

CEET



CEET Konkret 2018

Impressum

Herausgeber Matthäus Siebenhofer
Layout Annika Graftschafner
Redaktion Annika Graftschafner, Daniela Painer
Lektorat Annika Graftschafner
Titelbild Vorderseite: Aufbau eines Airlift Reaktor, Rückseite: Vorlagebehälter und Flanschverbindung
Die Rechte liegen beim Institut für Chemische Verfahrenstechnik und Umwelttechnik

© 2018 Verlag der Technischen Universität Graz

www.ub.tugraz.at/Verlag

ISBN 978-3-85125-650-5

DOI 10.3217/978-3-85125-650-5



Dieses Werk ist lizenziert unter einer
Creative Commons Namensnennung 4.0 International Lizenz.

<https://creativecommons.org/licenses/by/4.0/deed.de>

Bibliografische Information der Deutschen Nationalbibliothek

Die Deutsche Nationalbibliothek verzeichnet diese Publikation in der Deutschen Nationalbibliografie; detaillierte bibliografische Daten sind im Internet über <http://www.dnb.de> abrufbar.





Inhalt

Editorial	3
Spin-Off EET platziert sich erfolgreich am Markt.....	4
Schweinegülle, Fluch oder Segen	6
Kontinuierliche Hydrodeoxygenierung von Flüssigphasenpyrolyseöl mit Synthesegas über die Wassergas-Shift-Reaktion	8
CO ₂ Methanation with Ni/MgO Catalysts.....	10
Methanol Synthesis of Heterogeneously Catalyzed Carbon Dioxide Hydrogenation.....	12
Direct Reduction of Iron Carbonate	14
Process Intensification of biobased processes by Reactive Separation	16
Utilization of Low Molecular Weight Carboxylic Acids from Dilute Aqueous Feed.....	18
Residence time distribution and drop size distribution in Taylor-Couette Disc Contactors	20
Surrogate als Basis der Motorenentwicklung.....	22
Multikriterielle Anlagenoptimierung mit stochastischen Optimierungsalgorithmen	24
Hochreiner Wasserstoff aus ICVT-Laboranlage	26
Automatisierte Herstellung von Hochleistungselektroden für Niedertemperatur-Brennstoffzellen	28
Entwicklung von Kontaktmassen zur nachhaltigen H ₂ -Herstellung mit dem RESC	30
Bio-Ethanol für den Einsatz als Brenngas in Brennstoffzellen.....	32
Langzeitstabile 60 cm ² -Luftelektroden für wiederaufladbare Zink-Luft Fließbatterien.....	34
Performance strategy for efficient cold start of polymer electrolyte fuel cells	36
Brennstoffzellen Workshop.....	38
Brennstoffzellen Sommerakademie.....	39
Biorefinery @ ICVT.....	40
ERASMUS+ sowie weitere internationale Aktivitäten 2018	44
"Prozessintensivierungs-Task-Force: Konferenzen und deren Highlights"	46
Das war die AICHEMA 2018	48
Awards, Familiäres und allerlei Statistik	51
Abschlussarbeiten 2018	53
Veröffentlichungen.....	55
Lehrveranstaltungen.....	62
MitarbeiterInnen.....	64

Editorial

Dieses Jahr 2018 in einem einleitenden Satz zusammenzufassen, das verleitet zur Feststellung:

„Die Zeit, sie eilt dahin im Nu.“

2018 war für unser Institut ein weiteres großartiges Jahr in Serie. Es war nur, wollten wir alle Ideen, Vorhaben, Projekte, Pläne und Problemlösungen umsetzen, entschieden zu kurz. Dieser Gesamteindruck gibt uns andererseits aber die Kraft und Ausdauer für die zukünftige erfolgreiche Weiterentwicklung unseres Institutes.

Dieses CEET Konkret 2018 ist der Arbeitsnachweis unseres Institutes für das Jahr 2018.

Wir haben alle Projekte, seien es unsere Forschungsprojekte, seien es Industrienaufträge, mit Erfolg bearbeitet, weiterentwickelt oder abgeschlossen.

Wir haben unser Institut und die Technische Universität Graz mit großem Erfolg bei der AICHEMA 2018 repräsentiert.

Wir haben bei allen internationalen Tagungen unsere Forschungsergebnisse erfolgreich präsentiert. Mehrere Awards belegen das.

Wir haben unser Plansoll in der „Erzeugung von Diplomingenieurinnen/Diplomingenieuren und Doktorinnen/Doktoren“ erfüllt und überschritten.

Wir haben in der Lehre trotz personeller Mangelwirtschaft unsere Studierenden mit Freude und Engagement unterstützt.

Der Mut unserer jungen Mitarbeiterinnen und Mitarbeiter zur Familiengründung bestätigt, dass offensichtlich das soziale Umfeld günstige Voraussetzungen für diese wichtigen weitreichenden Entscheidungen bietet.

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 2018 mit der Höchstnote beurteilt und abgeschlossen werden kann.

Ich wünsche allen Leserinnen und Lesern des CEET Konkret 2018, es ist bestimmt eine sehr spannende Lektüre, erholsame Weihnachtsfeiertage und ein erfolgreiches Jahr 2019.

Matthäus Siebenhofer

Spin-Off EET platziert sich erfolgreich am Markt

Jan Senn, Christoph Grimmer, Stephan Weinberger
und Florian Gebetsroither

SolMate – das Kraftwerk für den Balkon

SolMate ist ein kleines Kraftwerk für den Balkon, das jede und jeder selbst installieren kann. Es besteht aus fünf leichten, flexiblen Photovoltaikpanelen und einer kompakten Speichereinheit. Die Paneele 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 CO₂-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 (Energ von EWE)
- Kelag GreenUp 2018

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.



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

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. 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 (664) 2556272
E-Mail: christoph@eet.energy



Schweinegülle, Fluch oder Segen

P. Letonja, T. Weiß, S. Kunihs, C. Groß und M. Siebenhofer

Motivation

Schweinegülle ist ein wertvolles aber zu Unrecht umstrittenes Nebenprodukt der industriellen Landwirtschaft. Die Umwelt stöhnt unter der Geruchsbelästigung bei der Ausbringung. Gleichzeitig bewirkt die Ausbringung der Gülle in der vegetationsarmen Zeit (Herbst und Winter) durch die Umwandlung des Ammoniakstickstoffes zu Nitrat eine unerwünschte Boden- und Grundwasserbelastung.



Abb. 1: Klassische Ausbringung von Gülle mit Prallkopfverteiler

Der steigende Fleischkonsum verursacht regional, national und auch international ein stetig steigendes Überangebot an Schweinegülle. Die Aufarbeitung der Gülle gestaltet sich auf Grund der unterschiedlichsten Inhaltsstoffe scheinbar als schwierig, da neben Ammoniak auch eine Vielzahl anderer geruchsintensiver Stoffe die Gülle belasten. Die Herausforderung zur Lösung dieses Problems besteht in der Entwicklung geeigneter Behandlungsschritte, die unter wirtschaftlich vertretbaren Bedingungen direkt an der Quelle angewendet werden können.

Projektziels

Ziel des Projektes war die Entwicklung eines Verfahrens zur nachhaltigen Lösung des Problems Schweinegülle durch einfache technische Maßnahmen mit der Bedingung der ökologisch und ökonomisch vertretbaren ganzheitlichen Gülleverwertung. Durch die Kombination von „high impact“ Technologien war ein im Maß-

stab flexibles, lokal stationär aber auch mobiles Behandlungsverfahren zur Ammoniakstickstoff-Entfrachtung, Geruchsentfernung und „Verdichtung“ der Gülle zu erarbeiten.

Hauptaugenmerk dieses Projektes war, dass bei der Veredelung des natürlichen hochwertigen Düngers Schweinegülle keinesfalls Abfallstoffe gebildet werden. Sämtliche Produkte müssen landwirtschaftlich und im Gartenbau genutzt werden können. Zusätzlich war die technische Machbarkeit einer 50 prozentigen Volumsreduktion der Gülle zu prüfen, allerdings auch mit der Nebenbedingung, dass kein Abwasser ausgeschleust werden darf.

Innovation

Die innovative Idee für das Projekt war, durch Alkalisieren der Schweinegülle die Geruchsstoffe, wie z.B. Skatol, Kresole, Aldehyde und vor allem Buttersäure, zu neutralisieren und das Ammoniak aus der flüssigen Gülle im Umluftverfahren zu desorbieren und in Ammoniumsulfat umzuwandeln. Für das Alkalisieren wird Kalk und Holzasche verwendet. Durch die Holzasche werden wichtige Mineralstoffe, zum Beispiel Kalium, in der Gülle gelöst. Ammoniumsulfat ist in der landwirtschaftlichen Nutzung und im Gartenbau ein hochwertiger lagerfähiger Mineraldünger.

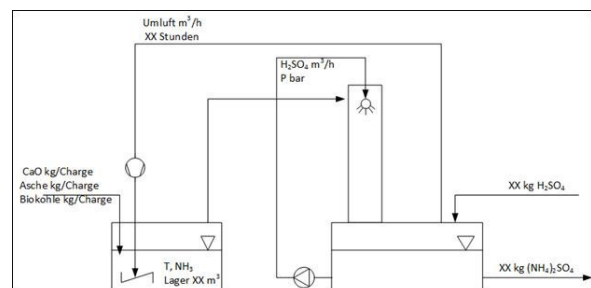


Abb. 1: Anlagenkonzept zur Gülle Aufarbeitung

Durch Zusatz von Bioaktivkohle wird der Gölleslurry fast vollständig entfärbt. Durch einfache Sedimentation kann aus diesem Slurry hochwertiger Feststoffdünger für die Bodenmelioration abgetrennt werden. Der Sedimentationsschlamm kann durch nachgeschaltete Filtration zu einem lagerfähigen Feststoffdünger verdichtet

werden. Das entfärbte Filtrat kann gemeinsam mit dem Klarlauf aus der Sedimentationsstufe wiederum direkt zur Bewässerung/Düngung ausgebracht werden. Alternativ kann das Filtrat durch Umkehrosmose in ein lagerfähiges alkalisches Konzentrat und ein Permeat (das zum Dampfbügeln geeignet ist) aufgeteilt werden.

Das alkalische Konzentrat kann zum Bewässern saurer Ackerflächen in der Landwirtschaft genutzt werden und verbessert so die Qualität des Bodens.

Durch die Einfachheit der einzelnen Schritte ist eine dezentrale Aufarbeitung der Gülle möglich. Unnötige Transportkosten fallen daher nicht an.

Praktische Umsetzung

Wichtigstes Ergebnis dieses Projektes ist, dass Schweinegülle kein Problemstoff ist, sondern ein hochwertiges Zwischenprodukt der industriellen Landwirtschaft.

Für die Desorption wurde ein Vorhersagemodell erarbeitet.



Abb. 2: Pilotanlage zur Gülle Aufarbeitung

Pilotversuche (60 kg Gülle) bestätigen, dass das Konzept praxistauglich ist. Aus dieser Überprüfung leitet sich folgende Empfehlung für die praktische Umsetzung ab:

- Desorption von NH_3 nach Alkalisieren der Gülle mit CaO /Holzasche bis pH 12.5
- Einstufige Absorption von NH_3 in Schwefelsäure
- Möglichst vollständige Entfärbung der so behandelten Gülle durch Zusatz von Bioaktivkohle

Für die Beschleunigung der Desorption und somit des Prozesses, sollte die Gülle auf erhöhte Temperaturen vorgewärmt werden.

Die pH-Wert Anhebung, auf pH = 12.5, kann mit $\text{Ca}(\text{OH})_2$, CaO , oder Holzasche erreicht werden. Bei diesem pH-Wert liegt in der Gülle der Ammoniumstickstoff über 99 % als freies Ammoniak vor.

Die bei der Desorption auftretende Schaumbildung kann durch den Zusatz von Entschäumern oder einen Zentrifugalabscheider (Zyklon) unterbunden werden.

Nach der Ammoniakentfrachtung kann die Gülle als Slurry ausgetragen oder nach Zusatz von Bioaktivkohle und Filtration in eine so gut wie farblose, geruchlose Lösung und in einen stichfesten Filterkuchen aufgetrennt werden.

Die Ammoniakabsorption in Schwefelsäure zu Ammoniumsulfat-Dünger kann einstufig in einem Strahlwäscher durchgeführt werden. Das Reingas ist so gut wie geruchsfrei.



Abb. 3: Flüssige Gülle Produkte

Erkenntnisse aus den Versuchen

- ✓ Gülle kann ammoniakentfrachtet werden.
- ✓ Gülle kann (fast) vollständig entfärbt werden.
- ✓ Gülle muss definitiv nicht geruchsbelästigend sein.

Schweinegülle kann mit vertretbarem technischem Aufwand in hochwertige Produkte umgearbeitet werden.

Neben der Aufarbeitung von Schweinegülle können dieser Prozessschritte auch in der Aufarbeitung von Rinderjauche eingesetzt werden.

Fragen und Anregungen bitte an:

Peter Letonja
Tel.: +43 (316) 873 - 7473
E-Mail: p.letonja@tugraz.at

Kontinuierliche Hydrodeoxygenierung von Flüssigphasenpyrolyseöl mit Synthesegas über die Wassergas-Shift-Reaktion

Klara Treusch^{1,2}, Nikolaus Schwaiger¹, Anna Mauerhofer³, Daniela Painer¹

¹Institut für Chemische Verfahrenstechnik und Umwelttechnik, TU Graz

²BDI-BioEnergy International GmbH

³Institut für Verfahrenstechnik, Umwelttechnik und Technische Biowissenschaften, TU Wien

Einleitung

Seit dem Kyoto Protokoll Mitte der 90er wurden mehrere Klimaabkommen konzipiert, mit dem Ziel Treibhausgasemissionen zu senken und somit die Erderwärmung zu stoppen. Biogene Treibstoffe der zweiten Generation leisten dazu einen erheblichen Beitrag. Zur Herstellung von biogenen Treibstoffen der zweiten Generation aus lignocellulöser Biomasse gibt es einige Lösungsvorschläge. Dazu gehören vor allem die indirekte Biomasseverflüssigung über die Fischer-Tropsch Synthese [1] sowie die direkte Biomasseverflüssigung über Pyrolyse und anschließende Hydrodeoxygenierung (HDO) [2]. Für die indirekte Biomasseverflüssigung ist nach der Synthesegaserzeugung durch Biomassevergasung eine aufwändige Gasreinigung notwendig, bevor daraus Treibstoffe oder Chemikalien erzeugt werden können. Durch die Verwendung von industriell hergestelltem Wasserstoff nach dem derzeitigen Stand der Technik wird bei der HDO zwar ein Treibstoff mit biogenem Kohlenstoff, aber fossilem Wasserstoff erzeugt. Um die Nachteile dieser beiden Prozesse zu eliminieren, wurde von der TU Graz und der TU Wien ein gemeinsamer Prozess entwickelt, der die Vorteile kombiniert. Dieser besteht aus der Biomassevergasung über den Zweibett-Wirbelschicht Dampfvergasungsprozess [3] (TU Wien), der Flüssigphasenpyrolyse von Biomasse über den bioCRACK Prozess [4] (BDI-BioEnergy International GmbH) und der HDO von Flüssigphasenpyrolyseöl (FPP Öl) mit dem erzeugten Synthesegas aus der Biomassevergasung (TU Graz). Als Ausgangsstoff für beide Prozesse (Vergasung und Flüssigphasenpyrolyse) dient lignocellulose Biomasse.

Hydrodeoxygenierung

Als Hydrodeoxygenierung wird die Entfernung von Sauerstoff mithilfe von Wasserstoff bezeichnet, wobei Wasser abgespalten wird. Dadurch werden die organischen Komponenten im FPP Öl im Idealfall soweit hydrophobiert, dass es zu einer Phasentrennung der organischen und wässrigen Phase kommt. Die organische Phase stellt die Produktphase dar, die einen deutlich höheren Heizwert als das eingesetzte FPP Öl aufweist.

Wassergas-Shift-Reaktion

Mit dem Prozess der TU Wien kann ein H₂-angereichertes Synthesegas erzeugt werden, das direkt ohne weitere Aufreinigung für die HDO verwendet werden kann. Über die Wassergas-Shift-Reaktion (WGS) kann laut Formel 1 aus Synthesegas, hauptsächlich bestehend aus H₂, CO, CO₂, CH₄, C₂H₆ und N₂, durch Zugabe von Wasser weiterer Wasserstoff erzeugt werden.



Für die HDO von FPP Öl wird ein Synthesegas mit einer Zusammensetzung laut Tabelle 1 verwendet. Flüssigphasenpyrolyseöl zeichnet sich durch einen sehr hohen Wassergehalt von ca. 60% aus, wodurch keine weitere Zugabe von Wasser notwendig ist.

H ₂ [V%]	CO [V%]	CO ₂ [V%]	Methan [V%]	Ethan [V%]	Ethen [V%]
70,5	8	5,5	14	1	1

Tab.1: Synthesegaszusammensetzung für die HDO von FPP Öl

Versuchsdurchführung

Die Hydrodeoxygenierung wird in einem Rohrreaktor mit einem Durchmesser von 3/8 Zoll durchgeführt, wobei ca. 20 mL beheiztes Reaktorvolumen zur Verfügung stehen. Zur Herabsetzung der Aktivierungsenergie wird ein Metalloxid Katalysator, $\text{CoMo}/\text{Al}_2\text{O}_3$ verwendet. Dieser wird zur Erhöhung der Aktivität mit Di-tertiär-butyl-disulfid (DTBDS) sulfidisiert. Die HDO mit Synthesegas wird bei 350°C und einer Raumgeschwindigkeit (LHSV = liquid hourly space velocity) von $0,5\text{ h}^{-1}$ durchgeführt. Nach dem Sulfidierungsvorgang bei 400°C und einer HDO Vorlaufzeit von 5 h bei 350°C , während der bereits FPP Öl durch den Reaktor gepumpt wird, beträgt die stationäre Versuchszeit 36 h.

Ergebnisse

Die HDO konnte über den Versuchszeitraum von 36 h durchgeführt werden. Es konnte ein Verbrauch an erzeugtem Wasser durch die WGS-Reaktion verzeichnet werden. Über die HDO mit Synthesegas wurde ein Produkt mit einem hohen Heizwert von $40,6\text{ MJ/kg}$ (Vergleich FPP Öl: $7,4\text{ MJ/kg}$) erzeugt. Dazu konnte der Sauerstoffgehalt auf ca. 2 w%, der Wassergehalt sogar auf unter 0,5 w% gesenkt werden. Der Siedeverlauf, gezeigt in Abbildung 1, liegt im Bereich von Diesel und ist im Vergleich zu einem Referenzversuch mit Wasserstoff bei 400°C um ca. 50°C in Richtung höhersiedende Komponenten verschoben. Durch den hohen Wassergehalt von Pyrolyseöl ist die HDO von FPP Öl mit Synthesegas über eine in situ WGS-Reaktion möglich.

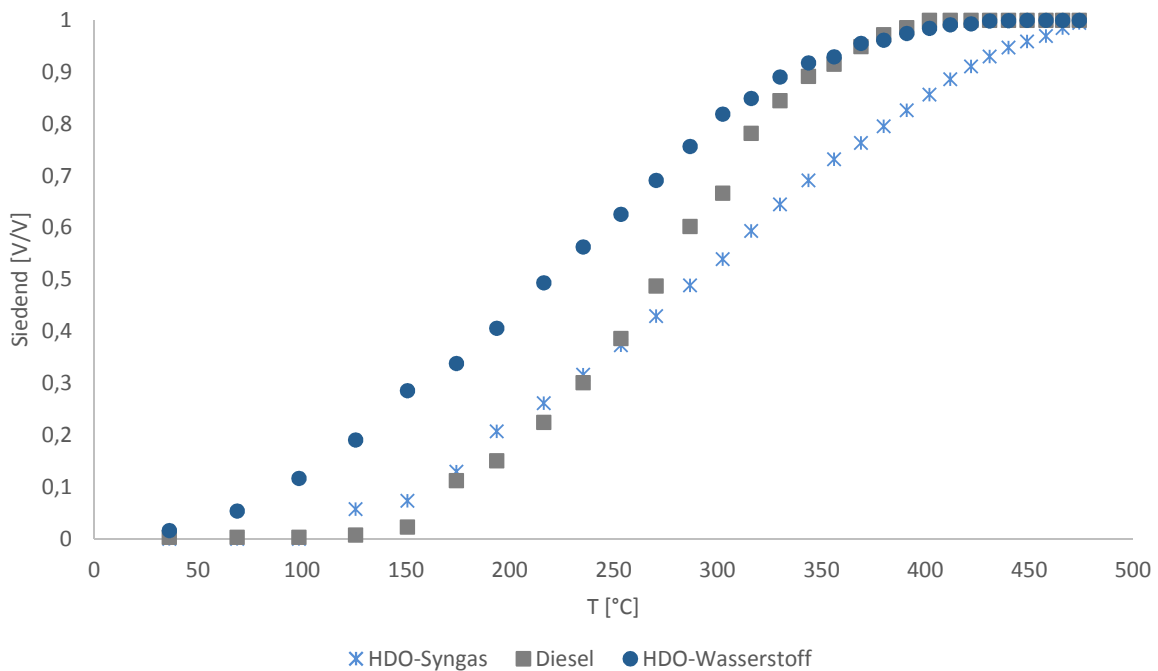


Abb. 1: Siedeverlauf der Produkte der HDO von FPP Öl mit Synthesegas und Wasserstoff im Vergleich zu Diesel

Literatur

- [1] Fischer, F., Tropsch, H., 1925: Über die direkte Synthese von Erdöl-Kohlenwasserstoffen bei gewöhnlichem Druck (Erste Mitteilung). Chem. Ber., vol. 59, S. 830-831
- [2] Treusch et al., 2018: High-throughput continuous hydrodeoxygenation of liquid phase pyrolysis oil. Reaction Chemistry & Engineering, 3, S. 258-266
- [3] Schmid et al., 2017: Sorption enhanced reforming with the novel dual fluidized bed test plant at TU

Wien. Proceedings of the 24th European Biomass Conference and Exhibition, 12-15 June 2017

- [4] Treusch et al., 2017: Diesel Production from lignocellulosic feed: the bioCRACK process. Royal Society open science, 4: 171122

Fragen und Anregungen bitte an:

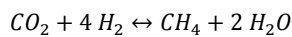
Dipl.-Ing. Klara Treusch
Tel.: +43 (316) 4009 - 1516
E-Mail: treusch@tugraz.at

CO₂ Methanation with Ni/MgO Catalysts

Astrid Loder, Susanne Lux

Motivation

CO₂ methanation is an important tool to reduce CO₂ emissions. Methane can be used in already existing pipelines for natural gas and it can serve as a chemical hydrogen storage facility [1]. A CO₂ rich waste gas stream can be utilized to produce methane, e.g. from ore calcining. A possible hydrogen source is coker gas from the steel industry, which has a high hydrogen concentration.



A bifunctional Ni/MgO catalyst is used for the CO₂ methanation in this project. Nickel was chosen because it adsorbs hydrogen and it is highly selective to methane [2]. Magnesium oxide activates CO₂ and it reduces catalyst deactivation, e.g. sintering [3].

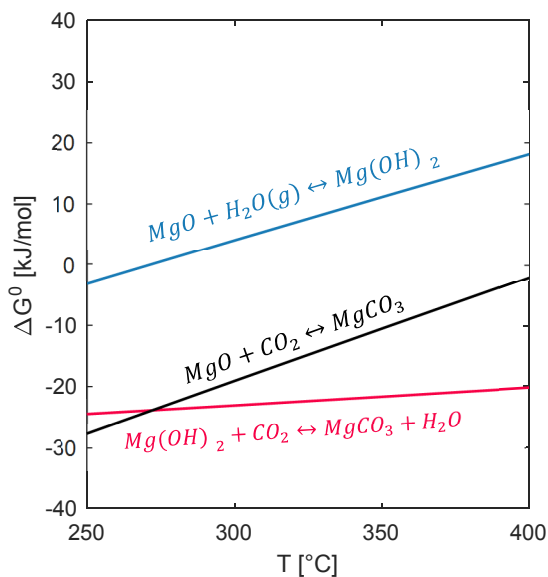


Fig. 1: Gibbs free enthalpy ΔG_R^0 for Mg reactions with CO₂ and water

During the CO₂ methanation 2 mol of water are produced for every mol of methane. Many methanation catalysts are deactivated by water but MgO can reduce the

negative impact of water. MgO reacts with water to produce Mg(OH)₂. The Gibbs free enthalpy for the adsorption of CO₂ on Mg(OH)₂ is more favorable than for MgO (Figure 1). Ni/MgO is a cheap, highly active, easily synthesized and robust catalyst, which is advantageous for an industrial application.

Experimental Method

Ni/MgO catalysts were prepared via wet impregnation (Figure 2).



Fig. 2: Ni/MgO catalyst after impregnation

Catalysts with nickel loads of 11, 17, 20 and 27% Ni on MgO and the MgO backbone by itself were tested.

The CO₂ methanation was investigated in a bench scale fixed bed tubular reactor from Parr Industries (Figure 3). CH₄, CO and CO₂ concentrations in the product gas were analyzed during each experiment.



Fig. 3: Setup of the tubular reactor from parr industries

The feed gas ratio was $H_2:N_2:CO_2=56:30:14$. Feed gas streams from $1.2-14.8\text{ m}^3\text{ kg}^{-1}\text{ h}^{-1}$ and temperatures between 260°C and 425°C were tested.

Results

The MgO backbone is active for the CO_2 hydrogenation and selective to CO (Figure 4). The CO formation is facilitated by high temperatures.

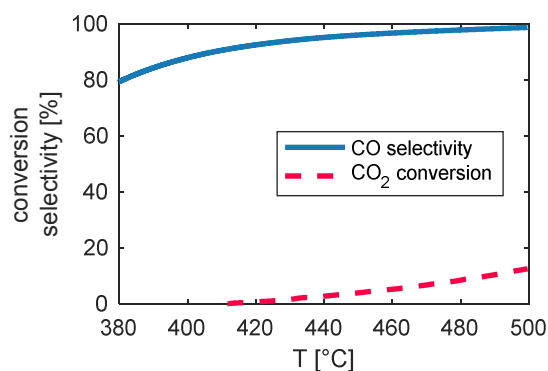


Fig. 4: CO_2 conversion and CO selectivity for the CO_2 hydrogenation with MgO catalyst at a feed flow = $14.8\text{ m}^3\text{ kg}^{-1}\text{ h}^{-1}$

The 11–27% Ni/MgO catalysts were all selective to methane (Figure 5).

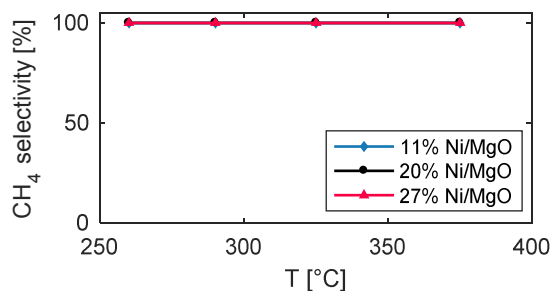


Fig. 5: CH_4 selectivity for the CO_2 methanation for 11-27% Ni/MgO catalysts at a feed flow = $3.7\text{ m}^3\text{ kg}^{-1}\text{ h}^{-1}$

The CO_2 conversion is rising with rising temperature for all Ni/MgO catalysts (Figure 6). A rate law was found that is able to describe all experimentally tested CO_2 conversions. The equation is Langmuir Hinshelwood based, consisting of a term for the forward and backwards reaction and the adsorption term. The activation energies are the same for all tested catalysts. Their values suggest a reaction controlled regime. The frequency factors for the different nickel loads can be described with a linear equation.

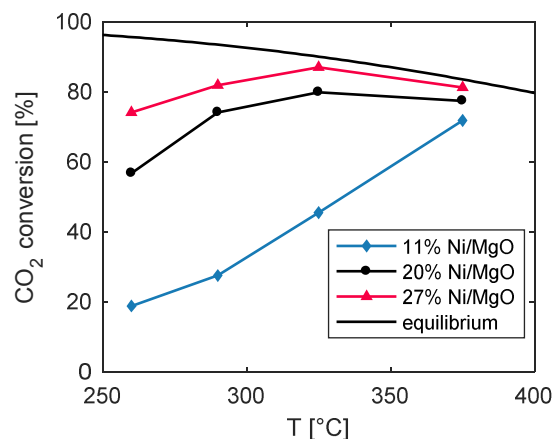


Fig. 6: CO_2 conversions for the CO_2 methanation for 11–27% Ni/MgO catalysts at a feed flow of $3.7\text{ m}^3\text{ kg}^{-1}\text{ h}^{-1}$

Conclusion

Ni/MgO is an active catalyst for the methanation of CO_2 . The catalyst is selective to methane. A Langmuir Hinshelwood based kinetic model is able to describe the CO_2 conversion of all tested catalysts.

Literature

- [1] G. Centi and S. Perathoner, "Opportunities and prospects in the chemical recycling of carbon dioxide to fuels," *Catal. Today*, vol. 148, no. 3–4, pp. 191–205, 2009.
- [2] Y. Yan, Y. Dai, H. He, Y. Yu, and Y. Yang, "A novel W-doped Ni-Mg mixed oxide catalyst for CO_2 methanation," *Appl. Catal. B Environ.*, vol. 196, pp. 108–116, 2016.
- [3] M. Guo and G. Lu, "The effect of impregnation strategy on structural characters and CO_2 methanation properties over MgO modified Ni/SiO₂ catalysts," *Catal. Commun.*, vol. 54, pp. 55–60, 2014.

Questions and remarks to:

Astrid Loder

Tel.: +43 (316) 873 - 4974

E-mail: astrid.loder@tugraz.at

Methanol Synthesis of Heterogeneously Catalyzed Carbon Dioxide Hydrogenation

Sascha Kleiber, Susanne Lux

Motivation

The carbon dioxide (CO₂) concentration in the atmosphere increased since the beginning of the industrial revolution from 280 ppm to more than 400 ppm today. This accumulation contributes to global warming, which comes along with a lot of environmental problems. Several strategies have been developed and investigated to counteract this progress. Generally, there are three different approaches: [1]

- *reduction of CO₂ production and emission*: increasing process efficiencies and developing alternatives for fossil fuel usage
- *carbon capture and storage (CCS)*: geological storage of CO₂ in the oceans, natural CO₂ reservoirs, gas and oil reservoirs or enhanced oil recovery processes
- *carbon capture and utilization (CCU)*: usage of CO₂ as a building block for fuels or chemicals

One of the central issues for the reduction of fossil fuel usage is the development of alternatives and renewable energy carriers. The hydrogen (H₂) production by water electrolysis of excess electricity from wind parks and solar plants seems to be a reasonable approach but storage and transportation are still very challenging. The CO₂ hydrogenation could solve both problems and is intensively investigated by several research groups. Figure 1 shows a variety of possible products.

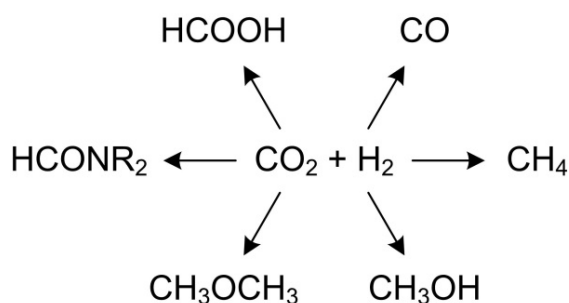
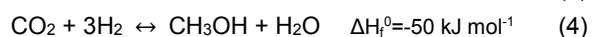
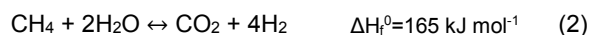


Fig. 1: Different possible products of CO₂ hydrogenation

The methane (CH₄) production, also known as Sabatier reaction, is applied for syngas production and formation of compressed natural gas. Carbon monoxide (CO) is an important substance for methanol (CH₃OH) and long chain hydrocarbon synthesis. Formic acid (HCOOH) is used as a feedstock at different chemical industries. CO₂ and H₂, far less toxic compounds than CO and phosgene, are preferred for formamide (HCONR₂) production. Dimethyl ether (CH₃OCH₃) is an alternative fuel with better combustion performances compared to diesel concerning cetane number and NO_x emissions. CH₃OH is a common solvent, feedstock for a variety of industrial reactions and a possibility for storage and transportation of hydrogen. As this research field offers a lot of potential concerning reaction conditions and catalyst compositions the further focus will be on CH₃OH synthesis. [2]

Industrial Production of CH₃OH

Industrially, CH₃OH is produced by steam reforming of natural gas. Eqs. (1) and (2) describe the production of syngas, a CO, CO₂ and H₂ mixture. Syngas is then converted into CH₃OH at T = 250-300 °C and P = 5-10 MPa with a CuO/ZnO/Al₂O₃ catalyst according to Eqs. (3) and (4). Adding CO₂ up to 30 % in the syngas improves the energy balance and CH₃OH yield significantly. C¹⁴ tests have shown that CH₃OH primarily is produced from CO₂, while CO is converted into CO₂ by the reverse water gas shift (RWGS) in Eq. (5). Increasing the CO₂ content too high would indirectly inhibit the CH₃OH synthesis as a high CO₂ concentration shifts the equilibrium of RWGS reaction towards the reactants and thereby produced H₂O influences the equilibrium of CH₃OH production in Eq. (4). [3]



CH₃OH Synthesis by Low Temperature Hydrogenation of CO₂

The CH₃OH synthesis of CO₂ hydrogenation is an exothermic reaction with volume contraction, which is favored by high pressure and low temperature according to the principle of Le Chatelier. Liu et al. developed a low temperature hydrogenation process for CH₃OH synthesis with an alcohol solvent as shown in Figure 2. In a semi batch autoclave with a volume of 70 ml CO₂ is hydrogenated with 2-octanol as solvent over a Cu/ZnO/Al₂O₃ oxalate-gel coprecipitated catalyst at T = 170 °C and P = 5 MPa. Over a reaction time of 20 h the CO₂ conversion of 25.9 % and a CH₃OH selectivity of 72.9 % was constantly achieved. [4]

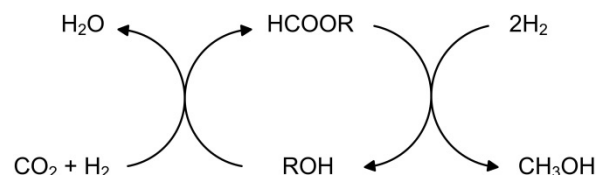


Fig. 2: Reaction mechanism for a low temperature route presented by Liu et al. [4]

Continuous Hydrogenation of Supercritical CO₂ to CH₃OH

Kommoß et al. investigated the heterogeneously catalyzed continuous hydrogenation of supercritical CO₂ over a lab synthesized Cu/ZnO/Al₂O₃ catalyst. The feed mixture of H₂ and CO₂ with a ratio of 3:1 was fed into a continuously operated tubular reactor at P = 16 MPa. Experiments were performed in a temperature range of T = 230-280 °C. A qualitative FTIR-spectroscopy for the gaseous products and a quantitative HPLC analysis of the liquid products showed a maximum CO₂ conversion of 16 % at 280 °C and a space time of 1.7 g s ml⁻¹. The CH₃OH selectivity reached a maximum of 80 % at 230 °C and the same space time. A maximum space time yield of 6 kg_{CH₃OH} kg_{Cat}⁻¹ h⁻¹ was achieved at 280 °C and 0.6 g s ml⁻¹. A higher feed ratio of H₂:CO₂ of 6:1 is assumed to hamper the RWGS side reaction as no CO was detected and the CH₃OH selectivity was increased. Based on these results the research group proposed a process concept for a heterogeneously catalyzed continuous hydrogenation of supercritical CO₂ to synthesize CH₃OH depicted in Figure 3. [5]

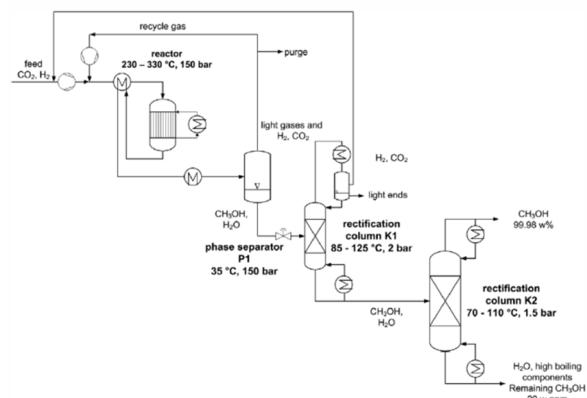


Fig. 3: Process concept proposal for CH₃OH synthesis [5]

Outlook

The investigation of the hydrogenation mechanisms and kinetics of different bifunctional catalyst systems concerning their CO₂ conversion and CH₃OH yield is the objective for the future work of our research team.

Literature

- [1] Lux, S. et al., 2018: Hydrogenation of Inorganic Metal Carbonates: A Review on Its Potential for Carbon Dioxide Utilization and Emission Reduction. *ChemSusChem* 2018, 11, 3357.
- [2] Wang, W. et al., 2011: Recent advances in catalytic hydrogenation of carbon dioxide. *Chem. Soc. Rev.*, 2011, 40, 3703–3727.
- [3] Jadhav, S. et al., 2014: Catalytic carbon dioxide hydrogenation to methanol: A review of recent studies. *Chemical Engineering Research and Design*, Volume 92, 2557–2567.
- [4] Liu, Y. et al., 2007: Efficient Conversion of Carbon Dioxide to Methanol Using Copper Catalyst by a New Low-temperature Hydrogenation Process. *Chemistry Letters* Vol.36, 1182–1183.
- [5] Kommoß, B. et al., 2017: Heterogeneously Catalyzed Hydrogenation of Supercritical CO₂ to Methanol. *Chem. Eng. Technol.*, 40: 1907–1915.

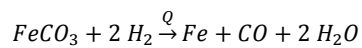
Questions and remarks to:
 Sascha Kleiber
 Tel.: +43 (316) 873 - 7981
 E-Mail: kleiber@tugraz.at

Direct Reduction of Iron Carbonate

Astrid Loder, Susanne Lux

Motivation

The iron and steel industry is responsible for 27% of the total CO₂ emissions from the industrial sector [1]. There is a huge potential for a reduction of these CO₂ emissions. In this context, the direct reduction of iron carbonate (FeCO₃) is a promising approach. It utilizes hydrogen to reduce the iron ore directly to elemental iron.



The conventional process for the iron carbonate beneficiation involves sintering to hematite (Fe₂O₃) followed by the reduction in the blast furnace, in which coke reduces the hematite to elemental iron. The two main benefits of the direct reduction process compared to the state-of-the-art route are: First, as FeCO₃ is reduced directly to Fe, there is no intermediate step to hematite. Less reducing agent is needed, as hematite has an unfavorable ratio of iron to oxygen. Second, via direct reduction with hydrogen CO and CH₄ may be obtained as gaseous byproducts instead of simply releasing CO₂.

The CO₂ emissions can be reduced by 60% with the direct reduction approach. A possible hydrogen source for the direct reduction could be coker gas, which has a high hydrogen content [2].



Fig. 1: Iron ore sample from the Styrian Erzberg

In 2018 the project *DiREkt* was started, which investigates the direct reduction of iron carbonate 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. The iron carbonate (Figure 1) for this project is mined at the Styrian Erzberg in Eisenerz, which is the largest iron carbonate reserve worldwide [3].

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 which achieve a 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 (Figure 2). The reactor connects to a continuous gas analyser.



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

The process parameters temperature, feed gas stream, H₂:N₂ ratio, sample weight and particle size of the iron ore are investigated by DoE (Design of Experiments) created with the commercial DoE-software MODDE® Pro 12, Umetrics. DoE is able to reduce the number of experiments, to consider the influence of parameter interactions and to include a statistical evaluation. The experimental series includes a screening series and an optimization series of the parameters.

Research progress

During the reduction carbon dioxide, carbon monoxide and small amounts of methane are produced (Figure 3).

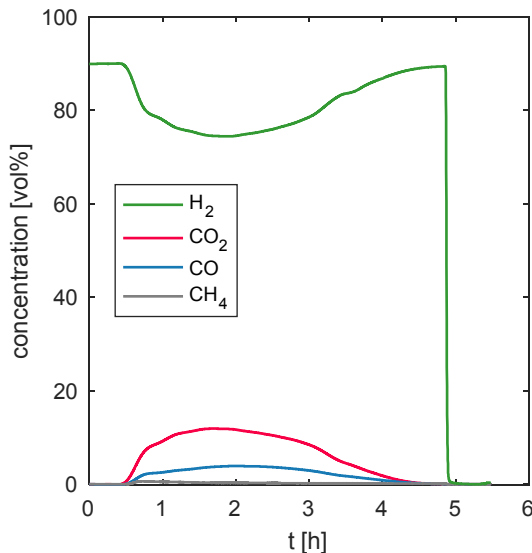


Fig. 3: Composition of the gas product during the experiment with 420°C, H₂:N₂=9:1, particle size 1–2 mm and 132 g iron ore

CO₂ is formed during the formation of wüstite (FeO). CO is formed as a byproduct during the reaction of iron carbonate to elemental iron.

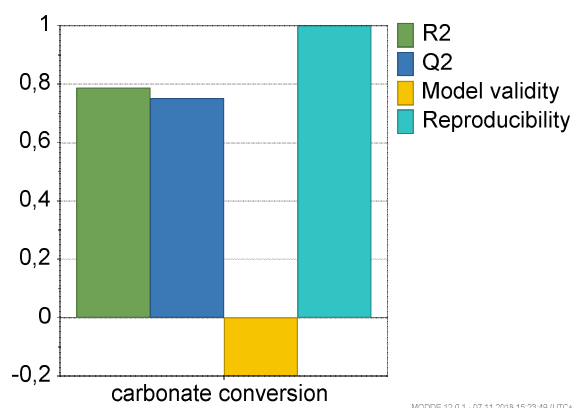
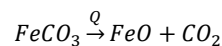


Fig. 4: Statistical results of the model of DoE in MODDE © Pro 12 for Screening experiments for the iron carbonate conversion

The parameters which impact the reduction the most were identified through DoE and a model for the prediction of an optimum was found, figure 4.

Temperature has a major impact on the reduction, in regards to the reaction time and the solid product.

Conclusion

The direct iron carbonate reduction is a promising technology to reduce the CO₂ emissions in the iron carbonate beneficiation process. By optimizing the process parameters an industrial application shall be made possible. The temperature has a major influence regarding the solid product selectivity.

Acknowledgment

The project 'Direkt Reduktion' is funded by the 'österreichischen Forschungsförderungsgesellschaft' (FFG). The authors wish to thank Dr. A. Stadtschnitzer (VA Erzberg GmbH, Austria) and Dr. mont 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 (CO₂) 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.
- [3] VA Erzberg, „vaerzberg Geologie,“ 07 11 2018. [Online]. Available: <http://www.vaerzberg.at/erzproduktion/geologie.html>.

Questions and remarks to:

Astrid Loder

Tel.: +43 (316) 873 - 4974

E-mail: astrid.loder@tugraz.at

Process Intensification of biobased processes by Reactive Separation

Daniela Painer, Susanne Lux, Matthäus Siebenhofer

Motivation

The shift from fossil to biobased resources is inevitable. Due to limited fossil resources but also due to the tremendous environmental impact of fossil resources, replacement of fossil resources by biobased resources is highly recommended. To satisfy the increasing demand of raw material for biobased processes, complete usage of biomass is necessary. The pulping industry for example, one of the oldest and largest biorefineries, focuses nearly exclusively on the production of fibers. All side products like lignin, carboxylic acids, hydroxycarboxylic acids etc. are only used for energy production. The side products are of low market value, show up in multicomponent mixtures and/or at low concentration in process effluents, rendering the isolation and further usage inefficient and costly.

Reactive separation methods offer new opportunities to intensify existing processes with efficient side product recovery. For the example of acetic acid and formic acid recovery from wastewater, a reactive separation concept is proposed. In conventional processes, reactive extraction may be deployed with problems in solvent regeneration via distillation. High efficiency of solvent regeneration is needed for an efficient extraction step. To suffice this process needs solvent regeneration via reactive distillation with methanol as esterifying agent was investigated. The carboxylic acids in the solvent are esterified and the low boiling methyl esters are continuously withdrawn from the reaction broth by distillation, shifting the equilibrium composition towards complete conversion. Both unit operations, esterification as well as distillation prefer elevated temperature. The process concept is shown in Fig. 1 with an additional distillation step for acetic acid removal in case of incomplete chemical conversion and isolation.

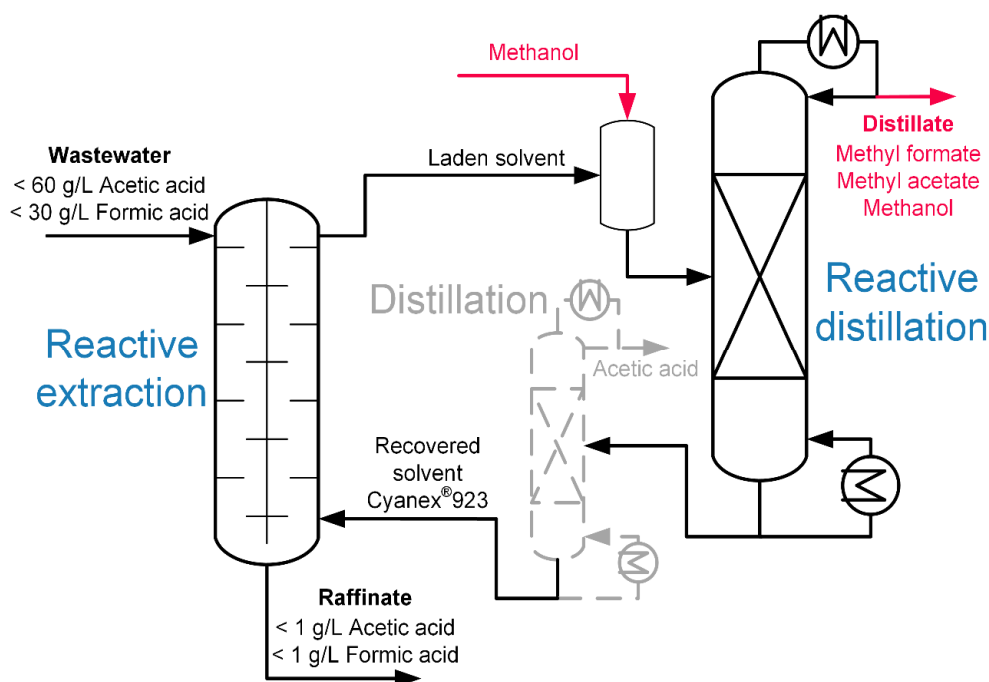


Fig. 1: Reactive separation concept for acid recovery from wastewater. Combination of reactive extraction for acid removal from the effluent and reactive distillation for solvent regeneration

Reactive distillation results

Esterification without catalysis is too slow for industrial application. Therefore, homogeneous and heterogeneous catalysts were tested in reactive distillation. In Fig. 2 the methyl ester yield in the distillate of non-catalytic, homogeneously catalyzed and heterogeneously catalyzed reactive distillation is compared. For methyl formate only minor influence is observed but for methyl acetate the yield was highly improved from 19% in non catalytic separation to 92% in catalyzed reactive distillation for solvent regeneration. Application of homogeneous (4-dodecylbenzenesulfonic acid, DBSA) or heterogeneous (Amberlite IR-120) catalysis leads to similar results, with Amberlite IR-120 showing slightly faster reaction compared to DBSA. Additionally the heteroge-

neous catalyst can remain in the reactive distillation column avoiding a negative influence on the reactive extraction step while the homogeneous catalyst may circulate in the solvent phase between extraction and distillation step, although slightly affecting the extraction equilibrium of the acids [1].

Summary

Reactive separations enable new process routes in complete usage of pulping effluents rendering efficient side product recovery possible. Combining reactive extraction and reactive distillation for solvent regeneration accomplishes a capable process concept for carboxylic acid recovery from wastewater. Strongly acidic catalysts are needed for high conversion in reactive distillation yielding in high degree of solvent regeneration.

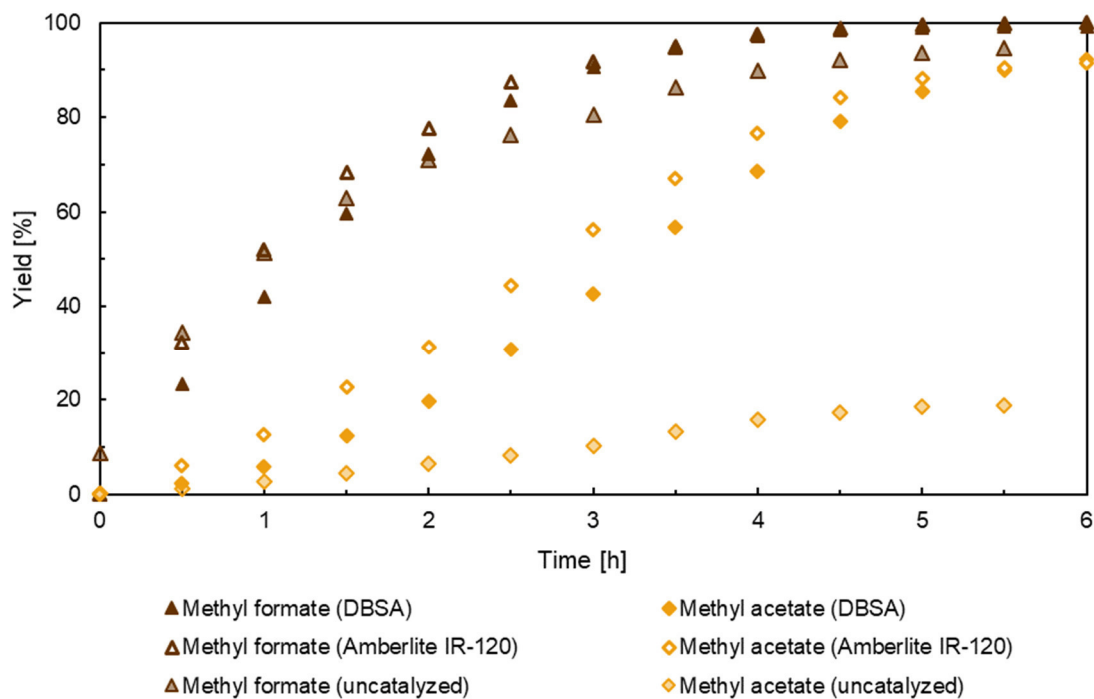


Fig. 2: Yield of methyl formate and methyl acetate in the distillate of batch reactive distillation; Comparison of non catalyzed [1], homogeneously (4-DBSA) [1] and heterogeneously (Amberlite®IR-120) catalyzed reactive distillation for solvent regeneration with methanol. Solvent: 70 w% Cyanex®923 in *n*-undecane; Solvent load: 87 g kg⁻¹ formic acid, 154 g kg⁻¹ acetic acid; Molar ratio of methanol:both acids=2:1; Catalysts: 5 w% 4-dodecylbenzenesulfonic acid (DBSA, 32 mEq), 3.6 w% Amberlite®IR-120 (32 mEq)

Literatur

[1] Painer, D., Lux, S., Almer, C., Daniel, S., & Siebenhofer, M. (2018) Sep. Sci. Technol. 53 (12), 1957-1965.

Fragen und Anregungen bitte an:

Daniela Painer

Tel.: +43 (316) 873 - 7474

E-Mail: d.painer@tugraz.at

Utilization of Low Molecular Weight Carboxylic Acids from Dilute Aqueous Feed

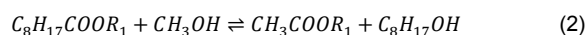
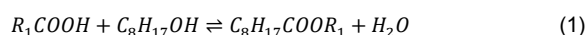
Andreas Toth, Susanne Lux, Matthäus Siebenhofer

Introduction

Utilization of low molecular weight carboxylic acids originating in processing of lignocellulosic biomass is a challenging task. These valuable constituents are still incinerated or subject of wastewater treatment. To counteract the lack of feasible economic isolation technologies efficient separation technologies need to be developed. Highlighted by Talnikar et al. [1], reactive separation processes are very suitable problem solver approaches. The combination of liquid-liquid extraction with chemical conversion may provide such a sustainable process concept. Chemical conversion of low molecular weight carboxylic acids in biphasic, emulsified regimes by esterification is the first step in process development to shift the problem from synthesis barrier level to interpolation barrier level. Together with solvent regeneration and product isolation via transesterification in reactive distillation tackles the specific needs of highly dilute aqueous feed. Experimental investigation based on design of experiments provided insight into process parameter interaction and impact on process performance. [2]

Process Concept

A scheme of the proposed process concept is depicted in figure 1. Following the reaction equation given in equation (1), the carboxylic acids are converted to their octyl ester in the first step. This conversion decreases the water solubility of carboxylic acids by orders of magnitude, allowing to overcome reaction and extraction restrictions.



To enable regeneration of the solvent/reactant 1-octanol, transesterification (equation 2) with a low molecular weight alcohol (e.g., methanol) provides favorable vapor-liquid-equilibrium conditions for distillative separation.

Both steps are catalyzed with the surface-active catalyst 4-dodecylbenzenesulfonic acid (4DBSA), which was reported highly suitable for (trans-) esterification by Hagen et al. [3]. Emulsification due to the surfactant properties of 4DBSA is a crucial necessity in the first step of the proposed concept.

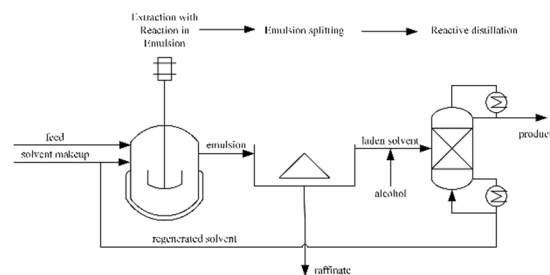


Fig. 1: Proposed process concept utilizing esterification, emulsification and transesterification in a combined reactive extraction/reactive distillation process.

Reactive Extraction

Performance of the isolation step via esterification in an emulsified regime was investigated [2]. The outcome revealed high potential of the concept for the low molecular weight carboxylic acids formic acid, acetic acid, propionic acid and butyric acid. Process conditions at ambient pressure and moderate temperature allow safe operation with proper conversion and separation efficiency. Complete isolation of low molecular weight carboxylic acids may be exploited by multistage operation.

For single stage operation at a temperature of 60°C, a catalyst load of 0.06 eq. mol_{acid}⁻¹, a phase ratio of 2 and a stoichiometric ratio of 1-octanol to carboxylic acid of 1.5 the separation efficiencies are listed in table 1 [2]. A

linear trend is observed for separation efficiencies of acetic acid, propionic acid and butyric acid. Formic acid exceeds the expected value as a consequence of its high reactivity and the thus higher conversion to octyl formate.

carboxylic acid	separation efficiency
formic acid	61.4 %
acetic acid	57.5 %
propionic acid	70.5 %
butyric acid	79.6 %

Tab.1: Separation efficiencies for investigated carboxylic acids as reported by Toth et al. [2]

Reactive Distillation

In a proof of concept, a low molecular weight alcohol (methanol or ethanol) was admixed to the solvent phase laden with octyl acetate to determine the kinetics of transesterification. The concentration profiles of octyl acetate (OcAc), methyl acetate (MeAc) and ethyl acetate (EtAc) for two different stoichiometric ratios are shown in figure 2. The reaction temperature was chosen according to the boiling point of the low molecular weight esters with 50°C for methanol (MeOH) and 70°C for ethanol (EtOH). The stoichiometric ratio was set to 0.8 and 1.5 for each alcohol.

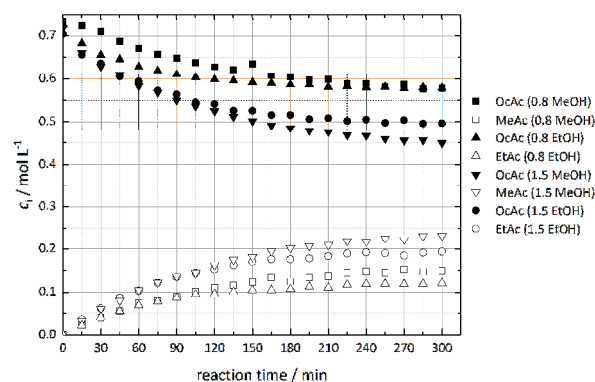


Fig. 2: Concentration profile of octyl acetate, methyl acetate and ethyl acetate during transesterification with methanol and ethanol; stoichiometric ratio: 0.8 and 1.5. Reaction temperature 50°C for methanol and 70°C for ethanol.

The 1.5-fold excess of low molecular weight alcohol yielded a conversion of 38% for methanol and 30% for ethanol. The huge boiling point difference achieved by transesterification of octyl acetate with methanol is very

beneficial for distillative separation. Transferred to a batch reactive distillation column with 1.5-fold excess of methanol, an octyl acetate conversion of 60% was achieved.

Summary

The proposed concept for economic isolation of low molecular weight carboxylic acids from dilute aqueous feed has proven applicable for formic acid, acetic acid, propionic acid and butyric acid. Chemical conversion by esterification and transesterification for isolation and solvent regeneration, respectively, is a crucial necessity. Separation efficiencies up to 80% in the first step (reactive extraction in emulsion) are possible. Solvent regeneration via reactive distillation and transesterification is feasible due to favorable vapor-liquid-equilibria between high and low boiling components. Thus, 60% conversion was achieved in a proof of concept by transesterification with methanol in batch reactive distillation.

References

- [1] Talnikar, V. D., Mahajan, Y. S., 2014: Recovery of acids from dilute streams : A review of process technologies. Korean J. Chem Eng. 31 (10), 1720–1731. DOI: 10.1007/s11814-014-0202-4
- [2] Toth, A., Lux, S., Painer, D., Siebenhofer, M., 2018: Intensification of esterification through emulsification: isolation of dilute molecular weight carboxylic acids. React. Chem. Eng. 89 (161), DOI: 10.1039/CRE00194D.
- [3] Hagen, J., Henke, D.-I. D., 2009: Katalysatorscreening bei der Umesterung von Fetten und Ölen mit Ethanol. Chem. Ing. Tech. 81 (9), 1429–1438. DOI: 10.1002/cite.200800186

Questions and Remarks to:

Andreas Toth

Tel.: +43 (316) 873 - 7460

E-Mail: andreas.toth@tugraz.at

Residence time distribution and drop size distribution in Taylor-Couette Disc Contactors

Annika Grafschafter, Matthäus Siebenhofer

Introduction

The Taylor-Couette Disc Contactor (TCDC) is an agitated liquid-liquid extractor with simple construction of internals. Design specifications result from CFD-simulations with the initial aim of optimizing and simplifying the internals of the Rotating Disc Contactor (RDC). Experimentally validated CFD-simulations predicted a geometric optimum for formation of stable toroidal vortices when stator rings were removed and the shaft diameter as well as rotor disc diameter were increased [1, 2]. Due to missing stator rings, crud accumulation and fouling along the mixing zone of the column is avoided and thus operation under harsh operation conditions is feasible. For successful scale up an design of extraction columns, comprehensive knowledge of hydraulics is needed. The present work summarizes the results of experimental analysis of residence time distribution (RTD) and drop size distribution (DSD) of TCDC extractors in 0.1 m and 0.3 m diameter scale.

Experimental

ShellSol T (SST)/Water was used as test system for all experiments with SST as dispersed phase and water as continuous phase in counter-current operation. Equal power per volume (P/V) in both columns provides comparability of operation conditions and energy input. The volumetric flow rate of the dispersed and the continuous phase were adjusted to ensure same total hydraulic load B ($\text{m}^3 \text{m}^{-2} \text{h}^{-1}$) related to the free cross sectional area of the column. DSD was monitored with an optical probe (SOPAT GmbH) at varying rate of rotation and hydraulic load. For evaluating DSD, measurements were performed at three levels along the column height, as shown in Figure 1. RTD was determined with a pulse signal by injecting 2 ml of saturated sodium chloride solution into the feed of the continuous phase at the top of

the column. At four positions along the active column height, the electric conductivity was recorded via non-commercial probes with sensor tip diameters of 0.6 mm. Due to the small tip diameter the non-commercial sensors have a minimum invasive impact on the flow pattern. The resulting RTD curves were interpreted with the tank-in-series model according to Levenspiel [3]. The number of corresponding vessels in series (N) was calculated from the maximum of the dimensionless exit age distribution E_{θ} [7]:

$$E_{\theta, \max} = \frac{N^{*}(N-1)^{N-1}}{(N-1)!} * e^{-(N-1)} \quad (1)$$

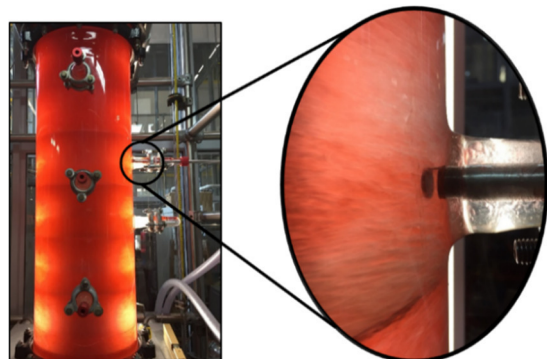


Fig. 1: TCDC extraction column with an optical probe

Results and discussion

The number of vessels N in series for single phase and two phase operation is displayed in Figure 2. Comparability between both operation modes is achieved by plotting N over the rate of rotation and the hydraulic load of the continuous phase B_c . With increasing hydraulic load, the number of vessels N increases. Higher rate of rotation leads to decreasing N due to higher axial dispersion. Compared to single phase operation, two phase operation engenders higher N and the effect of increasing hydraulic load is intensified. A maximum number of vessels N for single phase and two phase operation is obtained at $B_c = 40 \text{ m}^3 \text{m}^{-2} \text{h}^{-1}$ ($B_c = 20 \text{ m}^3 \text{m}^{-2} \text{h}^{-1}$ in single phase operation) and $n = 250 \text{ rpm}$.

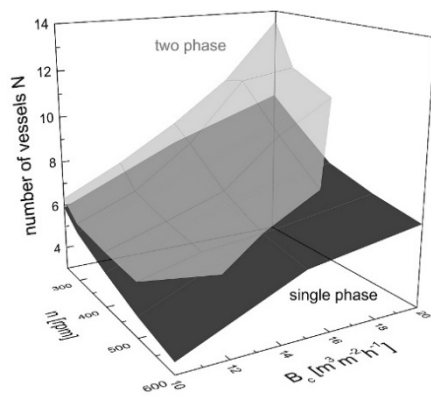


Fig. 2: Number of vessels N for single phase and two phase operation in the TCDC100 [4]

For comparison the number of vessels N for the TCDC100 and TCDC300 is displayed in Figure 3. RTD in the TCDC300 shows a less distinct dependency on varying hydraulic load and rate of rotation in the TCDC100.

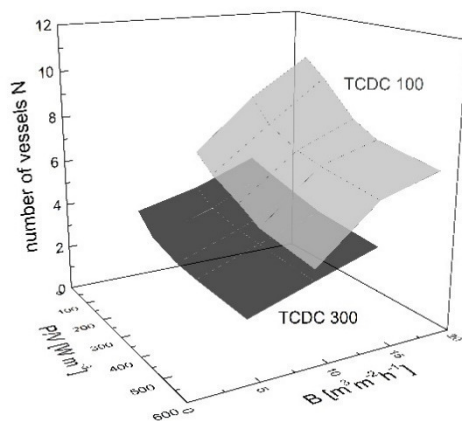


Fig. 3: Number of vessels N at varying hydraulic load and rate of rotation for the TCDC100 and TCDC300 [4]

The influence of hydraulic load on DSD in the TCDC100 is nearly negligible [2]. The minor effect of hydraulic load on DSD was confirmed for the TCDC300. As shown in Figure 4 the Sauter mean diameter (d_{32}) is independent of varying hydraulic load at fixed rate of rotation. Figure 4 also indicates a transition of the flow regime with increasing rate of rotation for the TCDC300. After exceeding a critical rate of rotation $n_{crit.} = 242$ rpm, significant droplet breakup is observed. Droplet breakup is induced when the force exerted by motion in the continuous phase overcomes the cohesive forces due to interfacial tension and dispersed phase viscosity. These operation conditions can be assumed as fully developed operation range. The operation range below

242 rpm is subcritical and may be classified as on-set operation range.

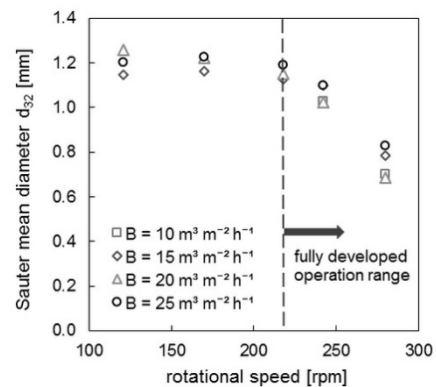


Fig. 3: Number of vessels N at varying hydraulic load and rate of rotation for the TCDC300 [4]

Conclusion

The TCDC as evolved from CFD optimization of the RDC, has proven applicable for liquid-liquid extraction. Since TCDC design does not need stator rings, it is expected to be less endangered of crud accumulation and fouling than conventional agitated extraction columns. Hydraulics and operation performance of the TCDC have been evaluated for 0.1 m and 0.3 m diameter scales. Therefore, the effect of the hydraulic load and rate of rotation on RTD and DSD was investigated. Analysis of the RTD of the continuous phase suggests application of the tank-in-series model. For given rate of rotation, the number of N increases with increasing hydraulic load. A reversed trend was observed for fixed hydraulic load and varying rate of rotation. Increasing rate of rotation will cause a drop of the number of N. The minimum rate of rotation necessary for fully developed operation range can be predicted for specified operation conditions.

References

- [1] E. Aksamija, C. Weinländer, R. Sarzio, M. Siebenhofer, *Sep. Sci. Technol.* **2015**, 50 (18), 2844–2852. DOI: 10.1080/01496395.2015.1085406
- [2] E. Aksamija, *Ph.D. Thesis*, Graz University of Technology **2015**.
- [3] O. Levenspiel, *Chemical Reaction Engineering*, Wiley, **1999**.
- [4] A. Graftschafter, G. Rudelstorfer, M. Siebenhofer, *Chemie-Ingenieur-Technik* **2018**, DOI: 10.1002/cite.201800031

Surrogate als Basis der Motorenentwicklung

Thomas Wallek

Reduktion der Vielfalt auf das Wesentliche

Surrogate sind Ersatzmischungen, bestehend aus einigen wenigen chemischen Komponenten, welche die physikalisch-chemischen Eigenschaften realer Gemische aus mehreren hundert oder tausend Komponenten möglichst gut nachbilden sollen. Insbesondere im Bereich der Motorenentwicklung stellen Treibstoff-Surrogate einen unverzichtbaren Baustein zur Simulation und experimentellen Validierung der innermotorischen Verbrennung und Abgasbehandlung dar.

Kommerzielle Kraftstoffe bestehen aus hunderten chemischen Komponenten und unterliegen zudem deutlichen Schwankungsbreiten in der Zusammensetzung, abhängig vom zugrundeliegenden Rohöl, der Raffinierung und den verwendeten Additiven, die regional und saisonal unterschiedlich sein können. Zudem sollen Motoren weltweit mit Kraftstoffen verschiedenster Normen funktionieren und ihre Leistungs- und Abgaswerte einhalten. Eine weitere Herausforderung besteht darin, Motoren auch heute schon für den weiteren Zusatz biogener Komponenten fit zu machen und deren Auswirkungen auf Leistungs- und Abgaswerte abzuschätzen.

Daher war es Ziel der Arbeitsgruppe, Treibstoffsurrogate mit reproduzierbaren Eigenschaften zu entwickeln, die aus lediglich 5-10 chemischen Komponenten bestehen, für die verlässliche Stoffdaten und geeignete Reaktionsmechanismen verfügbar sind und die somit in Computersimulationen und auf Prüfständen zur Abbildung des realen Verhaltens kommerzieller Kraftstoffe eingesetzt werden können.

Von Rohöl über Diesel zu Benzin

Ausgehend von Rohöl wurde ein Algorithmus zur Optimierung von Surrogaten entwickelt, der schrittweise auf Diesel erweitert wurde und aktuell für Benzin adaptiert

wird [1-3]. Der Algorithmus basiert auf einer Optimierungsrechnung, bei der als Zielgrößen die Eigenschaften des realen Kraftstoffs vorgegeben werden und die Zusammensetzung des Surrogats zur optimalen Übereinstimmung mit diesen Eigenschaften entsprechend angepasst wird. Solche Zielgrößen beinhalten zum einen thermophysikalische Eigenschaften wie Dichte, Viskosität und Siedekurve, die für Spraybildung und weitere physikalische Vorgänge im Motor wichtig sind. Zum anderen werden Stoffwerte zur Charakterisierung von Zündverhalten und Verbrennung berücksichtigt, wie etwa Octan- oder Cetanzahl, Kohlenstoff-zu-Wasserstoff-Verhältnis, Heizwert oder Rußindex. Abbildung 1 veranschaulicht den „Zielbereich“ für zwei solcher Kriterien, der vom Surrogat zu treffen ist, zusammen mit den Beiträgen der verwendeten Stoffgruppen.

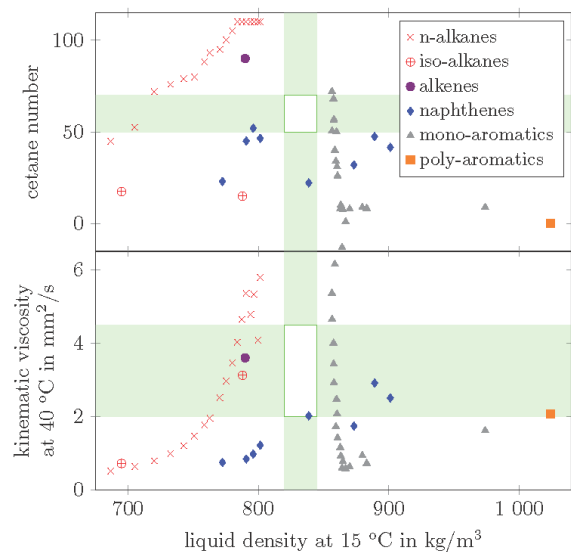


Abb. 1: Dichte, kinematische Viskosität und Cetanzahl typischer Kraftstoffkomponenten zusammen mit den zugehörigen Spezifikationen für Europäische Dieselmotoren (grün hinterlegt). Der mittlere Bereich kennzeichnet den für beide Eigenschaften nach DIN EN 590 simultan zu erfüllenden Bereich. Dieser muss vom resultierenden Surrogat getroffen werden.

Dem Algorithmus steht eine Auswahl von etwa 100 typischen chemischen Stoffen in Form einer Datenbank zur Verfügung, aus dem die Surrogate zusammengesetzt werden können. Durch enge Zusammenarbeit mit

der Dortmund Data Bank, der weltweit größten Faktendatenbank für thermophysikalische Stoffdaten, stehen umfangreiche Messdaten sowie Abschätzmethoden zur Bestimmung der erforderlichen Reinstoffeigenschaften zur Verfügung.

Da die Optimierungsrechnungen verschiedene Strategien zur Bestimmung der optimalen Zusammensetzung einschlagen können, wie beispielsweise „F to Enter“ & „F to Remove“, kann der Rechenaufwand für die Optimierung eines Surrogats bis zu einem Monat betragen, weshalb für diese Rechnungen ein Linux-Cluster des Zentralen Informatikdienstes der TU Graz genutzt wird.

Besonderer Wert wurde auf die Beurteilung der Zugabe von Additiven und biogenen Komponenten zu fossilen Kraftstoffen gelegt. Bei Ottokraftstoffen sind dies verschiedene Alkohole und Ether, bei Diesel werden Fettsäureester in Form von Biodiesel zugegeben. Die Vorausberechnung der Auswirkungen solcher Zugaben mit Hilfe des Algorithmus ist die Grundlage zur weiteren Steigerung biogener Anteile in kommerziellen Treibstoffen und zur Entwicklung so genannter „Design Fuels“. Am Beispiel von Biodiesel veranschaulicht Abbildung 2 die Änderung der Siedekurve mit steigendem Biodieselanteil von 0% bis 20%.

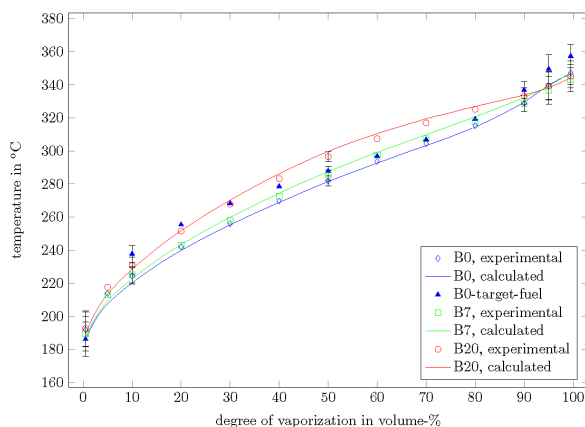


Abb. 2: Siedekurve ASTM D86 (äquivalent zu EN ISO 3405) von Dieselmotorkraftstoff mit 0% (B0), 7% (B7) und 20% (B20) Biodieselanteil, zur Veranschaulichung der Änderung des Siedeverhaltens mit zunehmender Biodiesel-Beimischung.

Ein Ausblick zur Weiterentwicklung der Methode ist die direkte Koppelung von CFD (computational fluid dynamics) Software zur Simulation des Sprayverhaltens (Abbildung 3) sowie Reaktionskinetik-Software zur Simulation des Zündverhaltens mit dem Surrogat-Algorithmus, um dessen Vorhersagegenauigkeit weiter zu

steigern. Dies wurde in einem ersten interdisziplinären Projekt zusammen mit dem Kompetenzzentrum Virtual Vehicle (VIF) bereits erstmals umgesetzt.

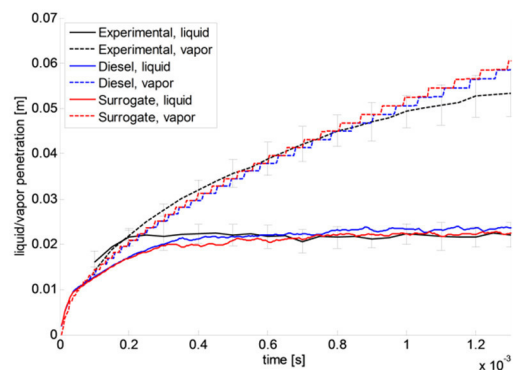


Abb. 3: Ergebnisse von CFD-Simulationen für das Dampf-flüssig-Sprayverhalten eines Dieselmotorkraftstoffs.

Literatur

- [1] Reiter, A. M.; Wallek, T.; Mair-Zelenka, P.; Siebenhofer, M.; Reinberger, P. Characterization of Crude Oil by Real Component Surrogates. *Energy & Fuels* 2014, 28(8), 5565-5571. DOI: 10.1021/ef501415k
- [2] Reiter, A. M.; Wallek, T.; Pfennig, A.; Zeymer, M. Surrogate Generation and Evaluation for Diesel Fuel. *Energy & Fuels* 2015, 29, 4181-4192. DOI: 10.1021/acs.energyfuels.5b00422
- [3] Reiter, A. M.; Schubert, N.; Pfennig, A.; Wallek, T. Surrogate Generation and Evaluation for Biodiesel and Its Mixtures with Fossil Diesel. *Energy & Fuels* 2017, 31, 6173-6181. DOI: 10.1021/acs.energyfuels.7b00603

Fragen und Anregungen bitte an:
 Thomas Wallek
 Tel.: +43 (316) 873 - 7966
 E-Mail: thomas.wallek@tugraz.at

Multikriterielle Anlagenoptimierung mit stochastischen Optimieralgorithmen

Fabian Zapf

Motivation

Das heutige globalisierte und stark kompetitive Weltwirtschaftssystem bringt alle Branchen der Prozessindustrie unter einen ständigen Optimierungsdruck. Diese Optimierungen erfolgen auf mehreren Ebenen, wobei die anspruchsvollste davon die Optimierung gesamtheitlicher verfahrenstechnischer Prozesse selbst darstellt, da hier am meisten Know-how und Erfahrung gefragt sind. Diese Optimierungen erfolgen während der Planung von Produktionsanlagen, während deren Betrieb, sowie vorbereitend für Investitionen in und Revisionsarbeiten an Produktionsanlagen. Mit Hilfe einer Vielzahl von verfügbaren Prozesssimulatoren, welche u.a. Stofftransport-, thermodynamische und reaktionskinetische Vorgänge berechnen können, ist es möglich einzelne Anlagen, deren Verbunde sowie ganze Produktionsstätten zu berechnen. Ziel dabei ist es immer, eine Anlagenfahrweise zu finden, die in Hinblick auf Wirtschaftlichkeit, Betriebssicherheit, Umweltbelastung und soziale Aspekte optimal ist. Da sich all diese Aspekte oft gegenseitig negativ beeinflussen, führt dies zu einem multikriteriellen Optimierungsproblem, auch Pareto-Optimierung genannt. Abbildung 1 zeigt ein typisches Pareto-Optimierungsproblem bei der Auslegung von verfahrenstechnischen Anlagen.

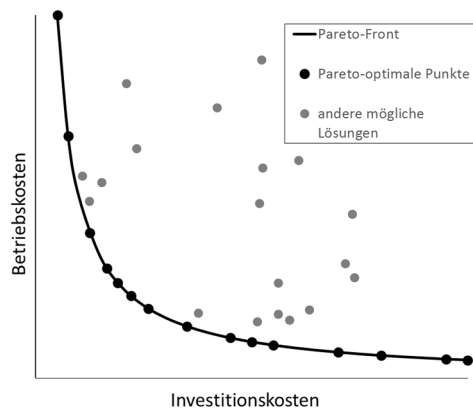


Abb. 1: Pareto-Optimierungsproblem bei der Investitionsplanung

Optimieralgorithmen

Ein einfacher Ansatz zur Optimierung von multikriteriellen Problemen durch Gewichtung der Kriterien untereinander reduziert das multikriterielle Problem auf ein einkriterielles. Durch Variation der Gewichtungen lässt sich so der Verlauf der Pareto-Front des multikriteriellen Problems generieren. [1]

Die zugrundeliegenden Optimieralgorithmen lassen sich dabei in zwei große Untergruppen einteilen: stochastische und deterministische Algorithmen. Deterministische Algorithmen benötigen zur Optimierung die Ableitungen des Problems bzw. die expliziten mathematischen Funktionen und konvergieren daher relativ schnell. Sie besitzen den Nachteil, dass sie bei nicht-konvexen Problemen oft nur ein lokales Minimum auffinden und damit das globale Minimum nicht zuverlässig finden (siehe Abbildung 2).

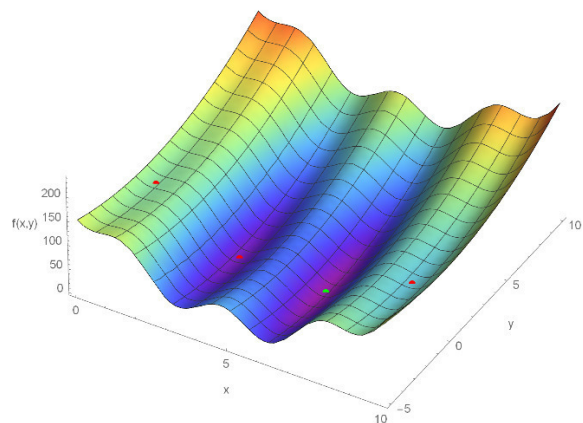


Abb. 2: Lokale (rot) Minima und globales Minimum (grün) eines einkriteriellen Optimierungsproblems mit zwei variablen Größen

Stochastische Algorithmen arbeiten alleine mit den Eingangsgrößen und daraus erhaltenen Ausgangsgrößen des Systems. Diese sind geeignet, auch nicht-triviale Lösungen des Optimierungsproblems zu finden.

Um den geeignetsten Optimieralgorithmus für verfahrenstechnische Problemstellungen zu identifizieren, werden verschiedene Optimieralgorithmen in Wolfram Mathematica implementiert, mit einem Prozesssimulator gekoppelt und auf ihre Eignung getestet. Eine Auswahl an infrage kommenden stochastischen Optimieralgorithmen sind [2]:

- Simulated annealing
- Genetische and evolutionäre Algorithmen
- Tabu search
- Particle swarm optimization
- Ant colony optimization

Genetische Optimieralgorithmen sind in den Naturwissenschaften von zunehmender Bedeutung, da sie nach dem Prinzip des natürlichen Evolutionsprozesses arbeiten, welcher auf praktisch jedes Problem anwendbar ist. Auf Grund dessen wird auf sie in diesem Projekt besonderes Augenmerk gelegt. Im Falle der Optimierung von verfahrenstechnischen Anlagen wird ein Prozessparameter-Satz als ein Individuum betrachtet. Die ersten Individuen mutieren, womit genetische Vielfalt entsteht und diese neuen Individuen wiederum miteinander rekombinieren können. Der Umstand, dass sich in der Natur die stärkeren Organismen durchsetzen, wird in der Optimierungsrechnung durch Bewertung jedes Individuums mit einer Fitnessfunktion und dem Aussortieren der schwächeren Individuen realisiert. In Abbildung 3 ist das Funktionsprinzip eines einfachen genetischen Optimieralgorithmus dargestellt.

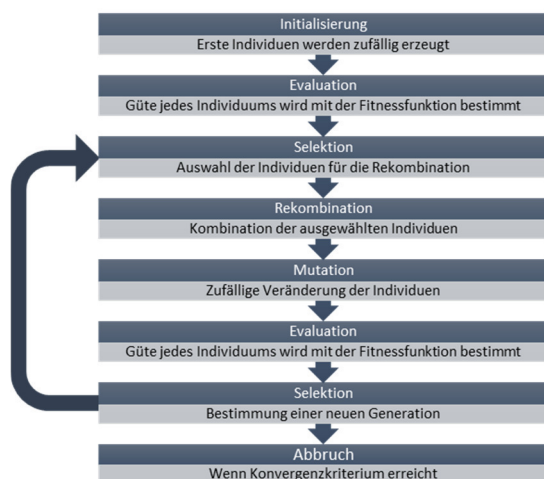


Abb. 3: Funktionsprinzip eines genetischen Optimieralgorithmus

Integration in einen Prozesssimulator

Kommerzielle Prozesssimulatoren wie Aspen Plus, Aspen HYSYS oder KBC PetroSIM enthalten standardmäßig Optimieralgorithmen. Diese zielen darauf ab, bestimmte Prozessvariablen mit Hilfe einer Kostenfunktion zu gewichten und bestimmte Prozessparameter so zu verändern, dass diese Kostenfunktion minimal wird. Ihnen gemein ist, dass sie einen deterministischen Optimieralgorithmus verwenden, welcher nicht immer die optimale Lösung findet.

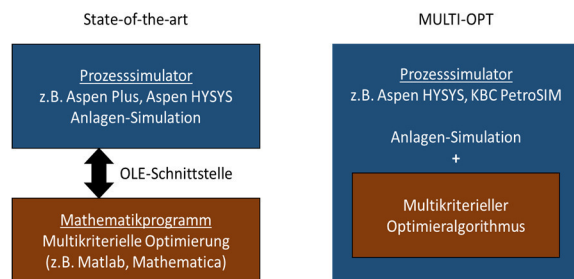


Abb. 3: Stufen der Integration des Optimieralgorithmus

Das Projekt hat zum Ziel, den als final am besten geeigneten multikriteriellen Optimieralgorithmus direkt in einen Prozesssimulator zu integrieren, wodurch eine breite praktische Anwendbarkeit realisiert wird. Diese Ausbaustufe an Integration in einen Prozesssimulator ist bisher einzigartig und stellt, wie in Abbildung 4 illustriert, einen wesentlichen Fortschritt gegenüber dem Stand der Technik dar.

Literatur

- [1] Rangaiah, G.P., 2017: Multi-objective optimization, Techniques and applications in chemical engineering, World Scientific, Singapore S. 9
- [2] Leyffer, S., 2013: Mixed-Integer Nonlinear Optimization: Applications, Algorithms, and Computation VI, Studienarbeit, Université catholique de Louvain S.5

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

Hochreiner Wasserstoff aus ICVT-Laboranlage

Sebastian Bock, Robert Zacharias

Herausforderungen der Wasserstoffproduktion?

Wasserstoff wird schon seit einiger Zeit als aussichtreicher Energieträger in einem emissionsfreien Energiesystem vorgeschlagen. Dabei hängt die Umweltbilanz und CO₂-Neutralität aber besonders von der Herstellungsmethode und dem benötigten Transport zur Wasserstofftankstelle ab. Derzeit werden über 95% des Weltwasserstoffbedarfs aus fossilen Energieträgern hergestellt, wodurch sich nur wenige Vorteile gegenüber anderen Energieträgern bieten (Strom, fossile Treibstoffe). Wenn man bedenkt, dass es in Österreich auch erst vier Wasserstofftankstellen gibt denkt man erst gar nicht darüber nach sich ernsthaft ein Brennstoffzellenfahrzeug wie den Toyota Mirai anzuschaffen (der mit ca. 80.000€ auch noch sehr kostspielig wäre).

Aber auch der Transport des Wasserstoffs zu den Tankstellen wäre eine Herausforderung: In einem typischen Tube-Trailer können selbst in neuesten Systemen nur 500kg H₂ transportiert werden. Das entspricht einer Reichweite von ca. 50.000 km für FCEV-PKWs. Mit einer typischen Tankwagenfüllung mit ca. 20.000-40.000 L Treibstoff ist eine Reichweite von ca. 430.000 km möglich (30.000 L, 7 L pro 100 km). Das würde bedeuten, dass zehn Tankwagen nötig wären, um dieselbe Nachfrage decken zu können.

Dezentrale Produktion als Lösung?

Aus obengenannten Gründen sind Technologien zur dezentralen Wasserstoffversorgung derzeit sehr gefragt und werden von vielen Forschungsgruppen in verschiedene Richtungen entwickelt. Eine Methode ist der Scale-Down großindustrieller Steam-Reformer Anlagen zur Wasserstoffproduktion aus Erdgas, was sich jedoch aufgrund der schlechten Skalierbarkeit als schwierig er-

weist. Die dezentrale Elektrolyse hingegen ist eine aussichtreiche und weit entwickelte Technologie, welche allerdings große Mengen an Strom benötigt. Chemical Looping hingegen bietet die Möglichkeit ein breites Spektrum an Kohlenwasserstoffen in Wasserstoff umzusetzen: Dabei können übergangsweise fossile KWs verwendet werden, um den Umstieg auf erneuerbare Rohstoffe wie Biogas oder vergaste Biomasse zu erleichtern. Der eindeutige Vorteil des am ICVT vorgeschlagenen Reformer Steam Iron Process (RESC) als Fixed-Bed Chemical Looping Technologie ist die sehr gute Skalierbarkeit in kleinen Leistungseinheiten. Durch die Ausführung als Festbettreaktor kann die Anlage flexibel über die Reaktoranzahl an die Anforderungen (Wasserstoffoutput, Speicherkapazität) angepasst werden.

Inbetriebnahme und Testserien im Technikumsreaktor



Abb. 1: Arbeiten an der RESC-Laboranlage

In den vergangenen beiden Jahren wurde das Laborsystem aufgebaut und in Betrieb genommen. Anschließend wurden mehrere Versuchsreihen zu folgenden Themen durchgeführt:

- Erhöhung des Prozesswirkungsgrades durch Anpassung der Systemparameter

- Untersuchung des thermischen Verhaltens der exothermen und endothermen Reaktionen im Fixed-Bed Reaktor
- Untersuchungen der Zyklenstabilität der eingesetzten Metalloxide im Fixed-Bed und Einfluss der thermischen und mechanischen Belastungen
- Verbesserung der erreichbaren Wasserstoffqualität für den Einsatz in Niedertemperaturbrennstoffzellen

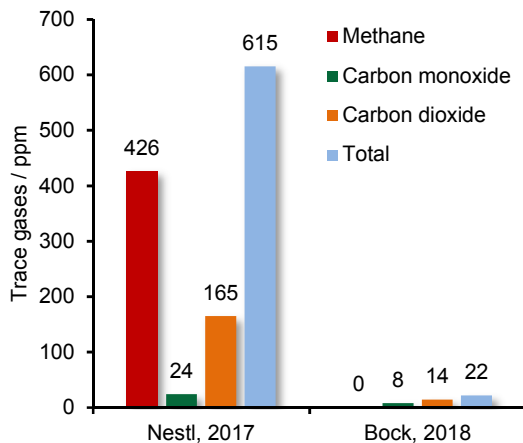


Abb. 2: Wasserstoff-Produktgasqualität im RESC Laborsystem

Aus den Ergebnissen der Versuche [1] sowie der Vorversuche von Stephan Nestl und Gernot Voitic [2] entstanden im Jahr 2018 zwei Publikationen, in welchen die Eignung des RESC-Prozesses für die Wasserstoffproduktion evaluiert wird.

Durch mehrere entscheidende Verbesserungen des Versuchslayouts konnten kritische Aspekte wie Kohlenstoffbildung während der Reduktion des Metalloxids vermieden werden und somit die Grundlage für eine hohe Produktgasqualität gelegt werden (siehe Abb. 2). Parallel laufende Langzeittests in einem kleineren Teststand ermöglichen die permanente Verbesserung der eingesetzten Materialien. Das ist besonders entscheidend für spätere Anwendungen, da die eingesetzten Materialien bauartbedingt nicht im Betrieb gewechselt werden, weshalb eine hohe Stabilität Voraussetzung für den wirtschaftlichen Einsatz ist.

Was passiert in der Zukunft?

Wasserstoff soll zukünftig mit diesem Verfahren aus erneuerbaren Primärenergiequellen erzeugt werden. Auf dem Weg dazu sind noch einige Fragen offen:

- Welche Wirkungsgrade können im System erreicht werden?
- Wie kann die Technologie am besten in regionale Energiesysteme eingebunden werden?
- Welche Herausforderungen bringt der Einsatz von Biomasse im Prozess mit sich (Prozessgasverunreinigungen, ...)?
- Gibt es Möglichkeiten zur effizienten Energiespeicherung und Freisetzung mit Chemical Looping?

Wie man sieht gibt es auch zukünftig noch viele spannende wissenschaftliche Fragestellungen für interessierte Verfahrenstechnikerinnen und Verfahrenstechniker, Diplomanden und Dissertanten und studentische Mitarbeiter.

Danksagung

Die Autoren möchten sich an dieser Stelle ganz besonders für die tatkräftige Unterstützung durch Studenten und Diplomanden bedanken, die im Jahr 2017 tätig waren: Verena Martschitsch, Martin Dalvai Ragnoli, Alexander Henkes, Benedikt Karan und Christoph Aspensberger waren und sind wesentlich am erfolgreichen Fortschritt der Forschungstätigkeiten beteiligt ☺.

Literatur

- [1] S. Bock, R. Zacharias, and V. Hacker, "High purity hydrogen production with a 10kWth RESC prototype system," *Energy Convers. Manag.*, vol. 172, no. May, pp. 418–427, 2018.
- [2] S. Nestl, G. Voitic, R. Zacharias, S. Bock, and V. Hacker, "High-Purity Hydrogen Production with the Reformer Steam Iron Cycle," *Energy Technol.*, vol. 6, no. 3, pp. 563–569, Oct. 2018.

Fragen und Anregungen bitte an:

Sebastian Bock

Tel.: +43 (316) 873 - 4984

E-Mail: sebastian.bock@tugraz.at

Automatisierte Herstellung von Hochleistungselektroden für Niedertemperatur-Brennstoffzellen

Maximilian Grandi, Anna Stark, Viktor Hacker

Einleitung

Durch die fortgeschrittene Entwicklung innovativer Brennstoffzellensysteme und Optimierung der Betriebsbedingungen für hohe Lebensdauer, gibt es eine immer größere Nachfrage nach kostengünstigen Brennstoffzellenkomponenten mit hoher Leistung. Um die Anschaffungskosten für den Endverbraucher zu senken ist der direkteste Ansatz, die Produktion billiger zu gestalten. Der Platinkatalysator und die Art der Aufbringung machen mit 37 und 41 % bei höheren Produktionsvolumina den größten Teil der Kosten für die Fertigung aus [1]. Die Entwicklung von Katalysatormaterialien mit reduziertem Platingehalt und Methoden für deren Verarbeitung zu Elektroden ist deswegen von größter Bedeutung für die großflächige Etablierung der Brennstoffzellen auf dem Markt. Ein weiterer Ansatz zur Kostenreduktion ist die Leistung der Zellen bei gleichbleibendem Platingehalt zu steigern. Um dies zu realisieren ist es notwendig den internen Widerstand der Zelle zu senken und die Elektroden für die Generierung hoher Ströme und Spannungen zu optimieren. Für Ersteres ist vor allem die chemische und physikalische Struktur der Elektrolytmembran, jedoch auch die Protonenleitfähigkeit der Elektroden verantwortlich. Zweites wird großteils von der Mikro- und Mesoporesizität der Aktivschicht auf den Elektroden bestimmt [2].

Auch am CEET wird an der Entwicklung fortschrittlicher Methoden zur Herstellung von Hochleistungselektroden für Niedertemperaturbrennstoffzellen geforscht. Dabei arbeiten Maximilian Grandi und Anna Stark unter der Leitung von Prof. Viktor Hacker gemeinsam mit dem National Institute of Chemistry (NIC) in Ljubljana an der Entwicklung von automatisierten Herstellungsverfahren von Hochleistungselektroden mit geringem Platingehalt. Für die Verarbeitung wurde ein hochmoderner Ultraschallsprühbeschichter zur Beschichtung der Elektrolytmembran mit einer Aktivschicht aus Katalysator und Polymerelektrolyt angeschafft und erfolgreich im Brennstoffzellenlabor installiert. Dieses nutzt die Kombination aus Roboter gesteuertem 3D-Achsen-system und dem Prinzip der Ultraschallzerstäubung (siehe Abb.2) um Schichten mit gleichmäßiger Verteilung des Katalysators und Elektrolytmaterials zu erreichen.

lysator und Polymerelektrolyt angeschafft und erfolgreich im Brennstoffzellenlabor installiert. Dieses nutzt die Kombination aus Roboter gesteuertem 3D-Achsen-system und dem Prinzip der Ultraschallzerstäubung (siehe Abb.2) um Schichten mit gleichmäßiger Verteilung des Katalysators und Elektrolytmaterials zu erreichen.

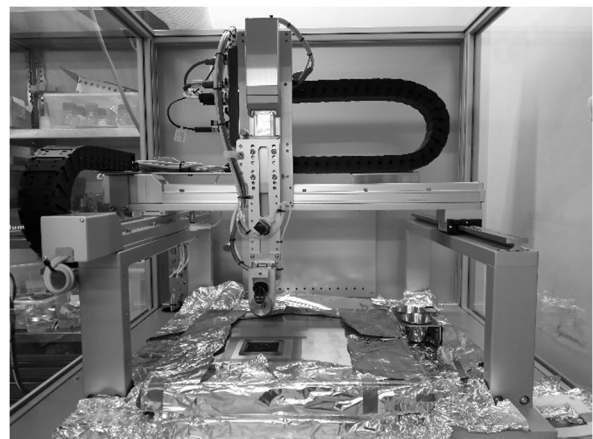
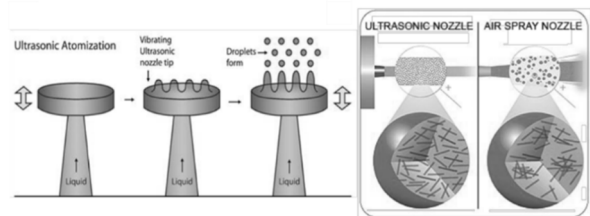


Abb.1: Prinzip der Ultraschallzerstäubung und Vergleich mit konventioneller Pneumatischer Zerstäubung. Photo des Ultraschallsprühbeschichters.

Experimental

Ein PtCu_3/C Katalysator welcher vom NIC Synthetisiert und mittels RDE-CV charakterisiert wurde, ist mithilfe des Ultraschallsprühbeschichters zu Elektroden verarbeitet worden. Als Referenz diente ein Kommerziell erhältlicher Pt/C Katalysator, HiSPEC 5000. Die Spezifikationen sind aus Tab.1 zu entnehmen.

Tab. 1: Katalysatorspezifikationen aus Produktdatenblatt und vom NIC bestimmt [3].

	wt% Metall	Träger	MA / A $\text{mg}_{\text{Pt}}^{-1}$ (RDE-CV)
PtCu ₃ /C	8.5	Vulcan XC72	2
(Pt/C)	50	Vulcan XC72	0.27

Nach der Beschichtung einer Nafion NM211 Membran mit dem Sprühbeschichter, wurde die fertige Catalyst Coated Membrane (CCM) mit Beladung $0.4 \text{ mg}_{\text{Pt}} \text{ cm}^{-2}$, zwischen zwei mit Kohlenstoff Beschichtete Gas Diffusionsschichten (GDL) von Sigracet positioniert und in eine 5 cm^2 Testzelle fixiert und eine Polarisationskurve und ein Impedanzspektrum aufgenommen. Die Leitfähigkeit der Aktivschicht wurde mittels einer am CEET weiterentwickelten Methode von I. Hiden [4] in derselben Testzelle und denselben CCMs bestimmt. Um die Schichtdicke zu bestimmen wurde ein Querschnitt unter Flüssigstickstoffkühlung vorbereitet und im Lichtmikroskop untersucht.

Ergebnisse

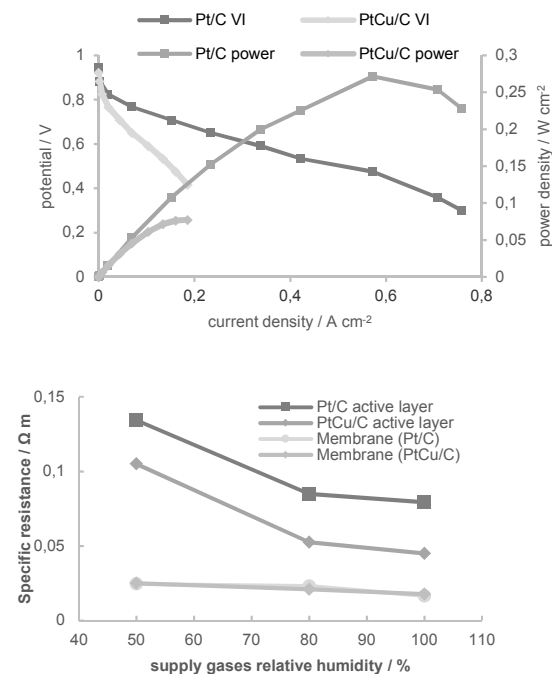


Abb. 2: Polarisationskurven der Hergestellten Elektroden mit $0.4 \text{ mg}_{\text{Pt}} \text{ cm}^{-2}$ a) und spezifischer Widerstand der Aktivschichten für Protonenleitung b).

Dadurch sind die Transportwege für die Gase zu den Aktiven Zentren verlängert, was die geringe Leistungsdichte von 90 mW cm^{-2} in der PtCu₃ basierten Elektrode im Vergleich zur Pt/C (50 wt% Metall) basierten Elektrode erklärt. Im kinetisch limitierten Bereich nahe der OCV ist der Spannungsverlust jedoch ident, was mit den RDE-CV Ergebnissen (Tab.1) übereinstimmt. Dies zeigt, dass eine strukturelle Optimierung des Katalysators nötig ist, um auch in der Brennstoffzelle dieselbe hohe Performance zu erreichen. Die Protonenleitfähigkeit der Aktivschicht (Abb.2 b)) mit PtCu₃/C ist bei allen Feuchtestufen höher als jene mit Pt/C. Aus diesen Ergebnissen und den am NIC durchgeführten RDE-CV Messungen, lässt sich ein hohes Potential für PtCu₃/C als Kostengünstigen Ersatz für Pt/C erschließen. Weitere strukturelle Optimierungen dieses Katalysators müssen durchgeführt werden. Mittels der Ultraschallsprühbeschichtung konnte eine hohe Leistung der Pt/C basierten Elektrode erzielt werden. Außerdem zeichnen sich die Beschichtungen durch sehr hohe Gleichmäßigkeit aus, was aus den Untersuchungen mittels Lichtmikroskop zu erkenne war.

Referenzen

- [1] A. Wilson, G. Kleen, D. Papageorgopoulos, DOE Hydrogen and Fuel Cells Program Record, 2017.
- [2] A.L. Dicks, D.A.J. Rand, Fuel Cell Systems Explained, 3rd ed., Wiley, 2018.
- [3] M. Bele, P. Jovanovič, A. Pavlišič, B. Jozinovič, M. Zorko, A. Rečnik, E. Chernyshova, S. Hočevar, N. Hodnik, M. Gaberšček, A highly active PtCu₃intermetallic core-shell, multilayered Pt-skin, carbon embedded electrocatalyst produced by a scale-up sol-gel synthesis, Chem. Commun. 50 (2014) 13124–13126.
- [4] H. Iden, A. Ohma, K. Shinohara, Analysis of Proton Transport in Pseudo Catalyst Layers, J. Electrochem. Soc. 156 (2009) B1078.

Entwicklung von Kontaktmassen zur nachhaltigen H₂-Herstellung mit dem RESC

Robert Zacharias, Sebastian Bock, Viktor Hacker

Wasserstoff als Energieträger

Aus erneuerbaren Energiequellen hergestellter Wasserstoff hat großes Potential um die Emissionen von schädlichen Treibhausgasen zu reduzieren. Der Reformereisen-Dampf Prozess (RESC) ist eine erfolgsversprechende Technologie zur nachhaltigen Wasserstoffherstellung auf Basis von Festbett Chemical Looping (CL). Diese basieren auf dem Sauerstoffaustausch zwischen einem oxidierenden und einem reduzierenden Gasstrom mittels festen Metalloxiden. Dadurch wird eine effiziente Trennung des kohlenstoffhaltigen Stromes der Ausgangsstoffe vom Produktgasstrom und damit eine hohe Wasserstoffreinheiten erreicht.

Mit dem RESC ist die dezentrale Produktion und Speicherung von Wasserstoff aus lokal verfügbaren, erneuerbaren Rohstoffen möglich. Das Verfahren wurde bereits im 19. Jahrhundert zur Erzeugung von Wasserstoff für Luftschiffe eingesetzt. Im Rahmen der Forschungs- und Entwicklungsarbeiten an der TU entstand ein moderner Prozess zur Herstellung und Speicherung von erneuerbarem Wasserstoff [1-3].

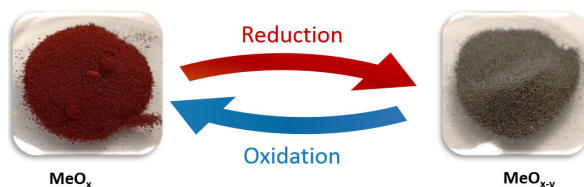
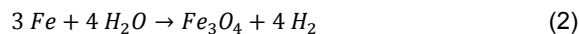
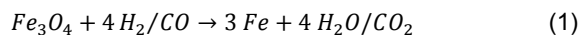


Abb. 1: Schematische Darstellung des Chemical Looping Prozesses zur Herstellung von Wasserstoff aus metallbasierten Sauerstoffträgern

Der zyklische Prozess ermöglicht die Umsetzung von erneuerbaren Kohlenwasserstoffen, wie z.B. Biogas, im Dampfreformer unter Zugabe von Wasserdampf zu

Synthesegas, reich an Wasserstoff und Kohlenmonoxid. Dieses reduziert bei Temperaturen zwischen 600-1000°C eine eisenbasierte Kontaktmasse. Im nachfolgenden Prozessschritt wird durch die Oxidation der reduzierten Kontaktmasse hochreiner Wasserstoff erzeugt. Durch Verschließen des Systems und den dadurch herbeigeführten Druckaufbau kann Hochdruckwasserstoff mit bis 50 bar bereitgestellt werden [4]. Die Kopplung und Integration aller Prozessschritte in der kompakten Festbettreaktoreinheit erlaubt dabei den Bau von effizienten, dezentralen Anlagen.

Seit den 1990er Jahren wird auch international an den Anwendungen von Chemical Looping CL geforscht, vor allem zur Wärmegewinnung in Verbindung mit Kohlendioxid-Abtrennung. Auch in der Wasserstoffproduktion mittels CL konnten große Fortschritte erzielt werden. Insbesondere der Einsatz von eisenbasierten Kontaktmassen bringt neben einer Stabilitätsverbesserung noch zusätzliche Vorteile [5]. Eisen ist ein völlig ungiftiges und kostengünstiges Speichermedium mit einer hohen gravimetrischen Speicherdichte von 4,8%. Die volumetrischen Speicherdichte ist vergleichbar mit kommerziell verfügbaren 200-700 bar Drucktanks.

Experimentelle Untersuchungen

Im Projekt HyStORM wird der RESC auf die Möglichkeit der Erzeugung und Speicherung von Hochdruckwasserstoff aus verschiedenen Biokraftstoffen untersucht. Dabei steht die Erhöhung der Zyklenstabilität der Kontaktmasse sowie die Hochdruckentladung im Vordergrund. Grundlegende Materialentwicklung ermöglicht die Verbesserung der Reaktivität und Stabilität der eingesetzten eisenbasierten Kontaktmassen. Vielversprechende Proben werden im nächsten Schritt in Festbettreaktoren verschiedener Größen charakterisiert.

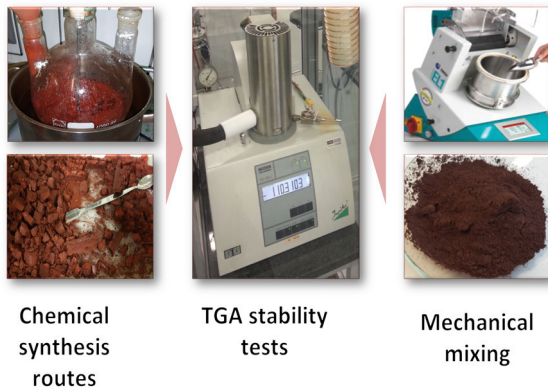


Abb. 2: Ablauf der Materialentwicklung: Proben mit neuen Synthesemethoden oder Zusätzen werden hergestellt und TG-Stabilitätstests unterzogen

Im nächsten Schritt werden ausgewählte Materialkombinationen in Laborsystemen auf ihre Sauerstoffaustauschkapazität, die mechanische Stabilität und die Erzeugung von Druckwasserstoff hin untersucht. Dazu werden mehrere charakteristische Synthesegasmischungen nachgebildet, um die Reduktion mit Gasen aus erneuerbaren Rohstoffen darzustellen. Durch eine geeignete Prozessführung eignet sich das Verfahren auch ausgezeichnet für die Erfassung eines reinen Kohlendioxidstroms (Carbon Capture and Storage) mit gleichzeitiger Druckwasserstoffentladung.

Des Weiteren konnte im Projekt ein Kontaktmassenmaterial entwickelt werden, welches über 330 Redox-Zyklen eine außerordentlich hohe Stabilität erreichte mit einer Degradation von weniger als 1%. Forschungsbedarf besteht jedoch noch in der Verbesserung der Stabilität von pelletierter Kontaktmassen für den Einsatz in Festbettreaktoren (**Fehler! Verweisquelle konnte nicht gefunden werden.**).

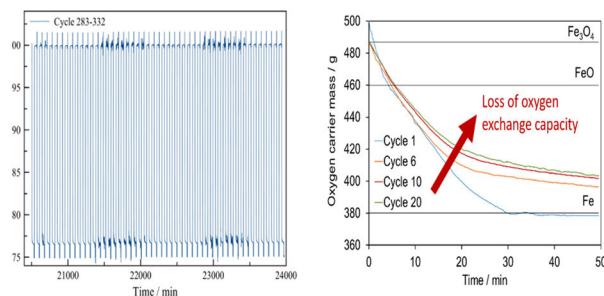


Abb. 3: links: TG Stabilitätsmessung entwickelten Kontaktmasse mit einer Degradation von <1% über 330 Redox-Zyklen; rechts: Aktivitätsverlust der Kontaktmasse in der 10kW Laboranlage

Danksagung

Großer Dank gilt unseren studentischen Mitarbeitern, die am Projekt tätig sind bzw. waren: Alexander Henkes, Benedikt Karan und Antonia Kirac. Finanzielle Unterstützung erfolgte durch den Klima- und Energiefonds über das Energieforschungsprogramm 2015.

Literatur

- [1] Hacker, V., 2003: A novel process for stationary hydrogen production. The reformer sponge iron cycle (RESC). J. Power Sources, vol. 118, no. 1-2, pp. 311-314.
- [2] Nestl, S., Voitic G., Zacharias, R., Bock S., Hacker V., 2017: Operation of the reformer steam iron process prototype for hydrogen production. J. Energy Technology, in press, doi:10.1002/ente.201700576
- [3] Nestl, S., Voitic, G., Lammer, M., Marius, B., Wagner J., Hacker V., 2015: The production of pure pressurised hydrogen by the reformer-steam iron process in a fixed bed reactor system, J. Power Sources, vol. 280, pp. 57-65.
- [4] Voitic, G., Nestl, S., Malli, K., Wagner J., Bitschnau, B., Mautner F., Hacker V., 2016: High purity pressurised hydrogen production from syngas by the steam-iron process, RSC Adv., vol. 280, pp. 57-65.
- [5] G. Voitic and V. Hacker, "Recent advancements in chemical looping water splitting for the production of hydrogen," RSC Adv., vol. 6, no. 100, pp. 98267–98296, 2016.

Fragen und Anregungen bitte an:

Robert Zacharias
 Tel.: +43 (316) 873 - 4985
 E-Mail: robert.zacharias@tugraz.at

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

Bio-Ethanol für den Einsatz als Brenngas in Brennstoffzellen

Karin Malli, Viktor Hacker

Ethanol für die Brennstoffzelle

Ethanol ist ein attraktiver Energieträger für den Einsatz in mobilen Brennstoffzellensystem. Es besitzt eine hohe volumetrische Energiedichte, ist einfach in konventionellen Flüssigtanks zu transportieren und wird großtechnisch hergestellt. Aus ökologischer Sicht ist es erneuerbar und besitzt eine geringe Toxizität im Vergleich zu anderen Wasserstoffträgern wie zum Beispiel Ammoniak und Methanol.

Die Festoxidbrennstoffzelle (SOFC) und die Schmelzkarbonatbrennstoffzelle (MCFC) sind in der Lage den Energieträger direkt zu verstromen. Zur besseren Prozesskontrolle wird in der Anwendung ein Dampfreformer vorgeschaltet, um ein wasserstoffreiches Brenngas zu erzeugen. Wird eine HT-PEMFC eingesetzt, ist zusätzlich ein Wassergas-Shiftreaktor erforderlich. Dieser reduziert den Kohlenmonoxidanteil im Synthesegas auf < 3 vol%. Die Anforderungen an die Reinheit des Brenngases sind in Tabelle 1 zusammengefasst [1].

	HT-PEMFC	MCFC	SOFC
CO ₂	20 vol%	-	-
CO	3 vol%	-	-
NH ₃	1 vol %	1–3 vol %	3 vol %
Schwefel gesamt	4 ppm	0,5 ppm	1 ppm
Halogene	4 ppm	1 ppm	5 ppm

Tab. 1 Anforderungen verschiedener Hochtemperatur-Brennstoffzellen an das Brenngas [1].

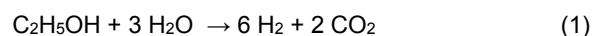
Was ist Bio-Ethanol?

Seit wenigen Jahrzehnten wird Ethanol als erneuerbarer Energieträger in Verbrennungsmotoren eingesetzt. Im Transportsektor wird es als Biokraftstoff dem Benzin beigemischt (5,7 wt%, Österreich, 2017) [2]. In hohen Anteilen, mit 65 – 85 vol%, ist Bio-Ethanol als „Superethanol E 85“ bei einer Vielzahl von europäischen

Tankstellen erhältlich [3]. Für schwere Dieselfahrzeuge wird ED95, mit 96,5 vol% Ethanol, als Ersatzkraftstoff verwendet. Anstelle von Benzin werden Zusatzstoffe zur Denaturierung und zur Verbesserung der Zündigenschaften beigemischt. Aufgrund der hohen Reinheit und der im Aufbau begriffenen Infrastruktur wird ED95 für den Einsatz in Brennstoffzellen für den Transportsektor getestet.

Brenngas aus Bio-Ethanol

Die Dampfreformierung erzeugt Synthesegas mit definierter Zusammensetzung aus Kohlenwasserstoffen. Gekoppelt mit Hochtemperatur-Brennstoffzellen vereinfacht der Einsatz einer Reformereinheit die Prozesskontrolle [4]. Die Reformierung von Ethanol erfolgt nach Reaktionsgleichung (1).



Neben den thermodynamischen Produkten (H₂, CO, CO₂, CH₄ und H₂O) können auch Kohlenwasserstoffe wie Acetaldehyd, Ethen und Ethan als Zwischen- und Nebenprodukte entstehen, die zur Verkokung und damit zur Deaktivierung des Systems führen. Der Einsatz des Bio-Ethanol-Kraftstoff (E95) setzt sich zu 3,5 vol% aus weiteren Kohlenwasserstoffen zusammen. Als Hauptkomponente wird Methanol zur Denaturierung zugemischt. In geringeren Mengen sind kurzkettige Alkane, Alkohole, Ketone, Ester, Säuren und Aldehyde enthalten. Zudem können im einstelligen ppm-Bereich Schwefel und Halogene enthalten sein, die zur schnellen Deaktivierung der Katalysatormaterialien führen. Neben der Katalysatorentwicklung, sind ausführliche Untersuchungen zur Katalysatorbeständigkeit und Deaktivierungsverhalten im Fokus der derzeitigen For-

schung und Entwicklung um in naher Zukunft Brennstoffzellen-unterstützte Fahrzeuge zu kommerzialisieren [5].

Forschung am CEET

Im Labor für Brennstoffzellen- und Wasserstoffsysteme wurde eine Reformereinheit zur Umsetzung von Bio-Ethanol betrieben (siehe Abbildung 1). In den Experimenten wurde ein kommerzieller Katalysator charakterisiert und in einem Langzeittest mit Ethanol (lab grade) und Bio-Ethanol (ED95) getestet. Dabei wurden der Einfluss des Langzeitbetriebs, Variation von Betriebsparametern und Regeneration auf die Katalysatorlaufzeit bis zur Desaktivierung untersucht. Die experimentell erhaltenen Daten dienen zur Umsetzung eines Reformier-Brennstoffzellen-Systems für den Transport.



Abb. 1: Ethanol-Reformer im Brennstoffzellen-Labor des Instituts für Chemische Verfahrenstechnik und Umwelttechnologie.

Literatur

- [1] Voitic, G., Malli, K., Schenk, A., Hacker, V., 2016: Reformierung von biobasierten Kohlenwasserstoffen, Biobased Future, Nr.6, S. 15.
- [2] R. Thaler, H. Bach, 2017, Biokraftstoffe im Verkehrssektor 2017, Umweltbundesamt, Österreich, Wien.
- [3] Mineralölsteuergesetz 1995 (BGBl. I Nr. 630/1994, geändert durch das Bundesgesetz BGBl. I Nr. 151/2009) in der Fassung BGBl. I Nr. 118/2015
- [4] J. Milewski, W. Budzianowski, 2014, Recent key technical barriers in solid oxide fuel cell technology, Arch. Thermodyn. 35 (2014) 17–41.
- [5] Lawlor, V., Reissig, M., Makinson, J., et al., 2016: SOFC System for Battery Electric Vehicle Range Extension: Results of the First Half of the Mestrex Project, Biobased Future, Vol.78 - 1, S. 191-195.

Fragen und Anregungen bitte an:
Karin Malli
Tel.: +43 (316) 873 - 8796
E-Mail: karin.malli@tugraz.at

Langzeitstabile 60 cm²-Luftelektroden für wiederaufladbare Zink-Luft Fließbatterien

Birgit Pichler, Viktor Hacker

Einleitung

Die Entwicklung stationärer Energiespeichersysteme zur Stabilisierung des Elektrizitätsnetzes bekommt durch den umfassenden Ausbau erneuerbarer, fluktuierender Stromerzeuger, wie Wind- und Solarkraftwerke, eine immer größere Bedeutung. Eine vielversprechende Technologie zur elektrochemischen Speicherung von Strom ist die wiederaufladbare Zink-Luft Fließbatterie, welche in Abbildung 1 schematisch dargestellt ist [1-3].

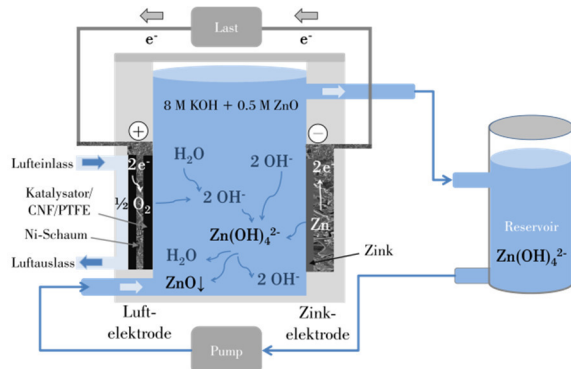


Abb. 1: Schematische Darstellung einer Zink-Luft Fließbatterie: links der Aufbau der Luftelektrode, rechts der Zinkelektrode. Beim Entladen der Batterie wird Zinkat ($Zn(OH)_4^{2-}$) gebildet, welches in einem externen Tank (Reservoir) gespeichert wird.

Die Zink-Luft Fließbatterie zeichnet sich durch gute Umweltverträglichkeit, einen kompakten Systemaufbau, sowie durch die Verwendung des häufigen und kostengünstigen Speichermaterials Zink aus.

Die Herausforderungen liegen in diesem System einerseits bei der inhomogenen Zinkabscheidung während des Ladens der Batterie, andererseits bei den großen Überspannungen und der geringen Stabilität der Luftelektrode. Die daraus resultierende kurze Lebenszeit mit geringer Zyklenstabilität, aber auch die sehr niedrige Energieeffizienz, verhindern bis jetzt die praktische Anwendung der Zink-Luft Fließbatterie als stationäres Energiespeichersystem [1].

Experimentelles

Als Katalysator für die Sauerstoffreduktionsreaktion und die Sauerstoffentwicklungsreaktion (bifunktional) wurden edelmetall-freie Oxidkatalysatoren, wie $La_{0.6}Sr_{0.4}Co_{0.2}Fe_{0.8}O_3$ Perovskit, getestet [1,2]. Die Herstellung der Elektroden sowie der Messaufbau zur elektrochemischen Charakterisierung sind in Abbildung 2 dargestellt. 8 M KOH mit 0.5 M ZnO wurde mit einer Oberflächenfließgeschwindigkeit von 2 cm s^{-1} durch die Fließzelle gepumpt.

Die 60 cm² großen bifunktionalen Luftelektroden wurden bei $\pm 50\text{ mA cm}^{-2}$ zyklisch betrieben (2 h Pulsladen [4,5], 1 h Entladen) und deren Lade- und Entladepotentiale sowie das Zellpotential mit einer Zink-Gegenelektrode über die gesamte Betriebszeit aufgezeichnet. Dies ermöglichte die Identifizierung von Degradationsmechanismen und eine Evaluierung der Stabilität der Elektrode im Dauerbetrieb [1-5].

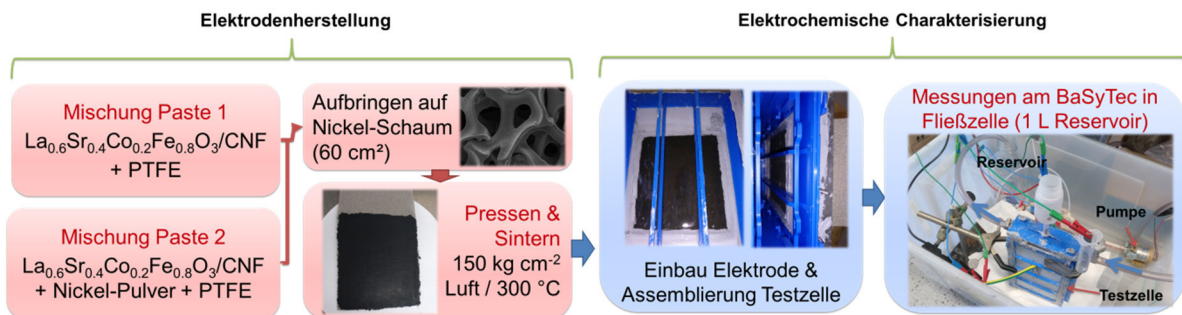


Abb. 2: Herstellung der Luftelektroden (linke Hälfte) und Aufbau der Fließzelle zur elektrochemischen Charakterisierung (rechte Hälfte).

Ergebnisse

Abbildung 3 zeigt den Verlauf der ersten 100 h einer Langzeitmessung mit ansteigender Stromdichte. Die Lufolektrode zeigte dabei eine stetige Verbesserung der Lade- und Entladepotentiale, was einer Verringerung der Potentialdifferenz (ΔV) zwischen Laden und Entladen entspricht. Dieser Effekt wird auf eine graduelle Verbesserung der Benetzbarkeit der Elektrode mit Elektrolyt zurückgeführt. Gerade zu Beginn der Messungen ist die Elektrodenoberfläche sehr stark hydrophob (Elektrolyt perlt sehr leicht von der Oberfläche ab), allerdings nimmt diese Hydrophobizität während des Betriebs sukzessive ab, was auf die Degradation des PTFE-Bindemittels hindeutet.

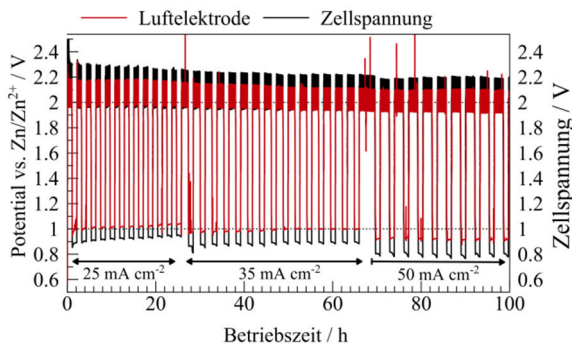


Abb. 3: Die ersten hundert Stunden einer Langzeitmessung einer 60 cm² großen Lufolektrode im Fließzellenbetrieb mit einer Zinkplatte als Gegenelektrode.

Wie in Abbildung 4 erkennbar, konnte mit dieser Elektrode eine Gesamtbetriebszeit von 300 h mit 100 Zyklen erreicht werden. Die Pulsladungspotentiale – als rote Balken in Abbildung 3 und in rot in Abbildung 4 erkennbar – waren während der ganzen Messperiode sehr konstant mit einem maximalen Potential von unter 2,2 V vs. Zn/Zn²⁺.

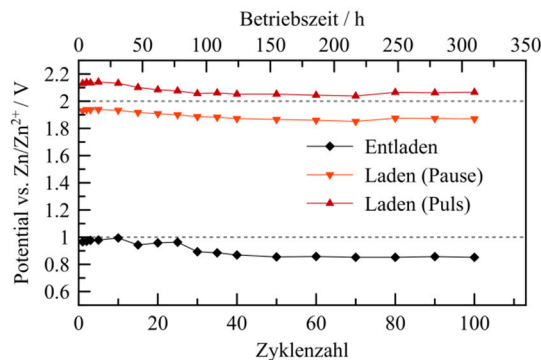


Abb. 4: Gesamte Verlauf der Langzeitmessung einer 60 cm² großen Lufolektrode über insgesamt 100 Zyklen und 300 h.

Zusammenfassung

60 cm² große Lufolektroden für den bifunktionalen Betrieb (Sauerstoffreduktionsreaktion und Sauerstoffentwicklungsreaktion) konnten im Labormaßstab hergestellt und im Langzeitbetrieb von 300 h erfolgreich getestet werden. Bei einer praxisnahen Stromdichte von 50 mA cm⁻² wurden Entladepotentiale von 0,8 V vs. Zn/Zn²⁺ und Ladepotentiale im 2,0 V erzielt.

Literatur

- [1] B. Pichler, Development of Stable Bifunctional Air Electrodes for Oxygen Electrocatalysis in Zinc-Air Flow Batteries, Dissertation 2018
- [2] B. Pichler, K. Mayer, V. Hacker, Long-Term Operation of Perovskite-Catalyzed Bifunctional Air Electrodes in Rechargeable Zinc-Air Flow Batteries, *Batter. Supercaps.* (2018) 1–10 (in press).
- [3] B. Pichler, B.S. Berner, N. Rauch, C. Zelger, H.-J. Pauling, B. Gollas, V. Hacker, The impact of operating conditions on component and electrode development for zinc-air flow batteries, *J. Appl. Electrochem.* 48 (2018) 1043–1056.
- [4] B. Pichler, S. Weinberger, L. Reščec, I. Grimmer, F. Gebetsroither, B. Bitschnau, V. Hacker, Bifunctional electrode performance for zinc-air flow cells with pulse charging, *Electrochim. Acta.* 251 (2017) 488–497.
- [5] B. Pichler, S. Weinberger, L. Reščec, V. Hacker, Development of Stable Bifunctional Air Electrodes for Zinc-Air Flow Batteries, *ECS Trans.* 80 (2017) 371–375.

Danksagung

Das Projekt Luziflow (No. 848933) wurde aus Mitteln des Klima- und Energiefonds gefördert und im Rahmen des Energieforschungsprogramms 2015 durchgeführt.

Fragen und Anregungen bitte an:

DI Birgit Pichler

Tel.: +43 (316) 873 - 8797

E-Mail: birgit.pichler@tugraz.at

Performance strategy for efficient cold start of polymer electrolyte fuel cells

Katharina Kocher, Viktor Hacker

Introduction

On the way toward sustainable energy production, polymer electrolyte fuel cells (PEFCs) are at an exciting time of development and commercialization as efficient and emission free power sources in the automotive industry (Fig. 1).

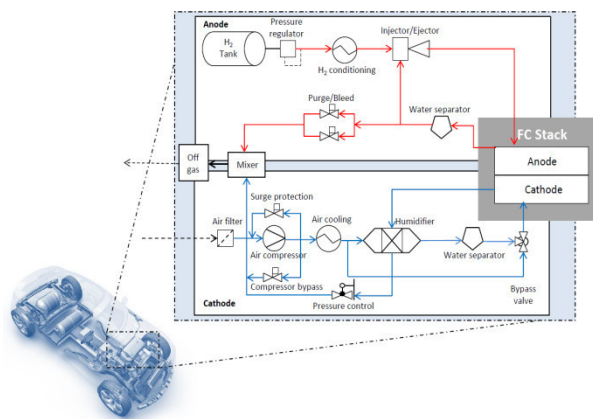


Figure 1: Conceptual diagram of a PEFC system for automotive applications, detailing the anode and cathode compartment including most relevant system components.

Fuel cell vehicles enable long driving range and short refueling times, just like conventional internal combustion engines, but durability is still a key limiting factor in their successful commercialization. The US Department of Energy (DOE) defined a lifetime target of 5000 operating hours with a maximal acceptable loss of 10% cell voltage in international development programs [1]. Currently available vehicles on the market, however, often show power losses exceeding this value. During real vehicular application, the fuel cell mainly experiences four dynamic conditions: compared to idling and high power conditions, alternating load changes and start-stop are more likely to accelerate degradation of key fuel cell materials [2]. The reverse current formed during start-up influences the cathode catalyst and the fuel cell is – if not operated – exposed to the ambient temperatures. In particular, freezing conditions, i.e.

temperatures below 0 °C, are problematic. The highly dynamic load profiles of a vehicle also lead to severe fluctuations in the state variables, i.e. fuel availability and membrane humidity, which are decisive for the performance and the lifetime of a fuel cell.

In the present work, and in order to enable the achievement of the proposed lifetime targets, new materials, but much earlier, optimized operation strategies of the PEFC system have to be developed.

Method

The normal operation of PEFCs requires a constant gas supply from the flow channels to the catalyst layers on anode and cathode as well as the drainage of the produced water, simultaneously. In subfreezing temperatures, the produced water can freeze in the porous layers and in flow channels. Ice accumulates, blocks the gas transport pathway, covers active sides of the catalyst and causes mechanical damage what leads in the end to performance failures (Fig. 2).

With the focus on overcoming the mentioned hurdles, low-damage processes for cold start optimization, with implicit consideration of life expectancy, thereof have to be established:

- Constant current mode
 - Since current is easily controlled, the constant current mode and the current ramping strategy are advantageous to stabilize gas flow rates and control heat generation with the respect to the amount of produced water.
- Constant power mode
 - In practical application such as in fuel cell vehicles, fuel cells are operated in a constant power mode that favors high starting current densities that enable the redistribution of water in the active layers through the electro-osmotic drag effect.

- Assisted start-up
 - In addition to the essential components of a fuel cell system, the use of auxiliary equipment is a positive method for an efficient cold start. As the key factor of successful cold start is the ratio of cell warm up time to ice accumulation rate, gas purging and heating are two aspects of assisted cold start. Both remove residual water in the cell and improve cold start ability. Since nitrogen purging is not feasible in vehicles, novel purging strategies such as vacuum assisted methods are under research. Extra heat can be provided by electric or gaseous heating or by using coolant heat and the heat of internal chemical reactions.

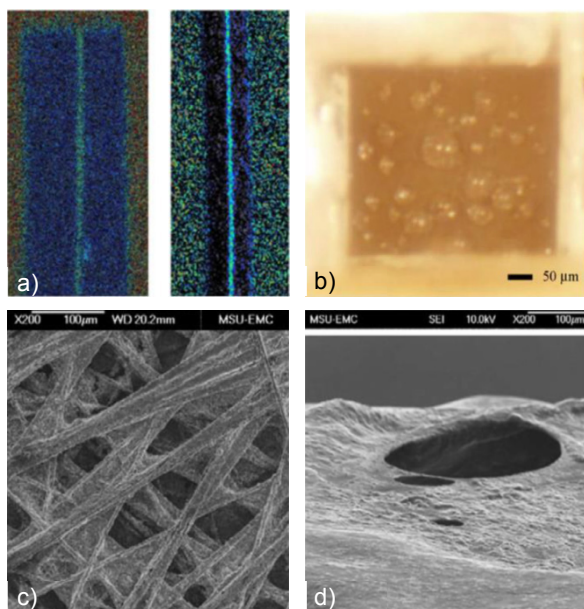


Figure 2: Water/ice and damage illustration in PEFC after cold start: a) visualization of water and ice by neutron radiography, b) visualization of water and ice on MEA surface by cryo-SEM, c) and d) microscopy image of gas diffusion media and membrane (adapted from [3]).

Conclusion

Transport represents one of the largest economic sectors in the world and therefore, any new power train technology has to surpass the existing engine technology. Automotive PEFC systems are ready to compete with conventional engines, but have to overcome durability issues. Due to the harmful conditions during driving, the development of efficient materials and operating/control strategies are required. Experimentally, the

developed solutions have to be tested and validated on a laboratory and an industrial scale to get insights in degradation mechanisms and develop mitigation strategies. Finally, the generation and validation of new operation strategies offer high potentials for future commercial implementations and provide significantly to sustainable mobility through PEFC technology.

Literature

- [1] DOE 2016: https://www.energy.gov/sites/prod/files/2016/06/f32/fcto_myrrd_fuel_cells_0.pdf
- [2] T. Zhang et al., Applied Energy 223 (2018) 249-262
- [3] Y. Luo, K. Jiao, Progress in Energy and Combustion Science 64 (2018) 29-61

The presented work was carried out as part of the project PROTECT, supported by The Austrian Research Promotion Agency FFG.

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

Brennstoffzellen Workshop

4th International Workshop on Hydrogen and Fuel Cells Technische Universität Graz, 23. August 2018

Im Rahmen der 11. *Summer School on Advanced Studies of Polymer Electrolyte Fuel Cells* fand der Workshop dieses Jahr an der Technischen Universität Graz statt. Internationale Vortragende und aktive TeilnehmerInnen aus Industrie und Forschung machten diese Veranstaltung zu einem charaktervollen und interessanten Ereignis.

Vorträge und Präsentationen

Der Workshop wurde von Prof. Viktor Hacker, dem Leiter der Wasserstoff- und Brennstoffzellenforschungsgruppe am ICVT/TU Graz am Donnerstag, dem 23. August 2018, eröffnet. Vier Forscher aus Israel, Deutschland, Österreich und Japan hielten Keynote-Vorträge zu unterschiedlichen Aspekten von Wasserstoff- und Brennstoffzellentechnologie.

Prof. Dario Dekel von Technion, Israel Institute of Technology, hielt den ersten Vortrag. Thema seines Live-Videobeitrags war der Stand der Forschung an Anionenaustauschmembranbrennstoffzellen.

Vertreter von industrieller Forschung des deutschen Automobilzulieferers ElringKlinger AG war Dr. Michael Götz. Sein Beitrag behandelte die industrialisierte Herstellung von PEM-Stacks und -Komponenten.

Dr. Reinhard Tatschl von AVL List in Graz präsentierte die 3D Multiphysik-Simulation von PEFCs, sowie Modellierungsmethodologie und ausgewählte Anwendungen.

Der letzte Vortrag wurde von Prof. Ken-Ichiro Ota von der Yokohama National University gehalten. Sein Beitrag über Brennstoffzellen- und Wasserstoffprojekte in Japan zeigte die Möglichkeiten, die Zukunft mit richtungweisenden Technologien positiv zu gestalten.

Postersession für Studierende

Teilnehmende Studierende hatten auch die Gelegenheit, ihre jeweiligen wissenschaftlichen Projekte und Erfolge zu präsentieren. In der Postersession wurden 33 Poster von teilnehmenden Studierenden ausgestellt und diskutiert.

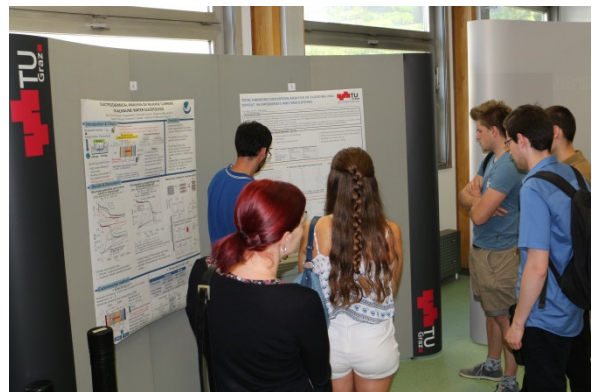


Fig. 1: Teilnehmer*innen diskutieren die Poster ihrer Kolleg*innen im Rahmen der Postersession.

Die besten Beiträge bzw. die jeweiligen Autor*innen wurden mit Posterpreisen ausgezeichnet.

Die heurigen Posterpreise gingen an:

- Yota Otsuki (YNU), et al.
- Dominik Ladenhaufen (TU Graz), et al.
- Kaoru Nagano (YNU), et al.
- Kurt Mayer (TU Graz), et al.

Fragen und Anregungen bitte an:

Prof. Viktor Hacker,

Brigitte Hammer

Tel.: +43 (316) 873 – 8781

E-Mail: brigitte.hammer@tugraz.at,

www.ceet.tugraz.at/fuelcell

Brennstoffzellen Sommerakademie

11th International Summer School on Advanced Studies of Polymer Electrolyte Fuel Cells, Technische Universität Graz, 20.-25. August 2018

In schon traditioneller Art und Weise wurde, in Kooperation zwischen der Yokohama National University (YNU) und der TU Graz, zum elften Mal die **International Summer School on Advanced Studies of Polymer Electrolyte Fuel Cells** veranstaltet.

Diese Veranstaltung soll den StudentInnen sowohl technisches und naturwissenschaftliches Wissen vermitteln als auch den internationalen kulturellen Austausch intensivieren.

Intensivkurs

Der einwöchige Intensivkurs beinhaltete sowohl elektrochemische Grundlagen, Aspekte der Katalyse, Thermodynamik und Messtechniken von Brennstoffzellensystemen als auch die Wasserstofferzeugung, die Wasserstoffspeicherung und relevante Anwendungen.

Diese Themen wurden in bis zu sieben Vorträgen pro Tag von Lehrenden aus Japan, Frankreich, Italien, Deutschland, Dänemark und Österreich anschaulich präsentiert.



Fig. 1: Prof. Mitsushima (rechts) und Prof. Hacker (links) in der Sommerakademie im Gespräch mit den Studierenden.

Mit einer schriftlichen Prüfung konnte das in der Sommerakademie erworbene Wissen auch in diesem Jahr als Freifach an der TU Graz oder der YNU im Studium

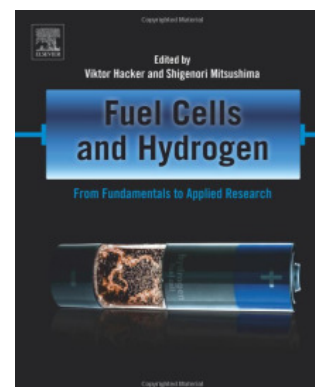
verwendet werden. Mit der erfolgreichen Teilnahme rückt damit auch der Studienabschluss etwas näher.



Fig. 2: Gruppenfoto 11th Summer School on PEFCs.

Veröffentlichung der Vorträge

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,

Biorefinery @ ICVT

Thomas Pichler, Silvia Maitz, Nuttakul Mungma, Paul Demmelmayer,
Marlene Kienberger

Biorefinery Engineering

Within the Horizon 2020 Project BioEnergy Train the new master program, “BioRefinery Engineering (BRE)” was developed and started in 2017. The startup of the master program was quite successful and the newly developed and offered courses are attended not only by BRE students, but also by students from other related study programs.

Besides courses, new learning / teaching formats were developed and tested. One of the newly developed formats is the student camp. Goal of the format is to bring together stakeholders from regions and / or industries, universities and students from different disciplines and countries, to enable students to apply their knowledge to real life challenges. The student camp 2018 was jointly organized by the Energy Agency Styria and TU Graz. 37 students applied to attend the student camp, 24 could be accepted. Participation was decided based on the motivational letter provided by the students during the registration procedure. In the end, 23 students were able to participate, which came from 12 nations from 3 continents and 8 different study programs. The study programs included technical disciplines, natural sciences and a communication study program. The 16 male and 7 female students were supervised throughout the week by five lecturers from UTwente and TU Graz. At the beginning of the camp, the so-called problem owners (representatives of the stakeholders) presented four different challenges, followed by an excursion to a local bioenergy plant. Thereafter, the students formed four groups and worked on the challenges.

The challenges were provided by the company BioEnergie Mureck, by the administration of the Federal Government of Styria, Department 15 - Energy and Buildings, the Styrian Chamber of Agriculture and the Administration of the Federal Government of Styria, Department 14 - Waste Management and Sustainability. The students had to present and discuss their findings at the end of the student camp in the “AULA of TUGraz”.

Figure 1 gives an impression of the working atmosphere at the student camp.



Fig. 1: Impression of the working atmosphere at the student camp

In July 2018 the eseia international Summer School „Biorefineries` Processes and Sustainability“ was held in Lisbon, Portugal for 2 weeks and in October 2018 the Pilot Plant course took place in Lindlar-Remshagen, Germany. The student camp 2019 is jointly organized with KWood and will take place from 25th February 2019 – 28th February 2019 in Lenzing, Austria, for further information please visit <http://www.bioenergytrain.eu/student-camp-2019-on-biorefineries-and-biobased-industrial-products/>.

Accompanying the development and startup of the master program “BioRefinery Engineering” the working group biorefinery was installed and built up. We address topics related to a future bio-economy using the biorefinery concept as working basis. Working in the biobased environment is a challenging issue, as the process streams have a complex matrix, harsh conditions, low concentration of the targeted substances and emulsion- and crud formation. In general, the inlet stream and the targeted outlet stream are defined, but the way between those two streams can be seen as a black box. We in the working group biorefinery develop, based on thermodynamic basis new processes for the isolation of valuables from industrial process streams. Two main

substance groups are targeted. On the one side technical lignins and on the other side carboxylic acids are the targeted substances.

Lignin isolation from black- and spent liquor

Beside cellulose, lignin is the second most abundant bio-polymer. During wood digestion, lignin is solubilized and dissolves in the black or spent liquor. At present lignin is used as fuel for the recovery boiler, which makes it the most important biofuel worldwide. However, due to its properties lignin may play an essential role as bulk chemical in a future bio-economy. The pulp and paper industry can serve as backbone in a future bio-economy, not only because of the used raw material, but too because of high volume production throughout the whole year and a huge knowledge in working with renewable resource.

The solubility of lignin depends on the cooking conditions. Lignin derived with the Kraft process is soluble just at pH-values > 10, whereas lignin derived with the sulfite process is soluble over the whole pH-range (Evstigneev, 2011). The solubility of the generated lignin influences the isolation technology. A continuously operated lignin precipitation process using plant derived CO₂ for the acidification of Kraft black liquor is under development within the COMET K project Flipp². Besides the thermodynamic description of the absorption of CO₂ in black liquor, a new apparatus design is proposed.

Preliminary experiments with a continuously operated precipitation reactor were successfully conducted; Fig.2 shows the recorded temperature and pH during the experiment. At the beginning, the black liquor in the reactor is neutralized to the target pH, where the continuous operation is intended. After reaching this value, fresh black liquor is fed to the reactor to keep the pH constant. The feed rate and the pump setting is calculated by balancing the rate of reacting CO₂.

The designing procedure for the new reactor set up is supported with hydrodynamic measurements and the following separation of lignin as well as the subsequent washing procedure are part of the ongoing research activities.

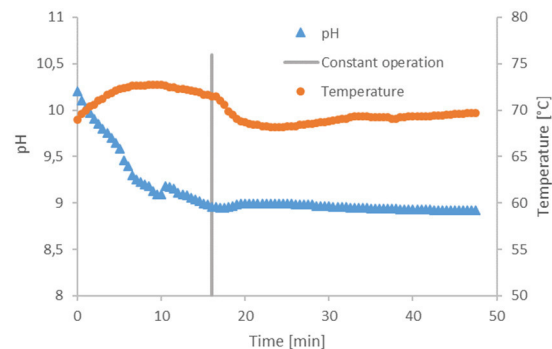


Fig. 2: Temperature and pH data from a continuous precipitation experiment

A further topic in this project is the modification of lignin by heat treatment of the black liquor. In a first attempt, the influence of a possible storage situation of black liquor in the mill on the lignin was investigated. Therefore, low treatment temperatures between 100 and 200 °C and a residence time of 24 and 48 h were investigated. In terms of processability a worsening of the specific filter resistance α_H was observed (see Figure 3). The produced lignin from treated liquors showed a narrower distribution of molecular weight and increased content of phenolic hydroxyl groups.

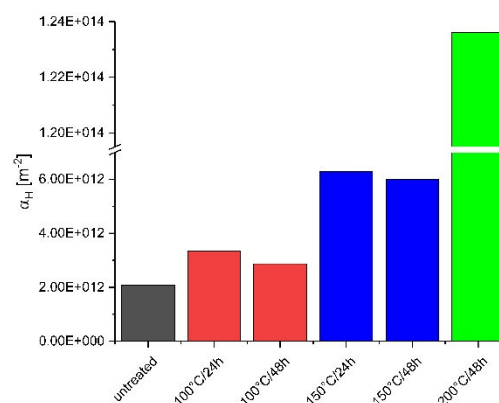


Fig. 3: Specific filter resistance of lignin from untreated and treated black liquor

Different to lignin from the Kraft process, other technologies need to be developed or available technologies need to be adapted for the isolation of lignosulfonates. Due to their water-solubility throughout the whole pH range, the selective isolation thereof is challenging. Potentially used mass transfer unit operations for the (selective) isolation are membrane processes, extraction or adsorption. Both, reactive extraction and adsorption are tested for the selective isolation of lignosulfonates

from spent liquor. Extraction in combination with industrial process streams from the biobased industry in general suffers from emulsion - and / or crud formation. Liquid membrane permeation with support layers is able to prevent emulsion formation and hence can serve as future technology for the treatment of difficult process streams. Next to a comprehensive extractant screening and measurement of phase equilibria data, the apparatus and process design are in the focus of the working group.

Equilibrium data for dioctylamine:octanol were recorded at constant temperature and different pH of the aqueous phase. Figure 4 shows that the extraction of lignosulfonates from the aqueous into the organic phase works better with decreasing pH.

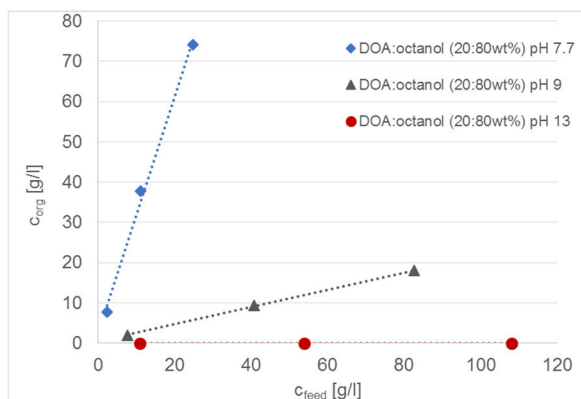


Fig. 4: Phase equilibria for extraction of lignosulfonates at different pH values

With the knowledge of the phase equilibria measurements for model solutions, the transfer to technical solutions was performed. Both, the efficiency and the crud formation can be influenced by the used reactive extractant and the pH and the results from modeled and real solutions fit well together. In liquid membrane permeation, extraction and back-extraction are performed simultaneously by enabling a three phase contact. For the technical process stream, the isolation of lignosulfonates in three phase contact was performed. The transfer was successful in both, the emulsion / crud prevention and the simultaneous extraction and back-extraction.

The final step is to transfer the extraction process to a larger scale and into the continuous operation mode.

In-situ isolation of valuables from aqueous process streams

The biorefinery working groups focus lies on two different bio-based industries for isolation of valuables like carboxylic acids from industrial process streams. Carboxylic acids are formed on the one hand in the course of pulping processes and on the other hand by fermentation or biocatalysis. Both the sulfite spent liquor and the kraft black liquor contain carboxylic acids, which are generated during wood digestion as degradation products of wood carbohydrates. Unfortunately, the concentration of dissolved acids in these streams is rather low and the matrix is extremely complex. However, currently these acids are only burned in the course of the recovery cycle, while isolation and use as bulk chemical would mean a considerable increase in value. Besides black liquor or spent liquor also other process streams from the pulp and paper industry can be of interest with regard to their potential for carboxylic acid isolation. Of those, the most promising streams can be further modified to increase the carboxylic acid concentration prior to isolation and fractionation thereof. Such technologies cannot be realized with a one step process, instead the combination of different processes is necessary.

Within the bridge1 project KrAcid, which started in October 2018, the isolation of carboxylic acids from black liquor is targeted. Overall goal of this project is to develop the basics for a fractionated isolation of the different carboxylic acids present in the black liquor and to suggest a flow chart of potential isolation units with respect to the integration at a pulp and paper mill.

Carboxylic acids are not only present in industrial process streams, like the black liquor from Kraft pulping, but are mainly produced by fermentation. In fermentation most of the time either the substrate or the product are harmful to the biocatalyst. Hence, in-situ isolation of the product or in-situ substrate supply can help to overcome production limitation because of that. Also, the downstream processing in general is costly, which accounts for example for lactic acid with 50% to the overall production costs. For lactic acid production lots of work focused on the enhancement of the biocatalyst leading to biocatalysts that are able to work in a larger pH range for the production of lactic acid. Also, the downstream processing is targeted with different approaches. We are focusing on the selective isolation of lactic acid using liquid membrane permeation with support layers.

The selective mass transfer of lactic acid was investigated in dependence on the liquid membrane composition. Therefore, first tri-octylamine was used as reactive extractant, 1-octanol was used as modifier and n-undecane as diluent. The used set up is shown in Figure 5. The liquid membrane permeation unit is made from PVC-U consisting of two chambers for the feed and stripping phase, respectively. The membrane module consists of a PVC-U frame where the polyethylene sheet, that acts as supported layer, is glued inside.

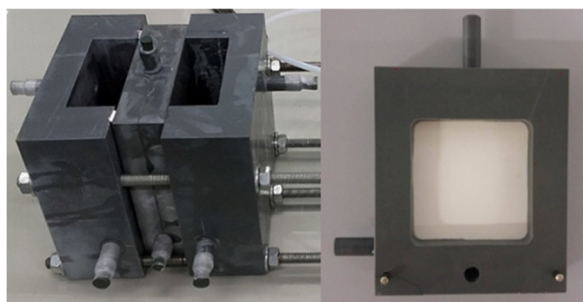


Fig. 5: Supported liquid membrane configuration

Prior to the transfer into the liquid membrane permeation unit, phase equilibria were measured. The optimum liquid membrane composition there was found to be 40 wt% tri-octylamine : 40 wt% 1-octanol : 20 wt% n-undecane. A similar result was observed for a liquid membrane composed of 20 wt% tri-octylamine and 80 wt% n-octanol. Because of the formation of a third phase when the tri-octylamine concentration exceeds 40 wt%, further experiments were performed with a liquid membrane composed of tri-octylamine either mixed with 1-octanol or n-undecane. Figure 6 summarizes the results for the optimization of the liquid membrane composition.

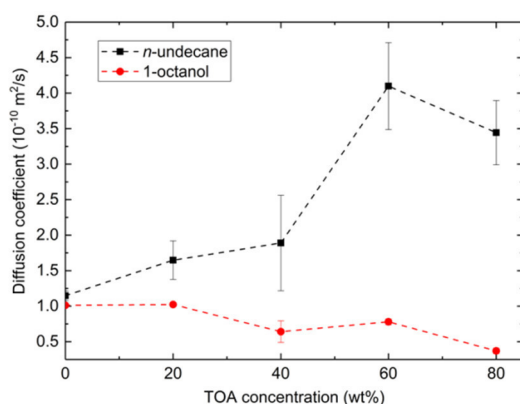


Fig. 6: Optimization of the liquid membrane composition in dependence on the composition thereof

It clearly can be seen that different to the phase equilibria measurements, 1-octanol does not enhance the mass transfer which is related to the diffusive mass transfer in liquid membrane permeation. Diffusion is highly influenced by the viscosity and the density. When tri-octylamine and 1-octanol are mixed, the viscosity is in the range of 7 to 10 MPas, while it is in the range of 1 to 5 MPas when n-undecane and tri-octylamin are mixed.

After having optimized the liquid membrane composition for lactic acid, the selectivity for lactic acid, formic acid and acetic acid was tested. For that, a modeled feed phase having similar concentrations to a fermentation broth was used. Figure 7 shows the equilibrium constant for the three acids in dependence on the liquid membrane composition. The results show that lactic acid cannot be separated selectively from the other two acids. However, the extraction of the three acids depends on the pK_a of the acids.

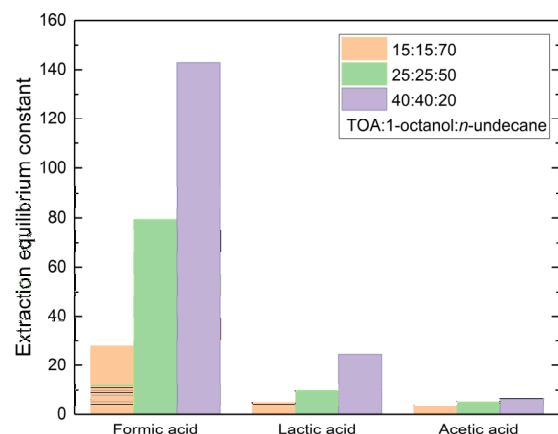


Fig. 7: Equilibrium constant for formic-, acetic - and lactic acid in dependency of the organic phase

Literature

- [1] Evstigneev, E.I. 2011: Factors affecting lignin solubility, Russian Journal of Applied Chemistry 84: 1040.

Questions and suggestions to:
 Marlene Kienberger
 Tel.: +43 (316) 873 - 7480
 E-Mail: marlene.kienberger@tugraz.at

ERASMUS+ sowie weitere internationale Aktivitäten 2018

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 2017 folgende Studierende im Rahmen **internationaler Austauschprogramme** am CEET:

Incoming Students		
Grant, WEST	University of Strathclyde	United Kingdom
	University of Strathclyde	United Kingdom
	University of Strathclyde	United Kingdom
Veronica, Dvořáčková	UCT Prague	Czech Republik
Julio, HILGERT	UTwente	TheNetherlands

Vom CEET fanden im Jahr 2017 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 14.1. bis 17.1.2018 und an der Universität Budapest vom 03.10. bis 06.10.2018. Umgekehrt waren Frau Prof. Edit Szekely von der Universität Budapest vom 22.5. bis 25.5.2018 sowie Herr Prof. Marcus Petermann von der Ruhr Universität Bochum vom 23.5. bis 25.5.2018 an der TU Graz. Deren Vorlesungen wurden in der Lehrveranstaltung "Verfahren mit überkritischen Fluiden" integriert und stellen somit auch einen Teil der Prüfung dar.

CEET konnte 2018 folgende internationale Vortragende für Vorträge bzw. Vorlesungen gewinnen:

Incoming Professors		
Alberto, REIS	LNEG, Lisbon	Portugal
Mihaela, COSNITA	University of Brasov	Romania
Ileana, MANCILULEA	University of Brasov	Romania
Outgoing Professors		
Ao.Prof.Dr. Thomas GAMSE	Ruhr Universität Bochum	Deutschland
Ao.Prof.Dr. Thomas GAMSE	Budapest University of Technology and Economics	Ungarn

Fragen und Anregungen bitte an:

Thomas Gamse

Tel.: +43 (316) 873 -7477

E-Mail: Thomas.Gamse@tugraz.at

"The European Summer School in High Pressure Technology (ESS-HPT 2018)"

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 8.7. bis 16.7.2018 an der Universität Maribor, Slowenien, und vom 16.7. bis 22.7.2018 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 2018 beim Welcome Dinner in Maribor / SI

An dieser 14 tägigen Summer School nahmen 18 Studierende aus 10 unterschiedlichen Nationen teil. Die Vorlesungsinhalte wurden von den ProfessorInnen der 18 Partneruniversitäten sowie von 2 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) 978-3-85125-619-2) 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 Industriebesichtigungen 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 2019 wird im Zeitraum vom 7.7.2019 bis 21.7.2019 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

"Prozessintensivierungs-Task-Force: Konferenzen und deren Highlights"

Annika Grafschafter

Auch dieses Jahr durfte die „Prozessintensivierungs-Task-Force“ auf nationalen wie auch internationalen Konferenzen aktuelle Forschungsergebnisse präsentieren und verteidigen. Zu Beginn des Jahres ging es unter eisigsten Zuständen zur *Jahrestagung der Fluidverfahrenstechnik* in München. Diese wurde mit einer Präsentation und einem Poster bestückt. Anschließend ging es für einige zum Präsentieren zum *Jahrestreffen der Extraktion* nach Frankfurt. Andere durften sich stattdessen in etwas wärmere Regionen begeben und die *COST Action 2018* in Thessaloniki besuchen. Wir waren mit einer Präsentation, einer Kurzpräsentation und einer Posterpräsentation vertreten.



Abb. 1: TeilnehmerInnen der TU Graz an der COST Action 2018 in Thessaloniki, Griechenland (die harte Arbeit auf der Konferenz wurde mit einem Besuch in Athen belohnt)

Im Laufe des Sommers ging es mehrere Male in unser geliebtes Nachbarland, Deutschland. Dort wurde das alljährlich stattfindende *Jahrestreffen Reaktionstechnik* in Würzburg und die *ProcessNet-Jahrestagung* in Aachen mit insgesamt 4 Präsentationen sowie 4 Posters „versorgt“. Das Highlight während der Sommermonate war jedoch der Besuch der *ACHEMA*, der größten Verfahrenstechnik/Chemieanlagenbau-Messe in Europa. Dort konnten wir mit unseren zwei Schaustücken

und insgesamt 6 Präsentationen unser gesammeltes Wissen unter die Leute bringen. Ein ausführlicher Bericht über die *ACHEMA 2018* befindet sich im darauffolgenden Abschnitt dieser Broschüre.

Im Herbst ging es für die Forschungsgruppe wiederholt in den Westen. Erster Halt war in Gatlinburg, Tennessee, um die bereits seit 1985 besuchte Konferenz *Symposium on Separation Science & Technology for Energy Applications* zum vielleicht letzten Mal (?) zu besuchen. Vertreten waren wir dort mit einer Präsentation sowie vier Posters, wobei es auch gelang den *Best Poster Award* zu gewinnen. Somit konnten wir aufzeigen dass auch das kleine Österreich international erfolgreich ist.



Abb. 2: Best Poster Award, Gatlinburg, Tennessee

Nach dem Besuch in Gatlinburg folgte das jährlich stattfindende *Annual Meeting of the American Institute of Chemical Engineers (AIChE)* in Pittsburgh, Pennsylvania. Auch dort konnte das ICVT mit etlichen Beiträ-

gen glänzen. Insgesamt durften tatsächlich 7 Mitarbeiterinnen und Mitarbeiter ihre Forschungsergebnisse präsentieren. Auch ein hübsches Poster war dabei. Als krönenden Abschluss der intensiven Woche ging es zum Krabben schmausen in Joe's Crab Shack.



Abb. 3: Der Chef und seine Helferleins beim Krabben schmausen in Joe's Crab Shack

Zum Abschluss des Jahres ging es in die andere Himmelsrichtung. Nach einem kurzen Stopp im Heimatland zum Wäsche waschen ging es weiter zur 8th *International Conference (ITiChE)* des *Thai Institute of Chemical Engineering and Applied Chemistry* in Pattaya, Thailand. Dort war die Forschungsgruppe mit insgesamt vier Präsentationen vertreten und räumte dabei gleich

zwei *Best Presentation Awards* ab. Es konnte durchaus mehrfach demonstriert werden, dass unser Institut mit anderen Universitäten auch international mithalten kann.



Abb. 4: Verleihung des wohlverdienten *Best Presentation Award*

Zusammengefasst wurde hart gearbeitet, es konnten neuen Anregungen für weitere Forschungsschritte gesammelt werden, und es wurden wichtige Kontakte zu anderen Universitäten und Firmen geknüpft. Die TU Graz war auf internationaler Ebene zweifellos stark vertreten.

Fragen und Anregungen bitte an:
Annika Graftschafner
Tel.: +43 (316) 873 -4977
E-Mail: a.graftschafner@tugraz.a

Das war die AICHEMA 2018

Georg Rudelstorfer

Die Reise beginnt

Von 11.06 bis 15.06.2018 war es wieder so weit. Die AICHEMA in Frankfurt ist schlichtweg das Event für alle VerfahrenstechnikerInnen. Wochen der Vorbereitung und Finalisierung der Ausstellungsstücke waren am Freitag den 8.06.2018 bereits Geschichte. Der Transporter wurde unter dem Aspekt der Ladungssicherung eingeräumt und die Reise konnte beginnen. Am Samstag in der Früh fuhren wir, Georg Rudelstorfer und Sebastian Dohr, mit der wertvollen Fracht nach Frankfurt. Nach einer anstrengenden 8 stündigen Autofahrt, welche durchzogen von Sonnenschein und Platzregen war, kamen wir endlich in Frankfurt an. Fast zeitgleich wurde das restliche Aufbauteam, bestehend aus Anika Graftschaffer und Daniela Painer, eingeflogen.



Abb. 1: Georg Rudelstorfer kurz nach der Ankunft in Frankfurt.

Aufbau

Somit konnte der Aufbau beginnen. Alle Komponenten der Ausstellungsstücke hatten die Autofahrt glücklicherweise unbeschadet überstanden. Bis tief in die Nacht hinein waren wir mit dem Standaufbau und mit der Inbetriebnahme der Extraktoren beschäftigt. Der Aufbau klappte dank der ausgezeichneten Organisation im Vorfeld und dem hervorragenden Teamgeist wie am Schnürchen. Somit konnten wir um 2 Uhr früh mit

gutem Gewissen endlich das Bett aufsuchen und noch einmal ausschlafen, bevor der Messebetrieb für fünf Tage in Folge auf Hochtouren unsere Kondition beanspruchte.

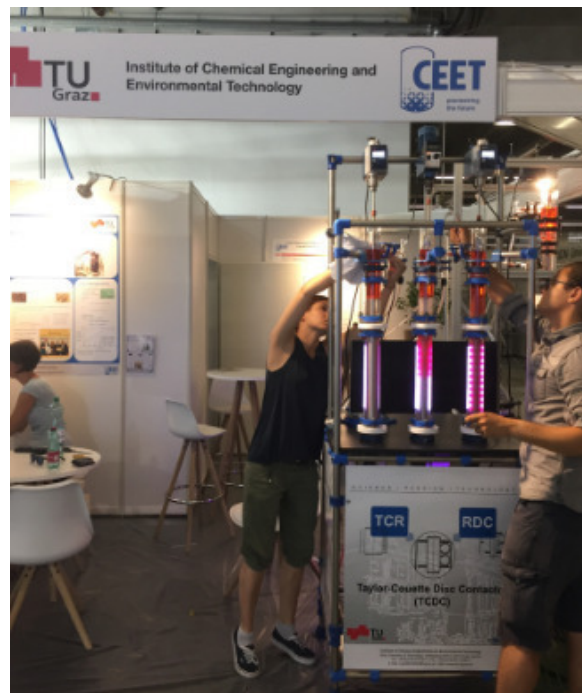


Abb. 2: Standaufbau bis tief in die früher Morgenstunden

Da wir am Samstag bereits Fleißig waren und der Aufbau so unkompliziert von statten ging, konnten wir es am nächsten Tag etwas ruhiger angehen lassen. Nach ausreichend Schlaf begannen wir den Messestand zu dekorieren und konnten uns vor Eintreffen der Nachhut, welche aus Matthäus Siebenhofer und Peter Letonja bestand, bereits Gedanken machen, welche Aussteller wir besuchen werden. Das Resultat der schweren Arbeit konnte sich blicken lassen. Bei einem Gläschen Sodazitrone wurden schlussendlich die Pläne für die Woche geschmiedet.



Abb. 3: Unser gelungener Messestand. Die harte Arbeit hat sich gelohnt!



Abb. 4: Lagebesprechung nach erfolgreichem Aufbau.

Die Messe

Auf der Achema gibt es immer jede Menge spannende Dinge zu entdecken. Virtual Reality ist gerade in aller Munde und so kam es, dass unser Technikumsleiter Peter Letonja nicht umhinkam, diese neue Technik zu testen. Mit viel Geschick leitete er den CIP Prozess eines Rührkessels ein und beobachtete, was passiert.



Abb. 5: Technikumsleiter Dr. Peter Letonja testet Virtual Reality

Neben der Standbetreuung wurden natürlich auch Vorträge über die aktuellen Forschungsthemen unseres Institutes gehalten. Da so ein Messebetrieb mit relativ viel Zeitaufwand verbunden ist, wurde jede freie Minute für die Vorbereitung verwendet. Abwechselnd wurde das Hinterzimmer unseres Standes zur Vortragsvorbereitung genutzt.



Abb. 6: Dipl. Ing Annika Graftschatter bei der Vortragsvorbereitung

Durch die ausgeklügelte Schichteinteilung für die Standbetreuung war es möglich, sich auch abseits des Institutsstandes mit Firmen zu vernetzen und neue Projekte und mögliche Kooperationen zu besprechen. Unsere extra für die Achema mit LED Beleuchtung ausgestatteten Extraktoren verfehlten ihre Wirkung in keinsten Weise. Unzählige Visitenkarten wurden ausgetauscht und die Abende wurden für interdisziplinäre Vernetzung genutzt. Ab Mittwoch bekamen wir Unterstützung durch die Exkursionsgruppe der Grazer Verfahrenstechnik-Studierenden. Donnerstag war auch schon der letzte Ausstellerabend, der sich in eine unvergessliche Nacht verwandeln sollte.



Abb. 7: Letzter Ausstellerabend mit den Grazer Verfahrenstechnik Studierenden

Wir können stolz auf eine anstrengende und Ereignisreiche Woche zurückblicken, die dank vereinter Kräfte absolut reibungsfrei und perfekt ablief. Die Achema ist nicht nur irgendeine Messe. Die Achema zeigt, was in der Welt der Verfahrenstechnik alles möglich ist. Spezialisten aus aller Welt präsentieren ihr Knowhow und gestalten einen Einblick in die Zukunft der Verfahrenstechnik. Diese Messe bietet eine einzigartige Möglichkeit Kontakte und Erfahrungen auszutauschen.

Abbau

Genauso schnell wie alles begann war es auch schon wieder zu Ende. Das Abbauteam schaffte es bereits am Freitagabend alles abzubauen und den Transporter zu beladen. Nach getaner Arbeit gab es noch ein kleines Abschiedsessen, nachdem wir müde aber glücklich die Heimreise antreten durften.



Abb. 4: Abschiedsessen in Frankfurt. Das Abbauteam bedankt sich herzlichst bei allen Mitwirkenden.

Wir blicken gespannt Richtung Zukunft und freuen uns bereits auf die Achema 2021. Der/die eine oder andere vom Achema Team 2018 wird vielleicht wieder dort sein, denn die aktive Teilnahme an der Achema ist für unser Institut eine Selbstverständlichkeit.

Awards, Familiäres und allerlei Statistik

Energy Globe Styria Award

Das Projekt *Reduzierende Kalzinierung* unter der Leitung von Susanne Lux in Kooperation mit der voestalpine Stahl GmbH und der VA Erzberg GmbH konnte sich in diesem Jahr den Landespreis „Energy Globe Styria Award“ in der Kategorie „Forschung“ sichern.

Liebe Susi, wir gratulieren euch vom ganzen Herzen!



Abb. 1: Georg Baldauf-Sommerbauer, Susanne Lux, Matthäus Siebenhofer erhalten den Energy Globe von LR Anton Lang © Werner Krug

Stars of Styria 2018

Besonders freuen wir uns über die Auszeichnung von Sarah Kunihs, ausgebildet von Herta Luttenberger, zum „Stars of Styria“. Diese ehrenvolle Auszeichnung bekommt nur, wer die Lehrabschluss- oder Meisterprüfung mit Auszeichnung besteht.

Liebe Sarah, gratuliere zum Erfolg!



Abb. 1: Sarah und Herta mit ihrem goldenen Stern

Familiäres

Jedoch was das Jahr 2018 nicht nur aus Sicht der Forschung sehr erfolgreich für das CEET, auch in privater Hinsicht war es für einige Mitarbeiterinnen und Mitarbeiter ein tolles Jahr. Das Jahr 2018 war hinsichtlich der Geburtenrate äußerst fruchtbar, denn bis zum Redaktionsschluss konnten fünf neue Sprösslinge in der CEET-Community begrüßt werden.

Den Anfang machte Ella, die am 03.04.2018 das Licht der Welt erblickte und seither ihren Eltern Tim Zeiner und Veronika sehr viel Freude bereitet.

Seit 27.07.2018 erfreuen sich Ilena und Christoph Grimmer über ihren Sonnenschein Rosalie.

Nur zwei Tage später konnte sich die CEET-Familie erneut über Zuwachs freuen, denn 29.07.2018 erblickte die entzückende Isabella das Licht der Welt und hält seither ihre Eltern, Nikolaus Schwaiger und Anna auf Trapp. Die neue Spielkameradin wurde auch von ihrem großen Bruder Theodor sehnhelbst erwartet.

Ebenso dürfen sich Peter Scherübel und seine Eva seit 21.10.2018 über ihren Sohn Maximilian als neues Familienmitglied freuen.

Komplettiert wird die CEET-Familie in diesem Jahr mit der Geburt von Adrian, der seit 05.12.2018 das Leben von Patrick Zimmermann und seiner Lorena vervollständigt.

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

DoktorandInnen 2018

Das CEET gratuliert den Promovierten Peter Scherübel, Ilena Grimmer, Nuttakul Mungma und Birgit Pichler herzlich zum Dokortitel und wünscht alles Gute für den weiteren Lebensweg.

Neue Mitarbeiter 2018

Name	Stelle
Silvia Maitz	Projektassistentin
Andrea Jany	Projektassistentin
Ingrid Eisl	Projektassistentin
Fabian Zapf	Projektassistent
Sascha Kleiber	Projektassistent

Die wichtigste Mitarbeiterin ist jedoch Nika. Die ständige Wegbegleiterin von Sascha Kleiber ist Expertin für „Socialising Affairs“. Sie ist bereits jedem am Institut ans Herz gewachsen.



Abb. 2: Nika, eine Expertin für „Socialising Affairs“

Statistisches

Im Wintersemester 2017/18 waren insgesamt 17751 Studierende an der TU Graz inskribiert. Davon waren 460 im Bachelorstudium und 109 im Masterstudium der Verfahrenstechnik gemeldet, wobei sich 11 StudentInnen für das neue Masterstudium ‚Biorefinery Engineering‘ entschieden haben. Unter den Verfahrenstechniker gab es 23 % weibliche und 77 % männliche Studierende. Der Anteil an ausländische Studenten beträgt 11 %. Im WS 2017/18 haben sich 59 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 WS 2017/18 und im SS 2018 insgesamt 16 Master of Science „erzeugt“.

Abschlussarbeiten 2018

Masterarbeiten

Investigation of the curing behaviour of bio-based adhesives and the application in automotive industry (Marion Prietl) - Kienberger, Marlene; Ass.Prof. Dipl.-Ing. Dr.techn.

Development of Black-box Models for Industrial-scale Steam Crackers (Fabian Zapf) - Wallek, Thomas; Ass.Prof. Dipl.-Ing. Dr.techn.

Ermittlung des Säuretaupunktes im Rauchgas des Kraftwerkes der voestalpine Stahl GmbH (Andreas Niederhauser) - Siebenhofer, Matthäus; Univ.-Prof. Dipl.-Ing. Dr.techn.

Holistic Evaluation of Operational Concepts for a Production Network Under Varied Market Conditions (Sascha Kleiber) - Wallek, Thomas; Ass.Prof. Dipl.-Ing. Dr.techn.

Niederdruck-Hydrodeoxygenierung von Flüssigphasenpyrolyseöl (Mario Lukasch) - Schwaiger, Nikolaus; Priv.-Doz. Dipl.-Ing. Dr.techn.

Estimation of Solubility of Solids and Liquids in Supercritical Carbon Dioxide (Mojca Krainc) - Wallek, Thomas; Ass.Prof. Dipl.-Ing. Dr.techn.

Optimierung des Reformierungsprozesses für den Reformier-Eisen-Dampf-Zyklus (RESC) zur dezentralen Produktion und Speicherung von Wasserstoff (Verena Martschitsch) - Hacker, Viktor; Assoc.Prof. Dipl.-Ing. Dr.techn.

Pervaporative Trennung von binären und ternären Gemischen aus der Estersynthese (Nikolaus Tauß) - Lux, Susanne; Ass.Prof. Dipl.-Ing. Dr.techn.

Niederdruck-Co-Hydrodeoxygenierung von Erdölraffinationsintermediaten und Flüssigphasenpyrolyseöl (Samir Reiter) - Schwaiger, Nikolaus; Priv.-Doz. Dipl.-Ing. Dr.techn.

Entwicklung eines dynamischen Misch- und Restgasnetzmodells in KBC PetroSIM (Markus Eschlböck) - Wallek, Thomas; Ass.Prof. Dipl.-Ing. Dr.techn.

Electrodialytic Recovery of Organic Acids from Kraft Black Liquor and Analysis with HPIC (Ingrid Eisl) - Kienberger, Marlene; Ass.Prof. Dipl.-Ing. Dr.techn.

Verfahrensvariation zur Optimierung der Phospholipid-Gewinnung aus Eigelb (Sebastian Schrittwieser) - Gamse, Thomas; Ao.Univ.-Prof. Dipl.-Ing. Dr.techn.

Sprühtrocknung als Alternativverfahren zur Lyophilisation für biotechnologische Einsatzstoffe in der Diagnostik (Christin Pirmann) - Gamse, Thomas; Ao.Univ.-Prof. Dipl.-Ing. Dr.techn.

Characterization and stability investigation of platinum and palladium free cathode catalysts for a direct ethanol fuel cell (Paul Zorn) - Hacker, Viktor; Assoc.Prof. Dipl.-Ing. Dr.techn.

Kontinuierliche Fällung von Lignin aus Schwarzlauge und Sedimentation des Lignins aus der Suspension (Alexander Kathrein) - Kienberger, Marlene; Ass.Prof. Dipl.-Ing. Dr.techn.

Technologies for treatment of API contaminated waste waters (Larissa Kolb) - Siebenhofer, Matthäus; Univ.-Prof. Dipl.-Ing. Dr.techn.

Dissertationen

Turbidity Control (Robert Macher Ambrosch) - Siebenhofer, Matthäus; Univ.-Prof. Dipl.-Ing. Dr.techn.

Development and optimization of precious metal free electrodes for alkaline fuel cells (Ilena Grimmer) - Hacker, Viktor; Assoc.Prof. Dipl.-Ing. Dr.techn.

Mysterium Methanol Ein ständiger Begleiter im Obstbrand? (Peter Scherübel) - Siebenhofer, Matthäus; Univ.-Prof. Dipl.-Ing. Dr.techn.

The Kinetics and Mechanisms of Fouling in Crude Oil Heat Transfer (Elisabeth Rammerstorfer) - Siebenhofer, Matthäus; Univ.-Prof. Dipl.-Ing. Dr.techn.

Reactive extraction of lactic acid from acidic and alkaline aqueous solution with supported liquid membrane permeation (Nuttakul Mungma) - Siebenhofer, Matthäus; Univ.-Prof. Dipl.-Ing. Dr.techn.

Development of Stable Bifunctional Air Electrodes for Oxygen Electrocatalysis in Zinc-Air Flow Batteries (Birgit Pichler) - Hacker, Viktor; Assoc.Prof. Dipl.-Ing. Dr.techn.

Catalytic Processing of Biofuels in Diesel Exhaust Gas (Micheal Derntl) - Siebenhofer, Matthäus; Univ.-Prof. Dipl.-Ing. Dr.techn.

Veröffentlichungen

Publikationen

- S. Bock, R. Zacharias, V. Hacker, 'High purity hydrogen production with a 10kWth RESC prototype system.' *Energy conversion and management*, 172, 418-427. DOI: 10.1016/j.enconman.2018.07.020
- S. Bock, R. Zacharias, R. Schauerperl, J. Rechberger, F. von Hofen, G. Voitic, V. Hacker, 'Hydrogen Production and Storage by Oxidation and Reduction of Iron-based Oxygen Carriers.' In *Proceedings of 7th Transport Research Arena TRA 2018 Zenodo*. DOI: 10.5281/zenodo.1487656
- S. Bock, R. Zacharias, V. Hacker, 'High Purity Hydrogen Production in a 10 kWth Fixed Bed RESC Prototype System.' Abstract from 2018 AIChE Annual Meeting, Pittsburgh, United States.
- S. Bock, R. Zacharias, V. Hacker, 'The production of pressurized, high purity hydrogen with the fixed bed RESC process.' In *Chemical Looping 2018 [4C]*
- B. Cermenek, V. Hacker, 'Ethanol to Power.' In W. M. Samhaber, S. Schneiderbauer, & M. Rezaei (Eds.), *Minisymposium Verfahrenstechnik 2018: Book of Abstracts* (1 ed., pp. Poster 1.2). Johannes Kepler University, Linz : Johannes Kepler Universität Linz.
- A. Graftschafter, G. Rudelstorfer, M. Siebenhofer, 'Hydraulics and Operation Performance of TCDC-Extractors' *Chemie-Ingenieur-Technik*, 90(6), 864-871. DOI: 10.1002/cite.201800031
- V. Hacker, B. Cermenek, 'Enhanced ethanol oxidation reaction in alkaline direct alcohol fuel cells.' In P. Kulesza, L. Adamczyk, & I. Szaniawska (Eds.), *International Symposium on Electrocatalysis - Book of Abstracts: Recent Advances in Electrocatalysis and Photoelectrocatalysis* (pp. 40-41). Szczryk, Poland.
- V. Hacker, J. Ranninger, B. Cermenek, B. Feketeföldi, C. Spirk, J. Hesse, V. Ribitsch, 'Optimization of the Catalyst and Membrane Performance by addition of various Additives for the alkaline Direct Ethanol Fuel Cell.' *Transport Research Arena 2018*, Wien, Austria.
- M. Kienberger, M. Hackl, M. Siebenhofer, 'Recovery of acetic acid using esterification of acetic acid with n-octanol in a membrane reactor.' *Journal of Environmental Chemical Engineering*, 6(2), 3161-3166. DOI: 10.1016/j.jece.2018.05.002
- M. Kienberger, M. Hackl, M. Siebenhofer, 'Emulsion prevention with supported liquid membrane permeation.' *Chemical Engineering & Technology* 41/3. 2018, 504-508. doi:10.1002/ceat.201700484
- K. Kocher, V. Hacker, 'Catalyst development to mitigate start-stop induced degradation in polymer electrolyte fuel cells.' 4th International Workshop on Hydrogen and Fuel Cells as part of the 11th International Summer School on Advanced Studies of PEFCs, pp. 21-22, 23/08/2018, Graz, Austria
- D. Ladenhaufen, K. Malli, V. Hacker, 'Steam reforming of bioethanol-gasoline mixtures.' Abstract sfrom 4th International Workshop on Hydrogen and Fuel Cells as part of the 11th International Summer School on PEFCs, Graz, Austria
- M. Lammer, A. Königseder, P. Gluschitz, V. Hacker, 'Influence of aging on the heat and gas emissions from commercial lithium ion cells in case of thermal failure.' *Journal of Electrochemical Science and Engineering: 6th RSE SEE Special Issue*. Vol. 8 1. ed. 2018. p. 101-110.
- M. Lammer, A. Königseder, P. Gluschitz, V. Hacker, A. Golubkov, C. Essl, R. Planteu, B. Rasch, N. S. Köster, F. Pichler, A. Thaler, S. Seger, 'Holistic characterisation of cylindrical lithium ion cells by thermal ramp experiments and simulation of failure scenarios.' *Proceedings of 7th Transport Research Arena TRA 2018*. Vienna, 2018.
- K. Malli, V. Hacker, 'Characterization of monolithic catalysts used for ethanol steam reforming.' 14th Minisymposium *Chemical and Process Engineering*, Austria, 04/04/2018
- K. Malli, D. Ladenhaufen, V. Hacker, 'Experimental set-up for ethanol steam reforming.' Abstract sfrom 4th International Workshop on Hydrogen and Fuel Cells as

part of the 11th International Summer School on PEFCs, Graz, Austria.

N. Mungma, M. Kienberger, T. Kracic, M. Siebenhofer, 'Reactive Extraction of lactic acid from alkaline aqueous solution with an ammonium-based ionic liquid.' *International Journal of Research in Engineering and Science (IJRES)* 6/8. 2018. 30-38

D. Painer, S. Lux, M. Siebenhofer, 'Reaktivdestillation zur Isolierung biobasierter Nebenprodukte aus Abwasserströmen.' *Chemie-Ingenieur-Technik*, 90(9), 1149-1149. DOI: 10.1002/cite.201855036

B. Pichler, B.S. Berner, N. Rauch, C. Zelger, H.-J. Pauling, B. Gollas, V. Hacker, 'The impact of operating conditions on component and electrode development for zinc-air flow batteries.' *Journal of Applied Electrochemistry* (2018). doi:10.1007/s10800-018-1233-z.

B. Pichler, K. Mayer, V. Hacker, 'Long-term Operation of Perovskite-catalyzed Bifunctional Air Electrodes in Rechargeable Zinc-Air Flow Batteries.' *Batteries & Supercaps*, (2018) doi:10.1002/batt.201800094

B. Pichler, V. Hacker, C. Zelger, W. Taucher-Mautner, B. Gollas, H. J. Pauling, 'Development of zinc-air flow batteries by investigating compact zinc deposition and improving air electrode cycling stability.' *Proceedings of 7th Transport Research Arena, Vienna, Austria* (2018)

A. Schenk, B. Cermenek, V. Hacker, 'Other Polymer Electrolyte Fuel Cells.' In V. Hacker, & S. Mitsushima (Eds.), *Fuel Cells and Hydrogen: From Fundamentals to Applied Research* (pp. 91-115). Amsterdam: Elsevier B.V.. DOI: 10.1016/B978-0-12-811459-9.00005-0 Other Polymer Electrolyte Fuel Cells

K. Treusch, N. Schwaiger, K. Schlackl, R. Nagl, R., A. Rollett, M. Schadler, B. Hammerschlag, J. Ausserleitner, A. Huber, P. Pucher, M. Siebenhofer, 'High Throughput Continuous Hydrodeoxygenation of Liquid Phase Pyrolysis Oil' *Reaction Chemistry and Engineering*, 2018, 3, 258-266; DOI: 10.1039/c8re00016f

K. Treusch, N. Schwaiger, K. Schlackl, R. Nagl and P. Pucher, 'Temperature Dependence of Single Step Hydrodeoxygenation of Liquid Phase Pyrolysis Oil' *Frontiers in Chemistry*, 2018, 6:297

T. Wallek, K. Knöbelreiter, J. Rarey, 'Estimation of Pure-Component Properties of Biodiesel-Related Components: Fatty Acid Ethyl Esters.' *Ind. Eng. Chem. Res.* 2018, 57, 3382–3396. DOI: 10.1021/acs.iecr.7b03794

T. Wallek, C. Mayer, A. Pfennig, 'Discrete Modeling Approach as a Basis of Excess Gibbs-Energy Models for Chemical Engineering Applications.' *Ind. Eng. Chem. Res.* 2018, 57 (4), 1294-1306. DOI: 10.1021/acs.iecr.7b04415

R. Zacharias, S. Bock, V. Hacker, 'Wasserstoff aus Biomasse – Staatspreis für Mobilität 2017.' *Biobased future*, Vol. April 2018, No. 9, 01.04.2018, p. 14-14.

R. Zacharias, 'The reformer steam-iron cycle for high purity hydrogen production.' *HydrogenDays2018: Book of Abstracts*. ed. / Karel Bouzek. 1. ed. Prague, 2018. p. 47-47 L23.

R. Zacharias, S. Bock, V. Hacker, 'Improvement of iron based oxygen carriers for chemical looping hydrogen.' 2018, Poster session presented at Minisymposium Verfahrenstechnik 2018, Linz, Austria.

R. Zacharias, S. Bock, V. Hacker, 'High Pressure Hydrogen Generation and Simultaneous Carbon Dioxide Separation with Chemical Looping Hydrogen' *Abstract from 2018 AIChE Annual Meeting, Pittsburgh, United States*.

Beitrag in Buch/Bericht

A. Friedl (ed.), J. J. Klemeš (ed.), S. Radl (ed.), P. Varbanov (ed.), T. Wallek (ed.): *28th European Symposium on Computer Aided Process Engineering (ESCAPE): Proceedings of ESCAPE28, Jun 2018, Elsevier B.V.* (Computer Aided Chemical Engineering), 1764 p.

T. W. Napporn, Y. Holade, B. Kokoh, S. Mitsushima, K. Mayer, B. Eichberger, V. Hacker, 'Electrochemical Measurement Methods and Characterization on the Cell Level' 19 Jul 2018 *Fuel Cells and Hydrogen: From Fundamentals to Applied Research*. Hacker, V. & Mitsushima, S. (eds.). Amsterdam: Elsevier B.V., p. 175-214

G. Voitic, B. E. Pichler, A. Basile, A. Iulianelli, K. Malli, S. Bock, V. Hacker, 'Hydrogen Production.' In V.

Hacker, & S. Mitsuhashi (Eds.), Fuel Cells and Hydrogen: From Fundamentals to Applied Research (pp. 215-242). Amsterdam: Elsevier B.V.. DOI: 10.1016/B978-0-12-811459-9.00010-4

Vorträge

S. Bock, V. Hacker, R. Zacharias, 'Wasserstoff als Energiespeicher' Energietage 2018, Austria, 15/11/2018

S. Bock, R. Zacharias, V. Hacker, 'High Purity Hydrogen Production in a 10 kWth Fixed Bed RESC Prototype System' 2018 AIChE Annual Meeting, USA, 28/10/2018→2/11/2018

B. Cermenek, V. Hacker, 'Enhanced ethanol oxidation reaction in alkaline direct alcohol fuel cells' International Symposium on Electrocatalysis, Poland, 31/08/2018

A. Graftschafter, M. Siebenhofer, 'The Taylor-Couette Disc Contactor: heterogeneously catalyzed reaction with liquid-liquid extraction' ACHEMA 2018, Germany, 10/06/18→14/06/18

A. Graftschafter, M. Siebenhofer, 'Heterogeneously catalyzed conversion combined with solvent extraction: An inventive approach for isolating dilute constituents' ProcessNet-Jahrestagung und 33. DECHEMA-Jahrestagung der Biotechnologen 2018, Germany, 10/09/18→13/09/18

A. Graftschafter, M. Siebenhofer, 'Hydraulics of Taylor-Couette Disc Contactors' 2018 AIChE Annual Meeting, USA, 28/10/18→2/11/18

A. Graftschafter, M. Siebenhofer, 'The Taylor-Couette Disc Contactor: heterogeneously catalyzed reaction with liquid-liquid extraction' 8th International Thai Institute of Chemical Engineering Conference and Applied Chemistry Conference, Thailand, 8/11/18→9/11/18

V. Hacker, 'Fuel Cell Technology' Workshop on the use of alternative energies in Colombia, Colombia, 02/11/2018

V. Hacker, 'Wasserstoff für Mobilität und Stromerzeugung' Schulen gegen Luftverschmutzung, Austria, 30/11/2018

V. Hacker, 'Suthida Authayanun' Srinakharinwirot University, Department of Chemical Engineering, Thailand, 01/07/2018→30/06/2018

V. Hacker, 'On-site renewable hydrogen production' Transport Research Arena 2018, Austria, 16/04/2018

V. Hacker, 'Technical challenges for the mobility with fuel cells' 1st International Conference on Intelligent Transportation Systems, Turkey, 19/04/2018

V. Hacker, 'Lifetime of Fuel Cells' Universidad de La Sabana, Colombia, 02/11/2018

V. Hacker, S. Bock, R. Zacharias, 'The production of pressurised, high purity hydrogen with the fixed bed RESC process' International Conference on Chemical Looping, USA, 26/09/2018

V. Hacker, S. Bock, R. Zacharias, 'Decentralized hydrogen production from renewable resources - the reformer steam iron cycle' European Technology and Innovation Platform Bioenergy Workshop Emerging Technologies, Belgium, 04/06/2018

V. Hacker, K. Mayer, S. Weinberger, 'Equivalent circuit based analysis and simulation of fuel cells' Workshop on Control and Validation of Alternative Powertrain Systems, Austria, 06/06/2018

M. Kienberger, 'Reactive extraction of lactic acid from highly alkaline process streams' DIT – eseia Conference on Smart Energy Systems in Cities and Regions, Ireland, 10/04/2018

M. Kienberger, 'Bioresourcing for Cities & Regions' DIT – eseia Conference on Smart Energy Systems in Cities and Regions, Ireland, 10/04/2018

M. Kienberger, 'Emulsion prevention using liquid membrane permeation with supported membranes' Jahrestreffen der ProcessNet Fachgruppen Extraktion und Rohstoffe, 2018

A. Loder, S. Lux, M. Siebenhofer, 'Einfluss von Nickel auf einen MgO-Katalysator für die CO₂-Hydrierung', ProcessNet-Jahrestagung und 33. DECHEMA-Jahrestagung der Biotechnologen 2018, Germany, 10/09/2018→13/09/2018

- A. Loder, S. Lux, M. Siebenhofer, 'CO₂ hydrogenation during FeCO₃ (Siderite) reduction', ACHEMA 2018, Germany, 10/06/2018→14/06/2018
- A. Loder, S. Lux, M. Siebenhofer, 'Catalytic CO₂ methanation with Ni/MgO', Minisymposium Verfahrenstechnik 2018, Austria, 04/04/2018
- C. Mayer, A. Pfennig, T. Wallek, 'A discrete modeling approach for excess Gibbs-energy models based on discrete Markov-chains.' CHISA 2018, Czech Republic, 25/08/2018→29/08/2018
- D. Painer, S. Lux, M. Siebenhofer, 'Reactive distillation for solvent regeneration; homogeneous vs. heterogeneous catalysis' 8th International Thai Institute of Chemical Engineering Conference and Applied Chemistry Conference, Thailand, 8/11/18→9/11/18
- D. Painer, S. Lux, M. Siebenhofer, 'Reactive distillation combined with pervaporation for biobased by-product recovery' 2018 AIChE Annual Meeting, USA, 28/10/18→2/11/18
- D. Painer, S. Lux, M. Siebenhofer, 'Reaktivdestillation zur Isolierung biobasierter Nebenprodukte aus Abwasserströmen' ProcessNet-Jahrestagung und 33. DECHEMA-Jahrestagung der Biotechnologen 2018, Germany, 10/09/18→13/09/18
- D. Painer, S. Lux, M. Siebenhofer, 'Reactive Separations in Wastewater Treatment for Recovery of Byproducts' ACHEMA 2018, Germany, 10/06/18→14/06/18
- D. Painer, S. Lux, M. Siebenhofer, 'Das Potenzial der Reaktivextraktion zur Lösung von Trennproblemen in der Bioraffinerie' Jahrestreffen der ProcessNet Fachgruppen Extraktion und Rohstoffe, Germany, 12/03/18→14/03/18
- D. Painer, S. Lux, M. Siebenhofer, 'Einsatz von Reaktivdestillation und Pervaporation zur Isolierung biobasierter Chemikalien' Jahrestreffen der ProcessNet-Fachgruppen Fluid-verfahrenstechnik, Membrantechnik und Mischvorgänge, Germany, 27/02/18→28/02/18
- D. Painer, S. Lux, M. Siebenhofer, 'Trennung azeotroper Gemische mit Pervaporation' 44. Tief-Temperatur-Thermodynamik Kolloquium, 10/02/18→17/02/18
- B. Pichler, V. Hacker, C. Zelger, W. Taucher-Mautner, B. Gollas, H. J. Pauling, 'Development of zinc-air flow batteries by investigating compact zinc deposition and improving air electrode cycling stability' 7th Transport Research Arena, Austria, 2018
- N. Schwaiger, P. Pucher, K. Treusch, E. Ahn, M. Siebenhofer, 'Downstream Processing of Liquid Products of the BioCRACK Process with Refinery Unit Operations' FASTCARD seminar, Spain, 24/01/2018
- N. Schwaiger, K. Treusch, A. Huber, B. Hammerschlag, J. Ausserleitner, P. Pucher, M. Siebenhofer, 'Co-Processing of Liquid Phase Pyrolysis Oil with Refinery Intermediates for Fuel Production' COST, Greek, 12/03/2018→14/03/2018
- A. Toth, S. Lux, M. Siebenhofer, 'Emulsion-based Isolation of Dilute Carboxylic Acids' 8th International Thai Institute of Chemical Engineering Conference and Applied Chemistry Conference, Thailand, 8/11/2018→9/11/2018
- A. Toth, S. Lux, M. Siebenhofer, 'Process Concept for Isolation of Low Molecular Weight Carboxylic Acids from Dilute Aqueous Feed' AIChE Annual Meeting 2018, USA, 28/10/2018→2/11/2018
- A. Toth, S. Lux, M. Siebenhofer, 'Acetic Acid Esterification in Biphasic Emulsified Systems' ACHEMA 2018, Germany, 10/07/2018→14/06/2018
- A. Toth, S. Lux, M. Siebenhofer, 'Isolation of Dilute Carboxylic Acids from Biobased Effluents through Reactive Extraction with Emulsification' FP 1306 COST Action 2018, 12/03/2018→14/03/2018
- A. Toth, S. Lux, M. Siebenhofer, 'Veresterung in O/W-Emulsionen' 44. Tieftemperatur-Thermodynamik-Kolloquium, 10/02/2018→17/02/2018
- K. Treusch, N. Schwaiger, A. Huber, B. Hammerschlag, J. Ausserleitner, R. Nagl, K. Schlackl, P. Pucher, M. Siebenhofer, 'Co-Hydrodeoxygenation of Liquid Phase Pyrolysis Oil with Refinery Intermediates for Fuel Production' ACHEMA 2018, Germany, 10/07/2018→14/06/2018
- K. Treusch, N. Schwaiger, A. Huber, B. Hammerschlag, J. Ausserleitner, P. Pucher, M. Siebenhofer, 'Simultane Hydrodeoxygenierung von Flüssigphasenpyrolyseöl &

Erdölraffinationsintermediaten zu Treibstoffen mit biogenem Anteil' ProcessNet-Jahrestagung und 33. DECHEMA-Jahrestagung der Biotechnologen 2018, Germany, 10/09/2018→13/09/2018

K. Treusch, N. Schwaiger, P. Pucher, M. Siebenhofer, H. Soprek, L. Kurte, 'Refinery Integrated Hydrocarbon Production – the BioCRACK Process and Liquid Product Upgrading' GOMA Symposium – Fuels, 17/10/2018→19/10/2018

R. Zacharias, S. Bock, V. Hacker, 'High-pressure hydrogen production with inherent carbon dioxide sequestration via chemical looping' 2018 AIChE Annual Meeting, USA, 28/10/2018

R. Zacharias, S. Bock, V. Hacker, 'The reformer steam iron cycle for high purity hydrogen production' HydrogenDays 2018, Czech Republic, 15/08/2018

F. Zapf, F. Pöllabauer, G. Bachmann, T. Wallek, 'A data-based modular modeling concept for a holistic approach to highly cross-linked plants' ACHEMA 2018, Germany, 10/06/2018→14/06/2018

F. Zapf, F. Pöllabauer, T. Wallek, 'A holistic data-based modular modeling concept for production plants with highly cross-linked utility systems' CHISA 2018, Czech Republic, 25/08/2018→29/08/2018

P. Zimmermann, R. Nagl, P. Krenn, T. Zeiner, 'A thermodynamical consistent CFD model for liquid-liquid demixing' European Symposium on Applied Thermodynamics, Czech Republic, 10/06/2018→13/06/2018

P. Zimmermann, T. Zeiner, 'Direct Numerical Simulation of liquid-liquid-Equilibration' CALCON-ICCT 2018, USA, 05/08/2018→10/08/2018

P. Zimmermann, T. Zeiner, 'Thermodynamisch konsistente CFD Modellierung der flüssig-flüssig Entmischung' ProcessNet-Jahrestagung und 33. DECHEMA-Jahrestagung der Biotechnologen 2018, Germany, 10/09/2018→13/09/2018

P. Zimmermann, T. Zeiner, 'Numerische Simulation der flüssig-flüssig Entmischung' Thermodynamik-Kolloquium 2018, Germany, 26/09/18→28/09/18

Poster

S. Bock, R. Zacharias, V. Hacker, 'On-site renewable hydrogen production and storage by oxidation and reduction of iron-based oxygen carriers.' Transport Research Arena 2018, Austria, 09/11/2018

S. Bock, R. Zacharias, V. Hacker, 'Prototype-scale hydrogen production for PEMFC from renewables via chemical looping.' 4th International Workshop on Hydrogen and Fuel Cells as part of the 11th International Summer School on PEFCs, Austria, 23/08/2018

S. Bock, R. Zacharias, V. Hacker, 'Utilization of renewable feedstock for hydrogen production via chemical-looping.' Minisymposium Verfahrenstechnik 2018, Austria, 04/04/2018

B. Cermenek, V. Hacker, 'Ethanol to Power.' Minisymposium Verfahrenstechnik 2018, Austria, 04/04/2018

A. Graftschafter, M. Siebenhofer, 'Multiphase flow for heterogeneously catalyzed reaction with liquid-liquid extraction in the Taylor-Couette Disc Contactor', Jahrestreffen der ProcessNet-Fachgruppen Fluidverfahrenstechnik, Membrantechnik und Mischvorgänge 2018, 27/02/2018→28/02/2018

A. Graftschafter, M. Siebenhofer, 'Taylor-Couette Disc Contactor for heterogeneously catalyzed reaction with liquid-liquid extraction' Jahrestreffen der ProcessNet Fachgruppen Extraktion und Rohstoffe, 12/03/2018→14/03/2018

A. Graftschafter, M. Siebenhofer, 'An innovative approach to isolate constituents from dilute aqueous effluents' FP 1306 COST Action 2018, 12/03/2018→14/03/2018

A. Graftschafter, M. Siebenhofer, 'Taylor-Couette Disc Contactors for liquid-liquid extraction combined with heterogeneously catalysed reaction' Jahrestreffen Reaktionstechnik 2018 for Energy Applications, Germany, 07/05/18→09/05/18

A. Graftschafter, M. Siebenhofer, 'An inventive approach for multiphase reactors', 20th Symposium on Separation Science and Technology for Energy Applications, USA, 21/10/2018→24/10/2018

- V. Hacker, B. Cermenek, J. Ranninger, B. Feketeföldi, C. Spirk, J. Hesse, V. Ribitsch, 'Optimization of the Catalyst and Membrane Performance by addition of various Additives for the alkaline Direct Ethanol Fuel Cell.' Transport Research Arena 2018, Austria, 16/04/2018→19/04/2018
- G. Holzer, T. Wallek, 'Model-based Real-time Prediction of Corrosion in Heat Exchangers.' ESCAPE28, Austria, 10/06/2018→13/06/2018
- G. Holzer, E. Jeitler, T. Wallek, 'A methodology for the model-based real-time prediction of corrosion in heat exchangers.' 14. Minisymposium der Verfahrenstechnik, Austria, 04/04/2018
- K. Kocher, V. Hacker, 'PANI functionalized cathode catalyst toward durable Polymer Electrolyte Fuel Cells' 4th International Workshop on Hydrogen and Fuel Cells as part of the 11th International Summer School on Advanced Studies of PEFCs, Austria, 23/08/2018
- K. Kocher, B. Marius, K. Mayer, V. Hacker, 'Start-up and Shut-down: Degradation in Polymer Electrolyte Fuel Cells' AVL Research Networking Day, Austria, 14/11/2018
- P. Krenn, G. Kaufmann, P. Zimmermann, T. Zeiner, M. Fischlschweiger, 'Modellbildung und experimentelle Verifikation für die Quellung von Polymerverkapslungen bei Mechatronikkomponenten.' Thermodynamik-Kolloquium 2018, Germany, 26/09/2018→28/09/2018
- D. Ladenhaufen, K. Malli, V. Hacker, 'Steam reforming of bioethanol-gasoline mixtures.' 4th International Workshop on Hydrogen and Fuel Cells as part of the 11th International Summer School on PEFCs, Austria, 23/08/2018
- A. Loder, S. Lux, G. Baldauf-Sommerbauer, M. Siebenhofer, 'CO₂ Hydrogenation with Ni/MgO Catalysts' AIChE Annual Meeting 2018, USA, 28/10/2018→2/11/2018
- A. Loder, S. Lux, G. Baldauf-Sommerbauer, M. Siebenhofer, 'Reduction of CO₂ emissions with Ni/MgO catalysed CO₂ hydrogenation' 20th Symposium on Separation Science and Technology for Energy Applications, USA, 21/10/2018→24/10/2018
- A. Loder, S. Lux, G. Baldauf-Sommerbauer, M. Siebenhofer, 'Ni/MgO catalysts for CO₂ methanation' Jahrestreffen Reaktionstechnik 2018, Germany, 07/05/2018→09/05/2018
- K. Malli, V. Hacker, 'Characterization of monolithic catalysts used for ethanol steam reforming.' 14. Minisymposium der Verfahrenstechnik, Austria, 04/04/2018
- K. Malli, D. Ladenhaufen, V. Hacker, 'Experimental set-Up for ethanol steam reforming.' 4th International Workshop on Hydrogen and Fuel Cells as part of the 11th International Summer School on PEFCs, Austria, 23/08/2018
- C. Mayer, T. Wallek, 'A Discrete Modeling Approach for Excess Gibbs-Energy Models on the Basis of Discrete Markov-Chains.' 14. Minisymposium der Verfahrenstechnik, Austria, 04/04/2018
- R. Nagl, J. Alonso-Collada Aza, P. Zimmermann, T. Zeiner, 'Interfacial mass transfer of different target components in liquid-liquid extraction systems.' Thermodynamik-Kolloquium 2018, Germany, 26/09/18→28/09/18
- D. Painer, S. Lux, M. Siebenhofer, 'Energy efficient downstream processing in biorefinery' 20th Symposium on Separation Science and Technology for Energy Applications, USA, 21/10/2018→24/10/2018
- D. Painer, S. Lux, M. Siebenhofer, 'Pervaporation for Product isolation in Methyl acetate Synthesis' Jahrestreffen Reaktionstechnik 2018 for Energy Applications, Germany, 07/05/2018→09/05/2018
- B. Pichler, H.-J. Pauling, V. Hacker, 'Manufacture and Operation of 60 cm² Zinc-Air Flow Batteries with Bifunctional Air Electrodes' 4th International Workshop on Hydrogen and Fuel Cells, Austria, 23/08/2018→23/08/2018
- B. Pichler, N. Rauch, V. Hacker, 'Influence of operating conditions on the long-term performance of bifunctional air electrodes' Second International Zinc/Air Battery Workshop, Norway, 10/04/2018→12/04/2018
- F. Pöllabauer, G. Bachmann, T. Wallek, 'Customized Detailing of Plant Simulations with regard to Different Applications.' ESCAPE28, Austria, 10/06/2018→13/06/2018

A. Samsudin, A. Wulandari, D. Firdaushya, V. Hacker, 'Preparation and characterization of poly(vinylidene fluoride-co-hexafluoropropylene) / fly ash (PVdF-HFP/FA) nanofibrous composite by electrospinning' Electrospinning for Energy 2018, France, 13/06/2018

A. Toth, S. Lux, M. Siebenhofer, 'Nickel-based catalysts for biphasic esterification' 20th Symposium on Separation Science and Technology for Energy Applications, USA, 21/10/2018→24/10/2018

A. Toth, S. Lux, M. Siebenhofer, 'Utilization of Biorefinery Side Products by Reactive Separation' ProcessNet-Jahrestagung und 33. DECHEMA-Jahrestagung, Germany, 10/09/2018→13/09/2018

A. Toth, S. Lux, M. Siebenhofer, 'DoE based Parameter Screening for Biphasic Esterification' Jahrestreffen Reaktionstechnik 2018, Germany, 07/05/2018→09/05/2018

A. Toth, S. Lux, M. Siebenhofer, 'Process Parameter Evaluation for Esterification in Emulsions' Minisymposium Verfahrenstechnik 2018, Austria, 04/04/2018

A. Toth, S. Lux, M. Siebenhofer, 'Reactive Solvents and Applications' FP 1306 COST Action 2018, 12/03/2018→14/03/2018

A. Toth, S. Lux, M. Siebenhofer, 'Acetic Acid Isolation with Reactive Solvents in Emulsified Regimes' Jahrestreffen der ProcessNet-Fachgruppen Fluidverfahrenstechnik, Membrantechnik und Mischvorgänge 2018, Germany, 27/02/2018

K. Treusch, N. Schwaiger, A. Huber, P. Pucher, M. Siebenhofer, 'Low Temperature Hydrodeoxygenation of Liquid Phase Pyrolysis Oil' 14. Minisymposium der Verfahrenstechnik, Austria, 04/04/2018

T. Wallek, G. Holzer, 'Model-based real-time prediction of critical process parameters in chemical plants for corrosion protection'. CHISA 2018, Czech Republic, 07/05/18→09/05/18

R. Zacharias, S. Bock, V. Hacker, 'Improvement of iron based oxygen carrier synthesis for chemical looping hydrogen.' 4th International Workshop on Hydrogen and Fuel Cells as part of the 11th International Summer School on PEFCs, Austria, 23/08/2018

R. Zacharias, S. Bock, V. Hacker, 'Improvement of iron based oxygen carriers for chemical looping hydrogen' 14. Minisymposium der Verfahrenstechnik, Austria, 04/04/2018

F. Zapf, F. Pöllabauer, T. Wallek, 'A Data-based Modeling Concept for Production Plants Focusing on Highly Cross-linked Utility Systems' 14. Minisymposium der Verfahrenstechnik, Austria, 4/04/2018→5/04/2018

Lehrveranstaltungen

Lehrveranstaltung	Semesterwochenstunden
Advanced Studies of Polymer Electrolyte Fuel Cells	3 VU
Algae Biorefineries	2 VO
Anlagen- und Prozesstechnik	3 VO
Anlagengenehmigungsverfahren	2 SE + 2VO
Bachelor-Projekt VT	4 PR
Bioethanolveredelung	1 PR
Biologische Abwasserreinigung	2 VO
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
Chemisch-/Thermische Abwasserreinigung	3 VU
Chemical Thermodynamics I	2 VO + 1 UE
Chemische Thermodynamik II	1 VO + 2 UE
Downstream Processing for Biomolecules	1,33 VO + 0,67 UE
Eigenschaften von Gemischen und Grenzflächen	3 VU
Einführung in die Verfahrenstechnik (STEOP)	2 VO + 2 PR
Energy Storage and Conversion	1,33 VO
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
Introduction into Process Simulation and Process Design	1 VO + 2 UE
Konstruktionsübungen	2 KU
Labor Chemische Thermodynamik	2 LU
Labor Reaktionstechnik I	1 LU
Labor Reaktionstechnik II	2 LU
Labor Reaktionstechnik VA	2 LU
Labor Thermische Trennverfahren I	1 LU

Labor Thermische Trennverfahren II	2 LU
Labor Umwelttechnik	2 LU
Luftreinhaltung / Abluftreinigung	3 VU
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 DW
Process Intensification and Hybride Processes	2 VO + 1 UE
Reaktionstechnik VA	3 VU
Recycling	2 VU
Safety and Environmental Aspects in Chemical Process Engineering	2 VO
Schadstoffe in der Umwelt	2 SE
Seminar für Masterarbeit	2 SE
Statistische Thermodynamik	2 VO
Strömungsmechanik und Stoffaustausch VA	3 VU
Technische Nutzung Nachwachsender Rohstoffe – Stoffliche Nutzung	2 VO
Thermische Trennverfahren	3 VO + 2 UE
Thermodynamics	4 VO + 3 UE
Umweltmanagement	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
Eisl, Ingrid, Dipl.-Ing. BSc	DW:-	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
Goetsch, Thomas, M.Sc. Dr.techn.	thomas.goetsch@	Prozesssimulation
Grafschafter, Annika, Dipl.-Ing. BSc.	DW: 4977; a.grafschafter@	Extraktion
Grandi, Maximilian, Dipl.-Ing. BSc	DW 7977; maximilian.grandi@	Brennstoffzellentechnik
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	patrick,krenn@	Prozesssimulation
Kronabitter, Magdalena Juli	DW: 7479; 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, Kurt, Dipl.-Ing. BSc	DW: 8799; kurt.mayer@	Brennstoffzellentechnik
Maitz, Silvia, Dipl.-Ing. BSc	DW: 7967; silvia.maitz@	Biorefinery
Nagl, Roland, Dipl.-Ing. BSc	DW: 7475; nagl@	Prozesssimulation
Painer, Daniela, Dipl.-Ing. Dr.techn. BSc	DW: 7474; d.painer@	Prozessintensivierung
Pichler, Birgit Elvira, Dipl.-Ing. BSc	DW: 8797; birgit.pichler@	Brennstoffzellentechnik
Pichler, Thomas, Dipl.-Ing. BSc	DW: 4978; thomas.pichler@	Biorefinery
Pöllabauer, Florian, Dipl.-Ing. BSc.	DW: 4988; florian.poellabauer@	Thermodynamik
Schwaiger, Nikolaus, Dipl.-Ing. Dr.techn.	DW: 7965; nikolaus.schwaiger@	Biomass to liquid
Senn, Jan, Dipl.-Ing. BSc	DW: 7979; jan.senn@	Brennstoffzellentechnik
Siebenhofer, Matthäus, Univ.-Prof. Dipl.-Ing. Dr.techn.	DW: 7480; m.siebenhofer@	Institutsleitung
Strasser, Reinhard	DW: 4971; reinhard.strasser@	Brennstoffzellentechnik
Toth, Andreas, Dipl.-Ing. BSc	DW:7460; andreas.toth@	Prozessintensivierung
Wallek, Thomas, Ass.Prof. Dipl.-Ing. Dr.techn.	DW: 7966; thomas.wallek@	Thermodynamik
Weiß, Tanja	DW: 7479; tanja.weiss@	Labor
Zacharias, Robert, MSc. BSc.	DW: 4985; robert.zacharias@	Brennstoffzellentechnik
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



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
Univ.-Prof. Dr.-Ing. habil. Tim ZEINER
E-Mail: tim.zeiner@tugraz.at