samstag machte sich der Jetlag bei den Meisten noch ein bisschen bemerkbar, jedoch konnte das niemanden davon abhalten, erste Erkundungstouren in Orlando zu starten. Schnell stellten wir fest, dass der Preis für hopfenhaltige Erfrischungsgetränke in den USA doch sehr höher ist als in der Heimat. Nichtsdestotrotz hielt uns das nicht ab, ab und wann ein Bierchen zu trinken und die Sonne zu genießen. In kleineren Gruppen wurden das Wochenende für diverse Exkursionen genutzt. Unternehmungen, wie die Besichtigungen des Kennedy Space Centers, Shoppingtrips und Sightseeing in Orlando Downtown standen auf dem Programm.



Abb. 2: Mitarbeiter des ICVT im Shopping-Wahn ☺

Die Konferenz

Bereits am Montag ging es richtig zur Sache. Insgesamt wurden vom Institut für Chemische Verfahrenstechnik und Umwelttechnik im Zeitraum von Montag bis Freitagabend 15 Vorträge gehalten und 4 Poster präsentiert. Beeindruckt von der Größe dieser Konferenz war es keine leichte Aufgabe sich die interessantesten Vorträge herauszupicken.



Abb. 3: Profis bei der Arbeit

Täglich um 8:00 startenden die unterschiedlichsten Vorträge in den diversesten Kategorien. So konnte man sich aus weit über 700 Vorträgen die in etwa 26 Fachrichtungen abdeckten sein Spezialthema herausgreifen. Um möglichst viele Vorträge zu besuchen, stärkten wir uns täglich bei einem ausgiebigen Frühstücksbuffet.



Abb. 4: Mit so einem Frühstück startet es sich sehr viel einfacher in den Tag

Für einige MitarbeiterInnen war es eine Premiere einen Vortrag auf einer internationalen Konferenz zu halten. Trotz anfänglicher Nervosität wurden beide Premiere-Vorträge mit Bravour und Professionalität gehalten.



Abb. 5: Premiere für Tanja, die sie ausgezeichnet gemeistert hat

Vergleicht man die Qualität aller Vorträge, kann das Institut für Chemische Verfahrenstechnik und Umwelttechnik mit Stolz behaupten die TU Graz souverän und professionell vertreten zu haben. Stets wurde lautstark applaudiert, interessiert nachgefragt und Visitenkarten ausgetauscht. Am Donnerstagabend wurde der letzte Vortrag unseres Institutes gehalten und zum Abschluss dieses ganz besonderen Abenteuers wurden wir zum Dank für die geleistete Arbeit von unserem Institutsleiter Matthäus Siebenhofer zum Abendessen ins Hard Rock Cafe Orlando eingeladen.



Abb. 6: Abschlussessen im Hard Rock Cafe

Stolz, glücklich und auch etwas müde nach den zahlreichen Vorträgen dieser spannenden Konferenzwoche ging es am nächsten Morgen für den Großteil der Belegschaft wieder zurück nach Graz. Da der Rückflug erst am Abend stattfand, wurde die Zeit genutzt um SeaWorld (einer der zahlreichen Vergnügungsparks in Orlando) zu besichtigen. Neben den zahlreichen Fahrgeschäften bietet SeaWorld auch die Möglichkeit exotische Tiere und Pflanzen zu bestaunen.

Einige abenteuerlustige MitarbeiterInnen haben sich zu kleineren Gruppen zusammengeschlossen um Florida

mit dem Auto unsicher zu machen. Diese besondere Reise hat uns sowohl als Arbeitskollegen als auch als Freunde zusammengeschweißt.

Der Road Trip

Insgesamt gab es 4 individuelle Reisegruppen die mit Mietautos einen Road Trip in den Süden Floridas geplant hatten. Unabhängig voneinander hatte jede Reisegruppe einen Abstecher nach Miami auf ihrer Route stehen. Miami hat sowohl bei Nacht als auch am Tag sehr viel zu bieten. Sei es der wunderschöne, fast unendlich erscheinende Sandstrand in Miami Beach der zum Wellenbaden einlädt, oder die atemberaubende Skyline von Miami Downtown am Abend.



Abb. 7: Miami @ Night

Für unsere Reisegruppe ging es von Orlando über Miami nach Duck Key, wo wir uns drei Nächte einquartiert hatten, um Key West und den Rest der Inselgruppe zu besichtigen. Es stellte sich heraus, dass Key West ein sehr lebendiger Ort im Vergleich zu den restlichen Inseln der Florida Keys ist. Nur noch 90 Meilen von Kuba entfernt genossen wir das noch badewannenwarme Wasser des Atlantik, den Sonnenuntergang und erforschten das Nachtleben auf Key West. Die Stadt Key West ist besonders für ihre Toleranz und Akzeptanz bekannt und die Menschen leben unter den Leitspruch „One Human Family“. Musik aus allen Ecken, gutes Essen und belebte Straßen machten die Stadt überaus sympathisch. Es wurden aber nicht nur die Straßen Key West unsicher gemacht, sondern wir erkundeten auch das Meeresleben des Flordia Reefs. Bei einem Schnorchelausflug im dritt größten Korallenriff der Welt,, konnten wir zum Beispiel die Eleganz und Anmutigkeit eines Katzenhaies beobachten und zwischen Fischschwärmen tauchen.



Abb. 8: Sonnenuntergang am Sombrero Beach in Marathon

Nach dem Schnorchelabenteuer ging es weiter in die Everglades. Dort angekommen bezogen wir spät in der Nacht unsere eher rustikale Unterkunft (amerikanische Gartenhütte) und planten die nächsten Ausflüge. Am drauf folgenden Morgen stellten wir begeistert fest, dass unser lieber Nachbar Joshua, eine frisch gepflückte Avocado (vom eigenen Baum aus den Garten) vor die Haustür gelegt hatte. Die Gastfreundschaft und Hilfsbereitschaft in diesem ländlichen Bereich viel uns besonders auf. Gestärkt von dieser unglaublich lecker schmeckenden riesen Avocado, ging es weiter zu einer Airboat Tour durch die Mangroven und zur Besichtigung eines Alligatorenparks. Auch wenn einem die Tiere anfänglich leidtaten, da sie doch hinter Gitter leben, war der Reiz diese anmutigen Tiere zu berühren größer. Unter fachkundiger Anleitung wagten wir uns schließlich diese zu halten und zu streicheln.



Abb. 9: Alligatoren streicheln

Den Abend ließen wir bei interessanten Gesprächen mit unserem Amerikanischen Nachbar Joshua am Lagerfeuer ausklingen. Hierbei wurde uns erst richtig bewusst, was es bedeutet ein „funktionierende“ Sozialsys-

tem in seiner Heimat zu haben. Geschichten vom Hurrikan Irma der 2017 auf dieser kleinen Insel wütetet und die daraus entstehenden Folgen wie die Vergiftung des Wassersystems machten uns die Folgen solcher Nachturkatastrophen erst richtig bewusst.

Am nächsten Tag startete unsere Kajak-Expedition durch die Sümpfe der Everglades. Unser Guide informierte uns über die verschiedensten Tier- und Pflanzenarten die im Everglades Nationalpark zu finden sind. Es gab viel zu entdecken, angefangen vom wilden Pfeffer über Orchideen bis hin zu Baby-Alligatoren (und deren Mütter) und Schildkröten. Als hätten wir uns abgesprochen, trafen wir am Ende unsere Kajaktour auf unsere Kollegen (siehe Abb. 10), die gerade ihre Einschulung bekamen und ihre Tour noch vor ihnen hatten.



Abb. 10: Kajaktour durch die Mangroven

Begeistert von den wunderbaren Eindrücken und Erkenntnissen mussten wir feststellen, dass die Woche bereits so gut wie vorbei war. Um die Distanz zum Flughafen zu verkürzen verbrachten wir die letzte Nacht in Tampa, wo wir unser letztes „typisch amerikanisches Abendessen“ zu uns nahmen. Da unser Flug in die Heimat erst am Abend losging, verbrachten wir noch ein paar Stunden am Strand in Tampa. Hier konnten wir einer Delphinschule beim jagen zusehen und entdeckten ein Urgestein unter den Meeresbewohner, den Pfeilschwanzkrebs.



Abb. 11: Letztes Abendmahl im amerikanischen Stil

Der Rückflug nach Graz über Frankfurt verlief problemlos und am Samstag den 23.11.2019 landeten wir am frühen Nachmittag in unsere Heimatstadt. So konnten wir das restliche Wochenende nutzen um uns wieder an unsere Zeitzone und das im Vergleich zu Florida, kalte und triste Wetter zu gewöhnen.

Resümee

Stolz und um viele Erfahrungen reicher, können wir auf eine erfolgreiche Konferenz und einen wunderschönen Urlaub zurückblicken. Wie man sich vorstellen kann, ist es eine organisatorische Mammutaufgabe 24 Personen von Graz nach Orlando und wieder zurück zu bringen. Hierbei ein großes Dankeschön an Bettina Koch, die sich intensiv um die Organisation der Reise gekümmert hat. Beginnend beim Transfer zum Flughafen, über das Hotel in Orlando bis hin zu den unterschiedlichsten Heimreisedaten der „Urlauber“ wurde alles geregelt. Ermöglicht hat diese Reise unser Institutsleiter Matthäus Siebenhofer. Bereits ein Jahr zuvor hat sich Matthäus um die Finanzierung und Genehmigung dieser Reise gekümmert und daher möchten wir uns alle herzlichst für die Möglichkeit dieser einzigartigen Reise bedanken! Für einige von uns war es der erste Aufenthalt in den USA und gleichzeitig die erste Teilnahme an einer internationalen Konferenz. Diese Reise wird uns noch lange in Erinnerung bleiben und wir freuen uns, unser Institut auch in Zukunft international vertreten zu dürfen.

"The European Summer School in High Pressure Technology (ESS-HPT 2019)"

Thomas Gamse

Da in ERASMUS+ die Intensivprogramme ersatzlos gestrichen wurden, wird der langjährige Intensivkurs seit 2015 als "**The European Summer School in High Pressure Technology** (**ESS-HPT**)" weitergeführt.

Die ESS-HPT fand heuer vom 7.7. bis 14.7.2019 an der Universität Maribor, Slowenien, und vom 15.7. bis 21.7.2019 an der TU Graz statt. Die Partneruniversitäten mussten für die Finanzierung die Teilnahmegebühr der Studierenden sowie die Reiskosten von Studierenden und Professoren tragen.



Abb.1: TeilnehmerInnen der ESS-HPT 2019 beim Welcome Dinner in Maribor / SI

An dieser 14 tägigen Summer School nahmen 22 Studierende aus 9 unterschiedlichen Nationen teil. Die Vorlesungsinhalte wurden von 21 ProfessorenInnen der 16 Partneruniversitäten sowie von einem Experten aus der Industrie vermittelt.

Die Studierenden präsentierten auch heuer ihre Forschungsarbeiten in einem 15 minütigen Vortrag und die eingereichten Abstracts wurden in einem Book of Abstracts beim Verlag der Technischen Universität Graz (www.ub.tugraz.at/Verlag, ISBN (e-book) 978-3-85125-685-7) publiziert. Diese Aktivität wird von sämtlichen Studierenden extrem positiv aufgenommen, da sie zum einen Einblick in die Vielzahl der Forschungsthemen erhalten und zum anderen etliche Studierende das erste Mal die Möglichkeit haben, einen wissenschaftlichen Vortrag vor einem Fachpublikum zu präsentieren.

Den Studierenden wurde neben der Vermittlung der erforderlichen Grundlagen die Bandbreite der bestehenden und zukünftigen Anwendungsmöglichkeiten von Hochdruckprozessen dargelegt. Abgerundet wurde das Programm durch eine Industriebesichtigung am 15.7.2019 bei der Fa. NATEX Prozesstechnologie in Ternitz, wo den Studierenden die Dimensionen industrieller Anlagen und Apparate eindrucksvoll vermittelt wurden.



Abb.2: Industriebesuch bei Fa. NATEX Prozesstechnologie

ESS-HPT 2020 wird im Zeitraum vom 5.7.2019 bis 19.7.2019 an der Universität Maribor und der TU Graz organisiert.

Fragen und Anregungen bitte an:
Thomas Gamse
Tel.: +43 (316) 873 -7477
E-Mail: Thomas.Gamse@tugraz.at

ERASMUS+ sowie weitere internationale Aktivitäten 2019

Thomas Gamse

Die TU Graz hat sich der Internationalisierung der Institution verschrieben und unterstützt und fördert die Mobilität von Lehrenden und Studierenden. Ziel ist es, die TU Graz national und international als Centre of Excellence bekannt zu machen, welche Lehre und Forschung auf höchstem Niveau betreibt, und bei der Entstehung der European Higher Education Area mitzuarbeiten. Aus diesem Grund ist es von besonderer Bedeutung, qualitativ hochwertiger Unterricht sowie auch Forschung in einem internationalen Umfeld zu betreiben, lehren und diskutieren.

Im Rahmen der **ERASMUS+ Studienaufenthalte** ist CEET regelmäßig das Gastinstitut für Studierende aus ganz Europa, die während ihres Aufenthaltes entweder Lehrveranstaltungen absolvieren oder Abschlussarbeiten durchführen. In Summe waren 2019 folgende Studierende im Rahmen **internationaler Austauschprogramme** am CEET:

Incoming Students		
Name	**Universität**	**Land**
Néstor Eduardo SANCHEZ RAMIREZ	Universidad de La Sabana	Kolumbien
Matija GATALO	National Institute of Chemistry	Slowenien
Charly LEMOINE	Université de Poitiers	Frankreich
Vahid DANESHVARI	University of Tabriz	Iran
Mutlucan BAYAT	University of Karabuk	Türkei
Arreya MINSRI	King Mongkut's University of Technology	Thailand
Jonathan SHAW	University of Strathclyde	Schottland
Andrew MAWBEY	University of Strathclyde	Schottland
Songsit CHA-UM	King Mongkut's University of Technology	Thailand
Gordon MAGILTON	University of Strathclyde	Schottland
Robby WIJAYA	University of Twente	Niederlande
Rathanon SANGTHONG	King Mongkut's University of Technology	Thailand
Chayangkul JANTA-IN	King Mongkut's University of Technology	Thailand

Vom CEET fanden im Jahr 2019 bilaterale Verträge im Bereich der **ERASMUS+ Personalmobilität** mit folgenden Universitäten statt:

- Ruhr Universität Bochum / DE
- Universität Budapest / HU

Thomas Gamse gab Vorlesungen an der Ruhr Universität Bochum vom 20.1. bis 23.1.2019 und an der Universität Budapest vom 2.10. bis 5.10.2019. Umgekehrt waren Frau Prof. Edit Szekely von der Universität Budapest vom 15.5. bis 17.5.2019 sowie Herr Prof. Marcus Petermann von der Ruhr Universität Bochum vom 15.5. bis 17.5.2019 an der TU Graz. Deren Vorlesungen wurden in der Lehrveranstaltung "High Pressure and Supercritical Processes" integriert und stellen somit auch einen Teil der Prüfung dar.

CEET konnte 2019 folgende internationale Vortragende für Vorträge bzw. Vorlesungen gewinnen:

Incoming Professors		
Name	**Universität**	**Land**
Prof. Marcus PETERMANN	Ruhr Universität Bochum	Deutschland
Prof. Edit SZEKELY	Budapest University of Technology and Economics	Ungarn
Assoc.Prof. Aurélien HABRIOUX	Université de Poitiers	Frankreich
Outgoing Professors		
Name	**Universität**	**Land**
Ao.Prof.Dr. Thomas GAMSE	Ruhr Universität Bochum	Deutschland
Ao.Prof.Dr. Thomas GAMSE	Budapest University of Technology and Economics	Ungarn
Assoc.Prof. Viktor HACKER	Yokohama National University	Japan

Ein weiteres Highlight dieses Jahr war die Genehmigung des **COST Projektes "GREENERING** -Green Chemical Engineering Network towards upscaling sustainable processes", COST Action CA18224, welches federführend von Prof. Dr. Rita Duarte, Neue Universität Lissabon, Protugal, initiiert wurde und eine Laufzeit von 4 Jahren aufweist. Beim ersten Meeting in Brüssel wurde Thomas Gamse als Leader der Working Group 3 Education and Mobility gewählt.

Awards, Familiäres und allerlei Statistik

Energy Globe Styria Award 2019

Das Projekt *Dezentrale Wasserstoffversorgung aus erneuerbaren Rohstoffen* konnte sich in diesem Jahr den Landespreis „Energy Globe Styria Award" sichern.

Lieber Sebastian, liebe Karin, lieber Robert, lieber Michi und lieber Viktor, wir gratulieren euch vom ganzen Herzen!



Abb. 1: Auszeichnung beim Energy Globe (vlnr) DI Sebastian Bock, DI[in] Karin Malli, Robert Zacharias, MSc, DI Michael Lammer und Prof. Viktor Hacker, mit Rubrikpate Mag. (FH) Urs Harnik-Lauris.

Erfinderinnen und Erfinder 2019

Wir gratulieren DI Sebastian Bock, DI Bernd Cermenek, DI[in] Katharina Kocher und Robert Zacharias, MSc zur Ehrung als akademische Erfinderinnen und Erfinder.



Abb. 2: Die ErfinderInnen 2019: DI Sebastian Bock, DIin Katharina Kocher, DI Bernd Cermenek und Robert Zacharias, MSc.

Best Presentation Awards

Die ProcessNet-Fachgruppe „Mehrphasenströmung" verlieh am heurigen *Jahrestreffen Reaktionstechnik* in Würzburg, Annika Grafschafter den Vortragspreis 2019.

Gratuliere!



Abb. 3: Matthäus Siebenhofer und Annika Grafschafter mit dem Vortragspreis 2019 von der ProcessNet-Jahrestreffen Reaktionstechnik und Mehrphasenströmungen 2019

Best Poster Awards

Liebe Bettina (Lechner) und liebe Sigrid, herzliche Gratulation zu den besten Postern an der heurigen Summer School an der Yokohama National University!

Familiäres

2019 war nicht nur aus Sicht der Forschung sehr erfolgreich für das CEET, auch in privater Hinsicht konnten zwei neue Sprössling in der CEET-Community begrüßt werden.

Den Anfang bildete Karolina, die süße Tochter von Marlene und Thomas Kienberger, die am 19.03.2019 das Licht der Welt erblickte und seither das Leben ihrer Eltern mit sehr viel Freude und Sonnenschein erfüllt.

Anschließend durften sich Bernd Cermenek und seine Christina ebenfalls über familiären Zuwachs freuen. Le-

opold kam am 18.09.2019 auf die Welt und wurde bereits von seinem Bruder Alexander sehnsüchtig erwartet.

Auch eine Hochzeit konnte 2019 verbucht werden: Am 02.04.2019 gaben sich Lorena und Patrick Zimmermann das Ja-Wort.

Wir gratulieren allen Jungeltern und Frischvermählten von ganzem Herzen und wünschen ihnen alles Gute für die Zukunft.

Sonstige Institutsangelegenheiten

Auch 2019 war wieder ein Jahr mit durchgehend positivem Arbeitsklima, was alle Institutsmitglieder beim jährlichen Semesterchillout gebührend zu genießen wussten. Dieses Mal wurde das Ende des Sommersemesters bei einer Grillerei inklusive Pub-Quiz im Innenhof der Inffeldgasse 25C gefeiert. Wie an den folgenden Fotos zu erkenne ist, konnte das Sommersemester entspannt abgeschlossen werden.



Abb. 4: Die Moderatoren des Pub-Quiz, Patrick und Roland, bei der Arbeit



Abb. 5: Sascha der Grillmeister versorgte uns mit leckerem Essen



Abb. 6: Auch unsere Thailändischen Austauschstudenten/Innen beteiligten sich beim Pub-Quiz



Abb. 7: Das Essen schmeckt herrlich und offensichtlich auch der Hopfenblütentee



Abb. 8: Typische Anzeichen des sogenannten Food-Komas



Abb. 9: Bis spät in die Nacht wurde intensiv über Forschung und Wissenschaft diskutiert

DoktorandInnen 2019

Das CEET gratuliert den Promovierten Klara Treusch und Annika Grafschafter herzlich zum Doktortitel und wünscht alles Gute für den weiteren Lebensweg.

Habilitationen 2019

Besonders freut sich das CEET Konkret über die erfolgreiche Habilitation von Thomas Wallek, den wir nun herzlichst als Associate Professor an unserem Institut begrüßen dürfen.

Gratuliere Thomas!

Neue Mitarbeiter 2019

Name	Stelle
Demmelmayer Paul	Projektassistent
Georg Rudelstorfer	Projektassistent
Steiner Thomas	Projektassistent
Wolf Sigrid	Projektassistentin

Nika alias Betriebsklimabeauftragte

Weiterhin sorgt eine der wichtigsten Mitarbeiterinnen, Nika, für ein tolles Betriebsklima. Sie schafft es auch an den düstersten Montagen uns allen ein Lächeln ins Gesicht zu zaubern.



Abb. 10: Nika bei der Arbeit



Abb. 11: Auch Nika hat Freizeit und verbringt diese gern mit ihrem Herrchen Sascha im Wald

Statistisches

Im Wintersemester 2019/20 waren insgesamt 17588 Studierende an der TU Graz inskribiert. Davon waren 423 im Bachelorstudium und 94 im Masterstudium der Verfahrenstechnik gemeldet, wobei sich 19 StudentInnen für das neue Masterstudium ‚Biorefinery Engineering' entschieden haben. Unter den Verfahrenstechniker gab es 23,8 % weibliche und 76,2 % männliche Studierende. Der Anteil an ausländische Studenten betrugt 13,4 %. Im WS 2019/20 haben sich 64 Studienanfänger für den Bachelor Verfahrenstechnik eingeschrieben. Dies zeigt, dass weiterhin ein großes Interesse an der Verfahrenstechnik besteht, denn immerhin konnte der Durchschnitt der letzten 5 Jahre gehalten werden. Auch die Abschlussarbeiten zeigen beachtliche Zahlen. Allein durch das Institut für Chemische Verfahrenstechnik und Umwelttechnik wurden im Jahr 2019 inklusive WS2018/19 insgesamt 30 Master of Science „erzeugt"

Abschlussarbeiten 2019

Masterarbeiten

Isolation of lignosulfonates from spent sulfite liquor using supported liquid membrane permeation (Paul Demmelmayerl) - Kienberger, Marlene; Ass.Prof. Dipl.-Ing. Dr.techn.

Feasibility of Catalytic Ozonation for the Removal of Pharmaceuticals and Hormones in Wastewater Streams (Elisabeth Dirninger) - Gamse, Thomas; Ao.Univ.-Prof. Dipl.-Ing. Dr.techn.

Lignosulfonate Recovery from Waste Liqour of the Magnefit Pulp Mill through Filtration (Daniela Grosinger) - Schwaiger, Nikolaus; Priv.Doz. Dipl.-Ing. Dr.techn.

Numerical Generation of Gasoline Surrogates using Oxygenates (Tobias Grubinger) - Wallek, Thomas; Assoc.Prof. Dipl.-Ing. Dr.techn.

Controlling of the operation of a high-temperature fuel cell (Dominik Heinrich) - Hacker, Viktor; Assoc.Prof. Dipl.-Ing. Dr.techn.

oncept Investigation of Diesel-Exhaust-Aftertreatment-Systems for Commercial Vehicles with Regard to future Legislation focusing on Reduction of NOx (Georg Kaufmann) - Siebenhofer, Matthäus; Univ.-Prof. Dipl.-Ing. Dr.techn.

Adsorptive lignosulfonate separation from sulfite spent liquor (Larissa Kern) - Letonja, Peter; Mag.rer.nat. Dr.techn.

Vakuumfiltration - Industrielle Anwendung (Martina Kotzent) - Siebenhofer, Matthäus; Univ.-Prof. Dipl.-Ing. Dr.techn.

NOx formation of nitrogenous compounds in the catalytic and thermal combustion (Valentin Kotzmaier); Siebenhofer, Matthäus - Univ.-Prof. Dipl.-Ing. Dr.techn.

Direct reduction of Siderit- Parameter optimization with DoE (Harald Lettner) - Lux, Susanne; Ass.Prof. Dipl.-Ing. Dr.techn.

Hydrothermal conversion of carbon-rich process streams from the pulp and paper industry to carboxylic acids (Gernot Metnitzer) - Kienberger, Marlene; Ass.Prof. Dipl.-Ing. Dr.techn.

Influence of the acid number on the catalyst activity in the hydrodeoxygenation of liquid phase pyrolysis oil (Nicolas Napetschnig) - Schwaiger, Nikolaus; Priv.Doz. Dipl.-Ing. Dr.techn.

Construction and scale up of a Taylor-Couette Disc Contactor: including installation, placing in operation, holdup measurements and determination of drop size distribution (Georg Rudelstorfer) - Siebenhofer, Matthäus; Univ.-Prof. Dipl.-Ing. Dr.techn.

Development of a Molecular Sampling Algorithm in Wolfram Mathematica (Thomas Steiner) - Wallek, Thomas; Assoc.Prof. Dipl.-Ing. Dr.techn.

Modelling of Neutralization Reactions and Fluid Flow in an Airlift Reactor (Stoppacher Bernd) - Letonja, Peter; Mag.rer.nat. Dr.techn.

Commissioning of a plant for the continuous pyrolysis of waste for the recovery of recyclable materials (Maximilian Waniek) - Schwaiger, Nikolaus; Priv.Doz. Dipl.-Ing. Dr.techn.

Dissertationen

Simple and Effective: The Taylor-Couette Disc Contactor for liquid-liquid extraction (Design and Performance) (Annika Grafschafter) - Siebenhofer, Matthäus; Univ.-Prof. Dipl.-Ing. Dr.techn.

Continuous Hydrodeoxygenation of Liquid Phase Pyrolysis Oil (Klara Treusch) - Schwaiger Nikolaus; Priv.-Doz. Dipl.-Ing. Dr.techn.

Emulsion-Enhanced Biphasic Esterification: Applied Reactive Separations for Valorization of Dilute Carboxylic Acids (Andreas Toth) - Siebenhofer, Matthäus; Univ.-Prof. Dipl.-Ing. Dr.techn

Veröffentlichungen

Publikationen

A. Grafschafter, M. Siebenhofer, 'Effect of rotor disc diameter on holdup, axial dispersion and droplet size in a Taylor-Couette Disc Contactor' Chemie-Ingenieur-Technik, 2019, DOI: 10.1002/cite.201900009

A. Grafschafter, M. Siebenhofer, 'Two-phase Taylor-Couette contactors: Holdup, axial dispersion and droplet size' Separation Since and Technology, 2019, DOI: 10.1080/01496395.2019.1595650

A. Grafschafter, M. Siebenhofer, 'Heterogeneously catalyzed reactions with liquid-liquid extraction: The challenge of continuous multiphase operation', 15th Minisymposium Verfahrenstechnik and 6th Partikelforum: Conference Proceedings, April 2019

A. Grafschafter, 'Simple and Effective: The Taylor-Couette Disc Contactor for liquid-liquid extraction (Design and Performance)', Ph.D Thesis, Graz University of Technology, August 2019

S. Bock, R. Zacharias, K. Malli, V. Hacker, 'High-Purity Hydrogen from Biogas with a Combined Reformer and Fixed-Bed Chemical Looping System.' Meet the Innovators: Transfoming the Future through Chemical Engineering, American Institute of Chemical Engineers, 448d, 10. November 2019

S. Bock, R. Zacharias, V. Hacker, 'Experimental study on high-purity hydrogen generation from synthetic biogas in a 10 kW fixed-bed chemical looping system.' RSC Advances, 25. July 2019, 10.1039/C9RA03123E

S. Bock, R. Zacharias, V. Hacker, 'High purity hydrogen production and storage with fixed bed chemical looping.' 15th Minisymposium Verfahrenstechnik and 6th Partikelforum: Conference Proceedings, April 2019

B. Cermenek, J. Ranninger, V. Hacker, 'Alkaline Direct Ethanol Fuel Cell.' Ethanol: Science and Engineering, pages 383–405, 2019, 10.1016/B978-0-12-811458-2.00015-8

B. Cermenek, J. Ranninger, B. Feketeföldi, I. Letofsky-Papst, N. Kienzl, B. Bitschnau, V. Hacker, 'Novel highly active carbon supported ternary PdNiBi nanoparticles as anode catalyst for the alkaline direct ethanol fuel cell.' Nano Research, 3, pages 683–693, 11. January 2019, 10.1007/s12274-019-2277-z

C. Chaiburi, B. Cermenek, B. E. Pichler, C. Grimmer, V. Hacker, 'Ethanol: Tolerant Oxygen Reduction Reaction Catalysts in Alkaline Media.' Journal of Electrochemical Energy Conversion and Storage, 2, pages 21004, 2019, 10.1115/1.4041979

M. Grandi, M. Gatalo, K. Mayer, B. Marius, G. Kapun, V. Hacker, 'Electro- and physicochemical analysis of catalyst coated membranes.' Bonaći-Koutecký V, editor, Interdisciplinary Endeavour in Technology at Nanoscale, Water and Environment: Book of Abstracts, 2019

M. Grandi, M. Gatalo, G. Kapun, S. Pasupathi, V. Hacker, 'Automated manufacturing of high performance fuel cells and influence of electrode structure on catalyst utilization.' 15th Minisymposium Verfahrenstechnik and 6th Partikelforum: Conference Proceedings, April 2019

M. Siebenhofer, A. Grafschafter, 'The role of single droplet mass transfer experiments in solvent design for acetic acid extraction with triisooctylamine based solvents.' Chemie-Ingenieur-Technik, 2019, DOI: 10.1002/cite.201900007

K. Kocher, V. Hacker, 'Design of polymer coated catalysts toward durable PEM fuel cells.', 15th Minisymposium Verfahrenstechnik and 6th Partikelforum: Conference Proceedings, April 2019

K. Kocher, V. Hacker, 'Design of polymer coated catalysts for enhanced oxygen reduction reaction toward durable PEM fuel cells.', 7th Regional Symposium on Electrochemistry-South East Europe, page 48, ISBN 978-953-56942-7-4, 2019

K. Kocher, W. Ladreiter, S. Kolar, V. Hacker, 'Behavior of single PEFC during Start-up/Shut-down.', Abstract 5th International Workshop on Hydrogen and Fuel Cells

as part of the 12th International Summer School on Advanced Studies of PEFCs, 29. August 2019

B. Lechner, K. Malli, V. Hacker, 'Regeneration of catalysts for hydrogen production.' Abstract from 5th International Workshop on Hydrogen and Fuel Cells as part of the 12th International Summer School on PEFCs, Yokohama, 29 August 2019

S. Lux, G. Baldauf-Sommerbauer, B. Ottitsch, A. Loder, M. Siebenhofer, 'Iron Carbonate Beneficiation Through Reductive Calcination – Parameter Optimization to Maximize Methane Formation.' European journal of inorganic chemistry, 13, 1748–1758, 13. February 2019, 10.1002/ejic.201801394

B. Marius, Z. Penga, V. Hacker, 'Voltage response analysis of polymer electrolyte fuel cells during dynamic load changes.' The 70th Annual Meeting of the International Society of Electrochemistry: Conference Proceedings, 9. August 2019

B. Marius, Z. Penga, V. Hacker, 'Mitigating mass transport limitations of PEFCs during dynamic operation.' 7th Regional Symposium on Electrochemistry RSE-SEE & 8th Kurt Schwabe Symposium: Book of Abstracts, 27. May 2019

K. Mayer, B. Marius, M. Grandi, V. Hacker, 'Online Identification of faulty operating conditions by using Total Harmonic Distortion Analysis.' Bonaĉić-Koutecký V, editor, Interdisciplinary Endeavour in Technology at Nanoscale, Water and Environment: Book of Abstracts, 2019

R. Nagl, P. Zimmermann, T. Zeiner, 'Interfacial Mass Transfer in Water-Toluene Systems.' Journal of chemical and engineering data, 1. January 2019, 10.1021/acs.jced.9b00672

M. Roschger, S. Wolf, B. Cermenek, B. Genorio, V. Hacker, 'Graphene Oxide Based Anode Catalysts for Alkaline Direct Ethanol Fuel Cells.' Abstract 5th International Workshop on Hydrogen and Fuel Cells as part of the 12th International Summer School on Advanced Studies of PEFCs, 29. August 2019

A. Toth, S. Schnedl, D. Painer, M. Siebenhofer, S. Lux, 'Interfacial Catalysis in Biphasic Carboxylic Acid Esterification with a Nickel-Based Metallosurfactant', ACS Sustainable Chemistry & Engineering, 7, 22, 18547–18553, 12. October 2019, 10.1021/acssuschemeng.9b04667

A. Toth, S. Lux, D. Painer, M. Siebenhofer, 'Utilization of Dilute Carboxylic Acids by Reactive Separations', 15th Minisymposium Verfahrenstechnik and 6th Partikelforum: Conference Proceedings, April 2019

S. Wolf, M. Roschger, B. Cermenek, C. Lemoine, V. Hacker, 'Development and Characterization of Carbon Supported Ternary Pd-Ni-Bi Anode Catalysts for the Alkaline Direct Ethanol Fuel Cell.' Abstract 5th International Workshop on Hydrogen and Fuel Cells as part of the 12th International Summer School on Advanced Studies of PEFCs, 29. August 2019

S. Wolf, B. Cermenek, M. Roschger, V. Hacker, 'Carbon Supported Ternary PdNiBi Electrocatalysts for Ethanol Oxidation Reaction in Alkaline Direct Ethanol Fuel Cells (ADEFCs).' Abstract Electrolysis and Fuel Cell Discussions 2019, September 2019

R. Zacharias, S. Bock, K. Malli, V. Hacker, 'High-Pressure Hydrogen Production from Bio-Ethanol Feedstock with Fixed-Bed Chemical Looping.' American Institute of Chemical Engineers, 622d, 10. November 2019

R. Zacharias, R. Visentin, S. Bock, V. Hacker, 'High-pressure hydrogen production with inherent sequestration of a pure carbon dioxide stream via fixed bed chemical looping.' International Journal of Hydrogen Energy, 44, 16, 7943–7957, 29. March 2019, 10.1016/j.ijhydene.2019.01.257

R. Zacharias, S. Bock, V. Hacker, 'High-pressure hydrogen production with inherent carbon dioxide separation.' 15th Minisymposium Verfahrenstechnik and 6th Partikelforum: Conference Proceedings, April 2019

F. Zapf, T. Wallek, 'Process flexibility analysis using multi-objective optimization in process simulation.' 15th Minisymposium Verfahrenstechnik and 6th Partikelforum: Conference Proceedings, April 2019

P. Zimmermann, A. Mawbey, T. Zeiner, 'Calculation of droplet coalescence in binary liquid-liquid systems: An incompressible cahn-hilliard/navier-stokes approach using the non-random two-liquid model.' Journal of chemical and engineering data, 1. January 2019, 10.1021/acs.jced.9b00493

Vorträge

S. Bock, R. Zacharias, K. Malli, V. Hacker, ‘HyStORM - sustainable, decentralized hydrogen generation and storage.’ 14th International A3PS Conference - Eco Mobility 2019: Diverse Powertrain Concepts for a carbon-neutral future, Vienna, Austria, 15. November 2019

S. Bock, R. Zacharias, K. Malli, V. Hacker, ‘High-Purity Hydrogen from Biogas with a Combined Reformer and Fixed-Bed Chemical Looping System.’ 2019 AIChE Annual Meeting, Orlando, USA, 13. November 2019

A. Grafschafter, M. Siebenhofer, 'Dreiphasenströmung im Taylor-Couette Disc Contactor (TCDC)' 45. Tieftemperatur-Thermodynamik-Kolloquium, Canazei, Italy, 15. February 2019

A. Grafschafter, M. Siebenhofer, 'Implementation of continuous multiphase flow for heterogeneously catalyzed reactions with liquid-liquid extraction in the Taylor-Couette Disc Contactor' 46th International Conference of the Slovak Society of Chemical Engineering, Tatranské Matliare, Slovakia, May 2019

A. Grafschafter, M. Siebenhofer, 'Continuous multiphase flow: heterogeneously catalyzed reactions combined with liquid-liquid extraction' Jahrestreffen Reaktionstechnik 2019, Würzburg, Germany, May 2019

A. Grafschafter, G. Rudelstorfer, S. Dohr, M. Siebenhofer, 'The challenge of continuous multiphase flow for heterogeneously catalyzed reactions with solvent extraction' 12th European Congress of Chemical Engineering, Florence, Italy, 15-19 September 2019

A. Grafschafter, G. Rudelstorfer, S. Dohr, Siebenhofer, ‘Multiphaseflow in the Taylor-Couette Disc Contactor.’ 2019 AIChE Annual Meeting, Orlando, USA, 13. November 2019

A. Grafschafter, G. Rudelstorfer, S. Dohr, M. Siebenhofer, ‘Heterogeneously Catalyzed Reactions with Solvent Extraction.’ 2019 AIChE Annual Meeting, Orlando, USA, 12. November 2019

M. Siebenhofer, A. Grafschafter, 'Taylor-Couette Two Phase Contactors' 46th International Conference of the Slovak Society of Chemical Engineering, Tatranské Matliare, Slovakia, May 2019

M. Grandi, M. Gatalo, K. Mayer, B. Marius, G. Kapun, V. Hacker, ‘Electro- and physicochemical analysis of catalyst coated membranes.’ Interdisciplinary Endeavour in Technology at Nanoscale, Water and Environment, Split, Croatia, 9. October 2019

V. Hacker, K. Mayer, B. Marius, M. Grandi, ‘Production and characterization of membrane electrode assemblies for fuel cell applications.’ Interdisciplinary Endeavour in Technology at Nanoscale, Water and Environment, Split, Croatia, 9. October 2019

S. Kleiber, S. Lux, M. Siebenhofer, ‘Methanol Synthesis of Heterogeneously Catalyzed Carbon Dioxide Hydrogenation.’ 18th Austrian Chemistry Days, Linz, Austria, 24. September 2019

K. Kocher, 'Design of polymer coated catalysts for enhanced oxygen reduction reaction toward durable PEM fuel cells.’ 7th Regional Symposium on Electrochemistry-South East Europe, Split, Croatia, 28. May 2019

K. Kocher, S. Wolf, B. Cermenek, K. Mayer, V. Hacker, Polymer coated catalysts to-ward durable PEM fuel cells.’ IEA AFC TCP Annex 31 Spring Meeting, Washington, USA, 1.–3. May 2019

P. Krenn, P. Zimmermann, M. Fischlschweiger, T. Zeiner, ‘Modellierung der Diffusion in Epoxidharzkompositen.’ Thermodynamik-Kolloquium 2019, Duisburg, Germany, 1. October 2019

A. Loder, S. Lux, M. Siebenhofer, ‘CO_2 methanation activated by Ni/MgO catalysts.’ European Congress of Chemical Engineering 12, Florence, Italy, 15.–19. September 2019

A. Loder, S. Lux, M. Siebenhofer, ‘Emission reduction of CO_2 in iron ore beneficiation by direct hydrogen reduction.’ 18th Austrian Chemistry Days, Linz, Austria, 24. September 2019

A. Loder, S. Lux, M. Siebenhofer, ‘Direct $FeCO_3$ reduction with H_2.’ 2019 AIChE Annual Meeting, Orlando, USA, 10. November 2019

K. Malli, R. Zacharias, S. Bock, V. Hacker, ‘High-Pressure Hydrogen Production from Bio-Ethanol Feedstock with Fixed-Bed Chemical Looping.’ 2019 AIChE Annual Meeting, Orlando, USA, 14. November 2019

B. Marius, Z. Penga, V. Hacker, 'Voltage response analysis of polymer electrolyte fuel cells during dynamic load changes.' The 70th Annual Meeting of the International Society of Electrochemistry, South Africa, 9. August 2019

C. Mayer, T. Wallek, 'Discrete Modeling Approach using Dice-like Molecules for Excess Gibbs-energy Models.' 2019 AIChE Annual Meeting, Orlando, USA, 13. November 2019

C. Mayer, T. Wallek, 'A Markov-chain based discrete modeling approach for excess Gibbs-energy models.' 15th Joint European Thermodynamics Conference, Barcelona, Spain, 22. May 2019

R. Nagl, P. Zimmermann, T. Zeiner, 'Modeling of interfacial properties and interfacial mass transfer in liquid-liquid extraction systems.' 2019 AIChE Annual Meeting, Orlando, USA, 14. November 2019

R. Nagl, P. Zimmermann, T. Zeiner, 'Einfluss der übergehenden Komponente auf die Grenzflächeneigenschaften in Flüssig-Flüssig-Systemen.' Thermodynamik-Kolloquium 2019, Duisburg, Germany, 1. October 2019

G. Rudelstorfer, A. Grafschafter, S. Dohr, M. Siebenhofer, 'The Taylor-Couette Disc Contactor a novel and flexible apparatus for high volume throughput liquid-liquid extraction.' 2019 AIChE Annual Meeting, Orlando, USA, 10.–15. November 2019

G. Rudelstorfer, A. Grafschafter, M. Siebenhofer, 'Reactive extraction in a multiphase Taylor-Couette Disc Contactor.' Doktorandenseminar Extraktion: Doktorandenseminar der Fachgruppe Extraktion 2019, Aachen, Deutschland, 29.–30. August 2019

A. Toth, S. Schnedl, S. Lux, D. Painer, M. Siebenhofer, 'Esterification of Dilute Aqueous Carboxylic Acids with Metallosurfactant Type Catalysts.' 2019 AIChE Annual Meeting, Orlando, USA, 11. November 2019

A. Toth, 'Biphasic catalysis for esterification of dilute aqueous carboxylic acids.' 46th International Conference of SSCHE, Slovakia, 21. May 2019

A. Toth, S. Schnedl, D. Painer, S. Lux, M. Siebenhofer, 'Katalysierte Ver- und Umesterung zur Nutzbarmachung von Carbonsäuren.' 45. Tieftemperatur-Thermodynamik-Kolloquium, Canazei, Italy, 15. February 2019

T. Weiß, D. Painer, K. Treusch, N. Schwaiger, P. Pucher, M. Siebenhofer, 'Reactive extraction of acetic acid from liquid phase pyrolysis oil and solvent regeneration by distillation.' 2019 AIChE Annual Meeting, Orlando, USA, 14. November 2019

F. Zapf, T. Wallek, 'Multi-Objective Optimization in Process Simulation using Stochastic Algorithms.' European Congress of Chemical Engineering 12, Florence, Italy, 15.–19. September 2019

F. Zapf, T. Wallek, 'Multi-objective optimization of production plants.' 45. Tieftemperatur-Thermodynamik-Kolloquium, Canazei, Italy, 11. February 2019

T. Zeiner, R. Nagl, P. Zimmermann, 'Interfacial Mass Transfer in liquid-liquid Systems.' Properties and Phase Equilibria for Product and Process Design, Vancouver, Canada, 11. May 2019

P. Zimmermann, 'Prediction of Surface Tensions and Adsorption Isotherms of Alkane Isomers.' 2019 AIChE Annual Meeting, Orlando, USA, 14. November 2019

P. Zimmermann, T. Zeiner, 'Direct Numerical Simulation of Liquid-Liquid Droplet Interactions.' 2019 AIChE Annual Meeting, Orlando, USA, 13. November 2019

P. Zimmermann, T. Zeiner, 'Numerische Lösung der Quasi-Inkompressiblen Cahn-Hilliard/Navier-Stokes Gleichungen.' Thermodynamik-Kolloquium 2019, Duisburg, Germany, 30. September 2019

Poster

C. Aspetsberger, V. Hacker, S. Bock, 'Parameter analysis of high purity hydrogen production and storage from biogas with the RESC process.' 5th International Workshop on Hydrogen and Fuel Cells as part of the 12th International Summer School on PEFCs, Yokohama, Japan, 29. August 2019

S. Bock, R. Zacharias, V. Hacker, 'High-purity hydrogen production and storage with fixed-bed chemical looping.' 15th Minisymposium Verfahrenstechnik, Leoben, Austria, 29. April 2019

P. Demmelmayer, M. Weißl, S. Spirk, M. Kienberger, 'New support layer material for the reactive extraction of lignosulfonates.' Jahrestreffen der ProcessNet-Fachgruppen Extraktion und Phytoextrakte 2019, Switzerland, 7.–8. February 2019

S. Kleiber, S. Lux, M. Siebenhofer, 'Methanol Synthesis of Heterogeneously Catalyzed Carbon Dioxide Hydrogenation.' 15th Minisymposium Verfahrenstechnik, Leoben, Austria, 29. April 2019

S. Kleiber, A. Loder, S. Lux, M. Siebenhofer, 'Carbon Dioxide Hydrogenation.' 2019 AIChE Annual Meeting, Orlando, USA, November 2019

K. Kocher, V. Hacker, 'Polymer coated catalysts toward durable PEM fuel cells' 15th Minisymposium Verfahrenstechnik, Leoben, Austria, 29. April 2019

S. Kolar, K. Kocher, W. Ladreiter, V. Hacker, 'Cold-Start/Stop Characteristics of PEFCs' 5th International Workshop on Hydrogen and Fuel Cells as part of the 12th International Summer School on Advanced Studies of PEFCs, Yokohama, Japan, 29. August 2019

P. Krenn, P. Zimmermann, M. Fischlschweiger, T. Zeiner, 'Modeling of Diffusion in Epoxy Resin Composites' 2019 AIChE Annual Meeting, Orlando, USA, 11. November 2019

P. Krenn, P. Zimmermann, M. Fischlschweiger, T. Zeiner, 'Modelling of Swelling of Highly Cross-linked Epoxy Resins' 15th Minisymposium Verfahrenstechnik, Leoben, Austria, 29. April 2019

B. Lechner, K. Malli, V. Hacker, ' Regeneration of catalysts for hydrogen production.' 5th International Workshop on Hydrogen and Fuel Cells as part of the 12th International Summer School on PEFCs, Yokohama, Japan, 29. August 2019

P. Letonja, T. Weiß, S. Kunihs, C. Groß, M. Siebenhofer, 'Pig Slurry Detoxication and Usage.' 2019 AIChE Annual Meeting, Orlando, USA, November 2019

A. Loder, S. Lux, M. Siebenhofer, 'Carbon dioxide methanation with bifunctional catalysts.' 15th Minisymposium Verfahrenstechnik, Leoben, Austria, 29. April 2019

A. Loder, S. Lux, G. Baldauf-Sommerbauer, M. Siebenhofer, 'Reaction kinetics of Ni/MgO catalyzed CO_2 methanation.' Jahrestreffen Reaktionstechnik 2019, Würzburg, Germany, 27. May 2019

A. Grafschafter, M. Siebenhofer, 'Heterogeneously catalyzed reactions with liquid-liquid extraction: The challenge of continuous multiphase operation', 15th Minisymposium Verfahrenstechnik and 6th Partikelforum, April 2019

B. Marius, V. Hacker, 'Challenges in flow field manufacturing, testing and simulation for PEM fuel cells.' Interdisciplinary Endeavour in Technology at Nanoscale, Water and Environment, Split, Croatia, October 2019

C. Mayer, T. Wallek, 'A discrete modeling approach for excess Gibbs-energy models using dice-like molecules.' 15th Minisymposium Verfahrenstechnik, Leoben, Austria, 29. April 2019

C. Mayer, T. Wallek, 'A Discrete Modeling Approach for Excess Gibbs-Energy Models Coupled with Random Sampling of Molecules.' European Congress of Chemical Engineering 12, Florence, Italy, 15.–19. September 2019

K. Mayer, B. Marius, M. Grandi, V. Hacker, 'Online Identification of faulty operating conditions by using Total Harmonic Distortion Analysis.' Interdisciplinary Endeavour in Technology at Nanoscale, Water and Environment, Split, Croatia, October 2019

R. Nagl, P. Zimmermann, T. Zeiner, 'Influence of different target components on interfacial properties in liquid-liquid extraction systems.' 15th Minisymposium Verfahrenstechnik, Leoben, Austria, 29. April 2019

M. Roschger, S. Wolf, B. Cermenek, B. Genorio, V. Hacker, 'Graphene Oxide Based Anode Catalysts for Alkaline Direct Ethanol Fuel Cells.' 5th International Workshop on Hydrogen and Fuel Cells as part of the 12th International Summer School on PEFCs, Yokohama, Japan, 29. August 2019

A. Toth, S. Lux, D. Painer, M. Siebenhofer, 'Reactive Separation Concept for Valorizing Low-Molecular-Weight Carboxylic Acids from Aqueous Media.' European Congress of Chemical Engineering 12, Florence, Italy, 15.–19. September 2019

A. Toth, S. Lux, D. Painer, M. Siebenhofer, 'Solvent Regeneration via Transesterification in Reactive Distillation.' Jahrestreffen Reaktionstechnik 2019, Würzburg, Germany, 27. –29. M ay 2019

A. Toth, S. Lux, D. Painer, M. Siebenhofer, 'Utilization of Dilute Carboxylic Acids by Reactive Separations.' 15th Minisymposium Verfahrenstechnik, Leoben, Austria, 29. April 2019

S. Wolf, B. Cermenek, M. Roschger, V. Hacker, 'Carbon Supported Ternary PdNiBi Electrocatalysts for Ethanol Oxidation Reaction in Alkaline Direct Ethanol Fuel Cells (ADEFCs).' Electrolysis and Fuel Cell Discussions 2019, La Grande Motte, France, 15. September 2019

S. Wolf, M. Roschger, B. Cermenek, C. Lemoine, V. Hacker, 'Development and Characterization of Carbon Supported Ternary PdNiBi Anode Catalysts for the Alkaline Direct Ethanol Fuel Cell.' 5th International Workshop on Hydrogen and Fuel Cells as part of the 12th International Summer School on PEFCs, Yokohama, Japan, 29. August 2019

R. Zacharias, S. Bock, V. Hacker, 'High-pressure hydrogen production with inherent carbon dioxide separation.' 15th Minisymposium Verfahrenstechnik, Leoben, Austria, 29. April 2019

F. Zapf, T. Wallek, 'Application of Stochastic Algorithms for Multi-Objective Optimization in Process Simulation.' 2019 AIChE Annual Meeting, Orlando, USA, 12. November 2019

F. Zapf, E. Rammerstorfer, E. Jeitler, G. Holzer, T. Wallek, 'CAT-SAVE: A soft sensor methodology for the precise spatial and temporal prediction of thermodynamic states inside a chemical reactor.' 15th Minisymposium Verfahrenstechnik, Leoben, Austria, 29. April 2019

F. Zapf, E. Rammerstorfer, E. Jeitler, G. Holzer, T. Wallek, 'Soft sensor methodology for the precise spatial and temporal prediction of thermodynamic states inside a chemical reactor.' 15th Joint European Thermodynamics Conference, Barcelona, Spain, 22. May 2019

P. Zimmermann, T. Zeiner, 'Computational Fluid Dynamics Based on Consistent Thermodynamics.' Properties and Phase Equilibria for Product and Process Design, Vancouver, Canada, 13. May 2019

Lehrveranstaltungen

Lehrveranstaltung	Semesterwochenstunden
Advanced Chemical Reaction Engineering	3 VU
Advanced Studies of Polymer Electrolyte Fuel Cells	3 VU
Anlagen- und Prozesstechnik	3 VO
Anlagengenehmigungsverfahren	2 SE
Bachelor-Projekt VT	4 PT
Bioethanolveredelung	1 PT
Biomass Fractionation Processes for Biorefineries	1,5 VO
Bioprozesse in der Umwelttechnik	2 VO
Biorefinery Project	6 PT
Chemical Engineering and Environmental Technology	1 SE
Chemical Engineering of Bio-based Products	2 VO + 1,5 UE
Chemical Reaction Engineering I	3 VU
Chemical Reaction Engineering II	2 VU
Chemical Reaction Engineering Laboratory	1 LU
Chemical Reaction Engineering Laboratory II	2 LU
Chemisch-/Thermische Abwasserreinigung	3 VU
Chemical Thermodynamics I	2 VO + 1 UE
Chemische Thermodynamik II	1 VO + 2 UE
Einführung in die Verfahrenstechnik (STEOP)	2 VO + 2 PT
Energy Storage and Conversion	1,33 VO
Environmental Technologies	3 VO
Field Trip Clean Technology	1 EX
Fluid Phase Properties	3 VU
Fuel Cells and Energy Storage	2 VO
Grundlagen der Elektrotechnik VT	2 VO + 1 UE
High Pressure and Supercritical Fluid Processes	2 SE
High-pressure Intensive Course	5 SE
Introduction into Process Simulation and Process Design	1 VO + 2 UE
Konstruktionsübungen	2 KU
Labor Chemische Thermodynamik	2 LU
Labor Umwelttechnik	2 LU
Luftreinhaltung / Abluftreinigung	3 VU

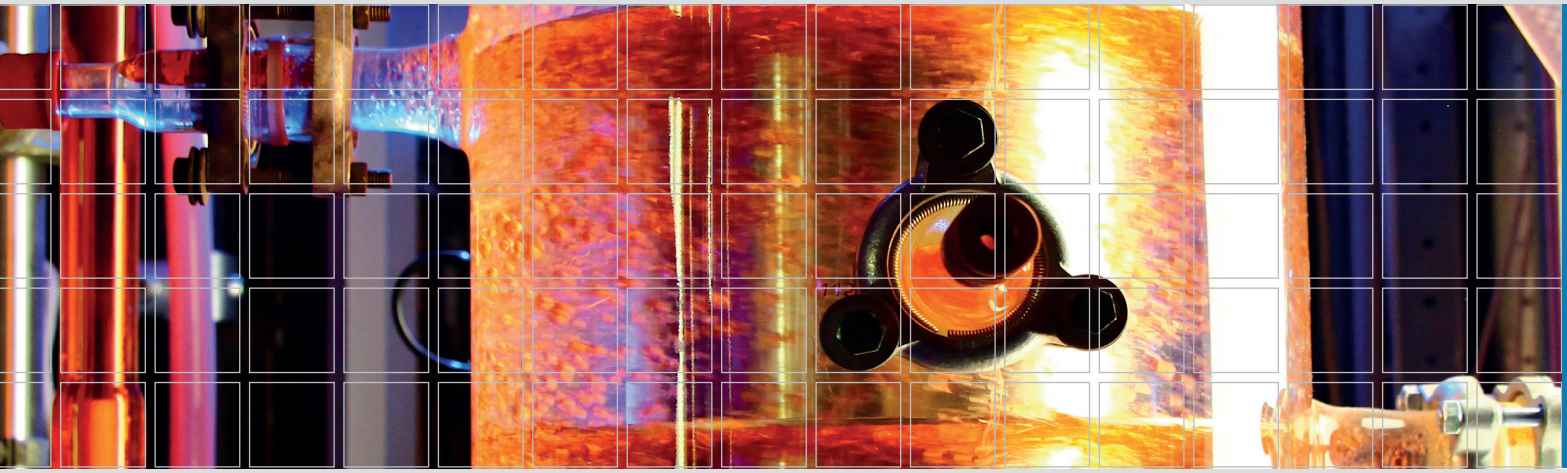
Mass Transfer Unit Operations	3VO 2UE
Mass Transfer Unit Operations Laboratory	1 LU
Mass Transfer Unit Operations Laboratory II	2 LU
Model development and simulation	4 VU
Plant and Process Approval	2 SE
Plant and Process Design	3 VO
Project CE	2 KU
Projektarbeit für Bachelorarbeiten	0,5 SE
Projektlabor Chemie (Bachelor)	0,5 SE
Process Intensificiation and Hybride Processes	2 VO + 1 UE
Advanced Chemical Reaction Engineering	3 VU
Recycling	2 VU
Safety and Environmental Aspects in Chemical Process Engineering	2 VO
Schadstoffe in der Umwelt	2 SE
Seminar zu den Masterarbeiten	2 SE
Sicherheit und Umweltschutz in der Anlagentechnik	2 VO
Statistische Thermodynamik	2 VO
Strömungsmechanik und Stoffaustausch VA	3 VU
Technische Nutzung Nachwachsender Rohstoffe – Stoffliche Nutzung	2 VO
Thermodynamics	4 VO + 3 UE
Tutorial Thermodynamics	2 UE
Umweltmanagement Verfahrenstechnik	2 VO
Umwelttechnologien	3 VO
Verfahrenstechnik für ChemikerInnen	1,5 VO

MitarbeiterInnen

Mitarbeiterinnen (alphabetischer Reihenfolge)	**Kontaktdaten** Tel.:+43 316 873 + DW E-Mail: name@tugraz.at	**Bereich**
Bock, Sebastian, Dipl.-Ing. BSc.	DW: 4984; sebastian.bock@	Brennstoffzellentechnik
Cermenek, Bernd, Dipl.-Ing. BSc	DW: 8788; bernd.cermenek@	Brennstoffzellentechnik
Demmelmayer, Paul, Dipl.-Ing. BSc	DW: 7968; demmelmayer@	Biorefinery
Fras, Rene	DW: 7975; rene.fras@	Werkstatt
Freißmuth, Jutta	DW: 7462; jutta.freissmuth@	Sekretariat
Gamse, Thomas, Ao.Univ.-Prof. Dipl.-Ing. Dr.techn.	DW: 7477; thomas.gamse@	Hochdruckextraktion
Grafschafter, Annika, Dipl.-Ing. Dr.techn. BSc.	DW: 4977; a.grafschafter@	Extraktion
Grandi, Maximilian, Dipl.-Ing. BSc	DW: 7977; maximilian.grandi@	Brennstoffzellentechnik
Groß, Clemens	DW: ; clemens.gross@	Technikum
Hacker, Viktor, Assoc.Prof. Dipl.-Ing. Dr.techn.	DW: 8780; viktor.hacker@	Leitung Brennstoffzellen-technik
Hammer, Brigitte, Bakk.rer.soc.oec.	DW: 8781; brigitte.hammer@	Brennstoffzellentechnik
Jany, Andrea, Dipl.-Ing. BSc	DW: 8785; andrea.jany@	Brennstoffzellentechnik
Kienberger, Marlene, Ass.Prof. Dipl.-Ing. Dr.techn.	DW: 7484; marlene.kienberger@	Biorefinery
Koch, Bettina, Mag.phil.	DW: 7461; bettina.koch@	Sekretariat
Kocher, Katharina, Dipl.-Ing. BSc	DW: 8793; katharina.kocher@	Brennstoffzellentechnik
Kleiber, Sascha, Dipl.-Ing. BSc	DW:7981; kleiber@	Prozessintensivierung
Krenn, Patrick, Dipl.-Ing. BSc	DW:4973; patrick,krenn@	Prozesssimulation
Kronabitter, Magdalena Julia	DW: 7960; kronabitter@	Labor
Kunihs, Sarah	DW: 7479; sarah.kunihs@	Labor
Lammer, Michael, Dipl.-Ing. BSc	DW: 8795; michael.lammer@	Brennstoffzellentechnik
Letonja, Peter, Mag.rer.nat. Dr.techn.	DW: 7473; p.letonja@	Technikumsleitung
Loder, Astrid, Dipl.-Ing. BSc	DW: 4974; astrid.loder@	Prozessintensivierung
Luttenberger, Herta, Ing.	DW: 7478; h.luttenberger@	Analytik
Lux, Susanne, Ass.Prof. Dipl.-Ing. Dr.techn.	DW: 7476; susanne.lux@	Prozessintensivierung
Malli, Karin, Dipl.-Ing. BSc	DW: 8796; karin.malli@	Brennstoffzellentechnik
Marius, Bernhard, Dipl.-Ing. BSc	DW: 4972; b.marius@	Brennstoffzellentechnik
Mayer, Christoph, Dipl.-Ing. BSc	DW: 4986; cmayer@	Thermodynamik
Mayer, Kurt, Dipl.-Ing. BSc	DW: 8799; kurt.mayer@	Brennstoffzellentechnik
Maitz, Silvia, Dipl.-Ing. Dipl.-Ing. BSc	DW: 7967; silvia.maitz@	Biorefinery
Meister, Alexander, BSc	DW: ; alexander.meister@	Technikum
Nagl, Roland, Dipl.-Ing. BSc	DW: 7475; nagl@	Prozesssimulation
Pichler, Thomas, Dipl.-Ing. BSc	DW: 4978; thomas.pichler@	Biorefinery
Rudelstorfer Georg. Dipl.-Ing. BSc	DW: 7474; rudelstorfer@	Extraktion
Samsudin, Asep Muhamad, B.Eng. M.Eng.	DW: 8789; asep.samsudin@	Brennstoffzellentechnik
Steiner, Thomas, Dipl.-Ing- BSc	DW: ; thomas.steiner@	Thermodynamik
Schwaiger, Nikolaus, Priv.-Doz. Dipl.-Ing. Dr.techn.	DW: 7965; nikolaus.schwaiger@	Biomass to liquid
Siebenhofer, Matthäus, Univ.-Prof. Dipl.-Ing. Dr.techn.	DW: 7480; m.siebenhofer@	Institutsleitung

Toth, Andreas, Dipl.-Ing. BSc	DW:7460; andreas.toth@	Prozessintensivierung
Wallek, Thomas, Assoc.Prof. Dipl.-Ing. Dr.techn.	DW: 7966; thomas.wallek@	Thermodynamik
Weiß, Tanja	DW: 7479; tanja.weiss@	Labor
Wolf, Sigrid, Dipl.-Ing. BSc	DW: 7979; sigrid.wolf@	Brennstoffzellentechnik
Zacharias, Robert, MSc. BSc	DW: 4985; robert.zacharias@	Brennstoffzellentechnik
Zapf, Fabian, Dipl.-Ing. BSc	DW: 4989; fabian.zapf@	Thermodynamik
Zeiner, Tim, Univ.-Prof. Dr.-Ing. habil.	DW: 7482; tim.zeiner@	Prozesssimulation
Zimmermann, Patrick, Dr.-Ing. B.Sc M.Sc.	DW:7464 patrick.zimmermann@	Prozesssimulation

WISSEN ▪ TECHNIK ▪ LEIDENSCHAFT



CEET Konkret 2019

Technische Universität Graz
Institut für Chemische Verfahrenstechnik und Umwelttechnik

Inffeldgasse 25/C/II, A-8010 Graz
Tel.: +43-316-873-7461
Fax: +43-316-873-7469

INSTITUTSLEITUNG:
Univ.-Prof. Dipl.-Ing. Dr.techn. Matthäus SIEBENHOFER
E-Mail: m.siebenhofer@tugraz.at

© 2019 Verlag der Technischen Universität Graz
www.tugraz-verlag.at