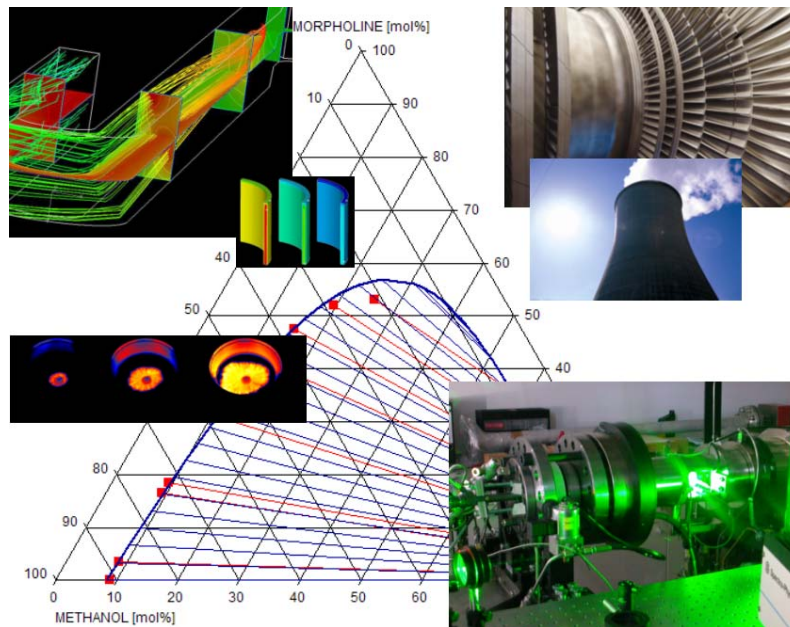


„Thermodynamik-Kolloquium“ und „Ingenieurdaten“



24. – 26. September 2008

Vortragsprogramm

www.processnet.org/tdy08

Mittwoch, 24. September 2008

Plenarvorträge (30 min Vortrag, 10 min Diskussion)

- 13.30 – 13.45 **Begrüßung**
K. Schaber, Universität Karlsruhe/D
- 13.45 – 14.25 **Thermodynamik und Kernfusion**
C. Day, Forschungszentrum Karlsruhe/D
- 14.25 – 15.15 **Kaffeepause**
- 15.15 – 15.55 **Exergoökonomische und exergoökologische Analyse von Energieumwandlungsanlagen**
L. Meyer, SunTechnics, Willich/D; G. Tsatsaronis, T. Morosuk, TU Berlin/D
- 15.55 – 16.35 **Thermodynamische Probleme bei der Ölgewinnung aus Ölsand**
W. Arlt, Universität Erlangen-Nürnberg/D
- 16.45 Bustransfer zu Insitutsbesichtigung 1
- 17.00 Institutsbesichtigungen und parallel Geschäftssitzung der berufenen Mitglieder des AA Ingenieurdaten
- 19.00 Postersession mit Imbiss

Donnerstag, 25. September 2008

Grundlagen*

- 09.00 – 09.25 **Wie die Thermodynamik zu ihrem Namen kam**
H. Wenzel, Universität Erlangen-Nürnberg/D
- 09.25 – 09.50 **Diskrete Systeme im Nichtgleichgewicht**
W. Muschik, TU Berlin/D
- 09.50 – 10.15 **Nichtgleichgewicht-Thermodynamik von Grenzflächen mit der klassischen Dichtefunktionaltheorie**
J. Gross, Delft University of Technology/NL; E. Johannessen, Norwegian University of Science and Technology, Trondheim/N; D. Bedeaux, Delft University of Technology/NL
- 10.15 – 10.40 **Vorhersage thermodynamischer Stabilitätsgrenzen aus molekularen Simulationen**
F. Römer, Universität zu Köln/D; R. Rozas, Deutsches Zentrum für Luft- und Raumfahrt e.V. (DLR), Köln/D; A. Imre, KFKI-AEKI, Budapest/H; T. Kraska, Universität Köln/D

Messtechnik (parallel)*

- 09.00 – 09.25 **Partikeldiffusion in meso- und makropörosen Gläsern**
V. Beschieru, B. Rathke, S. Will, Universität Bremen/D
- 09.25 – 09.50 **Wärmeübergang von laminaren Flammen auf Wände: Oberflächentemperaturmessung mit thermographischen Phosphoren und Modellierung**
M. Salem, U. Bergmann, C. Pflitsch, B. Atakan, Universität Duisburg-Essen/D
- 09.50 – 10.15 **Conditioned Particle Image Velocimetry (CPIV) zur Untersuchung von turbulenten Vormischflammen**
J. Kerl, S. Pfadler, Universität Erlangen-Nürnberg/D; F. Dinkelacker, Universität Siegen/D; F. Beyrau, A. Leipertz, Universität Erlangen-Nürnberg/D
- 10.15 – 10.40 **Weiterentwicklung der kombinierten Viskositäts-Dichte-Apparatur sowie Aufbau einer neuen Nulldichte-Viskositäts-Apparatur zur Vermessung fluider Stoffe**
T. El Hawary, H.-W. Lösch, W. Wagner, R. Span, Universität Bochum/D
- 10.40 – 11.05 **Kaffeepause**

* 20 min Vortrag, 5 min Diskussion

Podiumsdiskussion

11.05 – 12.05 **Thermodynamik und Unternehmenserfolg**
Moderation: M. Kleiber, Bad Soden/D

Grundlagen*

12.05 – 12.30 **Ein neuer Ansatz zur Modellierung der Oberflächenspannung auf Grundlage der friction theory**
T. Kraska, Universität Köln/D; S.E. Quinones-Cisneros, Universidad Nacional Autónoma de México/MEX; U.K. Deiters, Universität Köln/D

12.30 – 12.55 **Mischphasen-Thermodynamik auf Grundlage der topologischen Singularitätentheorie - Eine Schnittstelle zu globalen Phasendiagrammen**
W. Simon, Rheinische Fachhochschule Köln/D

Stoff-/Ingenieurdaten (parallel)*

12.05 – 12.30 **Thermodynamic properties and phase equilibria of complex fluid mixtures: Equation of state modeling**

I. Economou, National Research Center for Physical Sciences 'Demokritos', Aghia Paraskevi, Attiki/GR

12.30 – 12.55 **Modified UNIFAC - Ideales thermodynamisches Modell für die Verfahrensentwicklung**

J. Gmehling, A. Jakob, Universität Oldenburg/D

12.55 – 14.00 **Mittagsimbiss**

Energieumwandlung*

14.00 – 14.25 **Efficient modelling of multicomponent droplet evaporation using the "continuous thermodynamics" approach**

E. Rivard, K. Gartung, D. Brüggemann, Universität Bayreuth/D

14.25 – 14.50 **Einfluss der Kraftstoff- und Umgebungstemperatur auf das Sprayausbreitungsverhalten bei der Dieseldirekteinspritzung**

I. Schmitz, L. Zigan, A. Flügel, Universität Erlangen-Nürnberg/D; M. Lutz, ESYTEC GmbH, Erlangen/D; M. Wensing, A. Leipertz, Universität Erlangen-Nürnberg/D

14.50 – 15.15 **Charakterisierung des Selbstzündungsverhaltens höherer Kohlenwasserstoffe in einer Rapid Compression Machine**

U. Maas, R. Schiessel, H. Wirbser, E. Reitz, Universität Karlsruhe/D

15.15 – 15.40 **Ein neues Verfahren zur Evaluierung laserbasierter Signale in Verbrennungsprozessen**

R. Schießl, U. Maas, Universität Karlsruhe/D

Stoff-/Ingenieurdaten (parallel)*

14.00 – 14.25 **Prädiktive Molekulare Simulation thermodynamischer Eigenschaften realer sicherheitsrelevanter Reinstoffe und Mischungen**

Y.-L. Huang, J. Vrabec, Universität Stuttgart/D; H. Hasse, TU Kaiserslautern/D

14.25 – 14.50 **Reales Gemischverhalten und Quantenmechanik - Weiterentwicklung und Test der COSMO-RS(OI)-Methode**

J. Rarey, T. Mu, D. Constantinescu, J. Gmehling, Universität Oldenburg/D

14.50 – 15.15 **Vorhersage von Löslichkeiten bei pharmazeutischen und racemischen Wirkstoffen**

F. Tuma, G. Sadowski, TU Dortmund/D

15.15 – 15.40 **Simulis® Thermodynamics, just one more thermodynamic package? Application: Modeling of formaldehyde-water-methanol system and properties prediction with implemented EoS/GE models**

O. Baudouin, S. Déchelotte, A. Vacher, ProSim SA, Labège/D

15.40 – 16.05 **Kaffeepause**

* 20 min Vortrag, 5 min Diskussion

Energieumwandlung*

- 16.05 – 16.30 **Experimentelle Untersuchungen und Simulation dieselmotorischer Abgasnachbehandlung am Beispiel SCR-Katalysator**
R. Bank, E. Hassel, J. Nocke, Universität Rostock/D; K.-J. Langeheinecke, H. Schneider, S. Dusemund, IAV GmbH, Gifhorn/D
- 16.30 – 16.55 **Modellierung der Kohlenpyrolyse im Doppelschneckenreaktor**
M. Roedig, W. Klose, Universität Kassel/D
- 16.55 – 17.20 **Beitrag zum exergetischen und wärmetransformatorischen Wesen der Vergasung**
K. Purr, I. Purr, D. Hebecker, Universität Halle-Wittenberg/D
- 17.20 – 17.45 **Flashverdampfung im Arbeitsraum einer Kolbenmaschine**
M. Löffler, Ingenieurbüro Löffler, Jockgrim/D; K. Schaber, Universität Karlsruhe/D

Stoffdaten (parallel)*

- 16.05 – 16.30 **Bestimmung von Aktivitätskoeffizienten assoziierender Moleküle in wässrigen Lösungen durch MD-Simulation und Gibbs-Duhem-Integration**
J. Fischer, D. Paschek, S. Hempel, G. Sadowski, TU Dortmund/D
- 16.30 – 16.55 **Molekularsimulation der Gaslöslichkeit von Kohlendioxid in komplexen Lösungsmitteln**
C.S. Schacht, T.J.H. Vlugt, J. Gross, Engineering Thermodynamics, Delft University of Technology/D
- 16.55 – 17.20 **Nutzung quantenmechanisch berechneter Moleküleigenschaften in prädiktiven Zustandsgleichungen: Viskosität**
K. Leonhard, RWTH Aachen/D, Delft University of Technology/NL; T. Breuer, RWTH Aachen/D; U.K. Deiters, S.E. Quinoes-Cisneros, Universität Köln/D; J. Gross, Delft University of Technology/NL
- 17.20 – 17.45 **Ermittlung von Verdampfungsenthalpien ionischer Flüssigkeiten aus verbrennungskalorimetrischen Daten und quantenchemischen ab initio Rechnungen**
S. Verevkin, A. Heintz, V. Emelyanenko, Universität Rostock/D
- 17.45 Gemeinsame Geschäftssitzung der berufenen Mitglieder der Thermodynamik-Fachausschüsse
- ab 19.00 Abendliches Beisammensein
im Gasthof „Alter Simpl“, Bohlenplatz 3, 91054 Erlangen

Freitag, 26. September 2008

Energieanwendung*

- 09.00 – 09.25 **Wirbelmechanismen zur Erhöhung des Wärmeübergangs auf Oberflächen mit eingesetzten sphärischen Dellen**
J. Turnow, N. Kornev, E. Hassel, S. Isaev, Universität Rostock/D
- 09.25 – 09.50 **Berechnungen zur Strömungs-Ungleichverteilung in Hochtemperatur-Wärmespeichern für den Kraftwerkseinsatz**
V. Dreißigacker, H. Müller-Steinhagen, Deutsches Zentrum für Luft- und Raumfahrt e.V. (DLR), Stuttgart/D
- 09.50 – 10.15 **A concept for future parabolic trough based solar thermal power plants**
J. Birnbaum, Siemens Energy, Erlangen/D; M. Eck, T. Hirsch, Deutsches Zentrum für Luft- und Raumfahrt e.V. (DLR), Stuttgart/D; R. Pitz-Paal, Deutsches Zentrum für Luft- und Raumfahrt e.V. (DLR), Köln/D; G. Zimmermann, Siemens Energy, Erlangen/D

Stoffdaten (parallel)*

- 09.00 – 09.25 **Transportkoeffizienten von Alkoholen und Wasser: Molekulare Simulation und Messungen mit der Taylor-Dispersions Methode**
G. F. Guevara Carrion, TU Kaiserslautern/D; J. Vrabec, Universität Stuttgart/D; C. Nieto Draghi, Institut Français du Pétrole (IFP), Rueil-Malmaison /F; H. Hasse, TU Kaiserslautern/D
- 09.25 – 09.50 **Voraussage des Verteilungskoeffizienten in der Flüssigchromatographie mittels COSMO-RS**
M. Reithinger, W. Arlt, Universität Erlangen-Nürnberg/D
- 09.50 – 10.15 **Thermodynamische Untersuchung der Verteilung von Biomolekülen in kolloidalen Systemen: Oktanol/Wasser, Mizelle/Wasser und Liposome/Wasser**
I. Smirnova, L. Mokrushina, S. Wille, W. Arlt, Universität Erlangen-Nürnberg/D
- 10.15 – 10.40 **Kaffeepause**

Energieanwendung*

- 10.40 – 11.05 **Transient simulation of water & steam cycles in fossil fired power plants**
A.B. Butterlin, H.S. Steuer, D.S. Schiesser, Siemens Energy, Erlangen/D
- 11.05 – 11.30 **Arbeitsstoffpaare mit ionischen Flüssigkeiten für Absorptionskälteanlagen und Absorptionswärmepumpen**
Ch. Römich, K. Schaber, Universität Karlsruhe (TH)/D; T.J.S. Schubert, IoliTec Ionic Liquids Technologies GmbH & Co. KG, Denzlingen/D; J.F. Berndt, IPF Beteiligungsgesellschaft Berndt KG, Reilingen/D
- 11.30 – 11.55 **Verwendung von CO₂ und R245fa als Kältemittel in einem Flugzeug-Kühlsystem**
J.V. Vasel, G.S. Schmitz, TU Hamburg-Harburg /D
- 11.55 **Mittagsimbiss**

Stoffdaten (parallel)*

- 10.40 – 11.05 **Einfluss der partiellen Dichte von CO₂ auf das Mischungsverhalten im pulsierenden überkritischen Antisolvent-Verfahren**
A. Braeuer, S. Dowy, R. Schatz, E. Schluecker, A. Leipertz, Universität Erlangen-Nürnberg/D
- 11.05 – 11.30 **Dynamische Lichtstreuung (DLS) zur Charakterisierung von ionischen Flüssigkeiten und deren Gemischen mit Lösungsmitteln**
A.P. Fröba, Universität Erlangen-Nürnberg/D
- 11.30 – 11.55 **Oiling-Out-Verhalten bei Kristallisationsprozessen**
K. Kiesow, F. Tumakaka, G. Sadowski, TU Dortmund/D
- 11.55 – 12.20 **Veränderung des kristallinen Zustands von Pharmazeutika durch Adsorption in porösen Trägern**
I. Smirnova, TU Hamburg-Harburg; B.S.K. Gorle, W. Arlt, Universität Erlangen-Nürnberg/D
- 12.20 **Mittagsimbiss**