

IVG

Fakultät für Ingenieurwissenschaften

Institut für Verbrennung
und Gasdynamik

UNIVERSITÄT
DUISBURG
ESSEN

Offen im Denken

Institut für Verbrennung und Gasdynamik
Institute for Combustion and Gas Dynamics

Impressum / Publishing Information

Herausgegeben vom
Insitut für Verbrennung
und Gasdynamik
Published by the
Institute for Combustion
and Gas Dynamics

IVG
Carl-Benz-Straße 199
Universität Duisburg-Essen
47057 Duisburg
Telefon: +49 203 379-8161
Telefax: +49 203 39-8159
www.uni-due.de/ivg

Layout
Ines Wingenbach

Printing
Gutenberg-Druckerei GmbH,
Bottrop

Fotos / Photos
CENIDE: 4/1, 7, 18/2
IVG/Norbert Enker: 20/2
UDE/Justus Klasen: 22/1, 25
UDE/Ralf Schneider: 3/3, 10/1-3, 12/1
UDE/Frank Preuß: 23
IVG: Alle anderen/all others

Titel: *Elektronenmikroskopie-Aufnahme eines
Si-C-Komposits für Lithium-Ionen-Batterien
(Reaktive Fluide)*

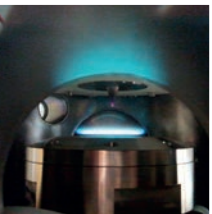
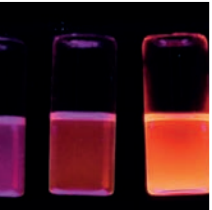
Front cover: *Si-C composite for lithium ion batteries
visualized by electron microscopy
(Reactive Fluids)*

Rückseite: *Instantanes Mischungsfeld aus der
zweidimensionalen Simulation eines
Freistrahls (Fluiddynamik)*

Back cover: *Instantaneous mixing field resulting from a
two dimensional simulation of a free jet
(Fluid Dynamics)*

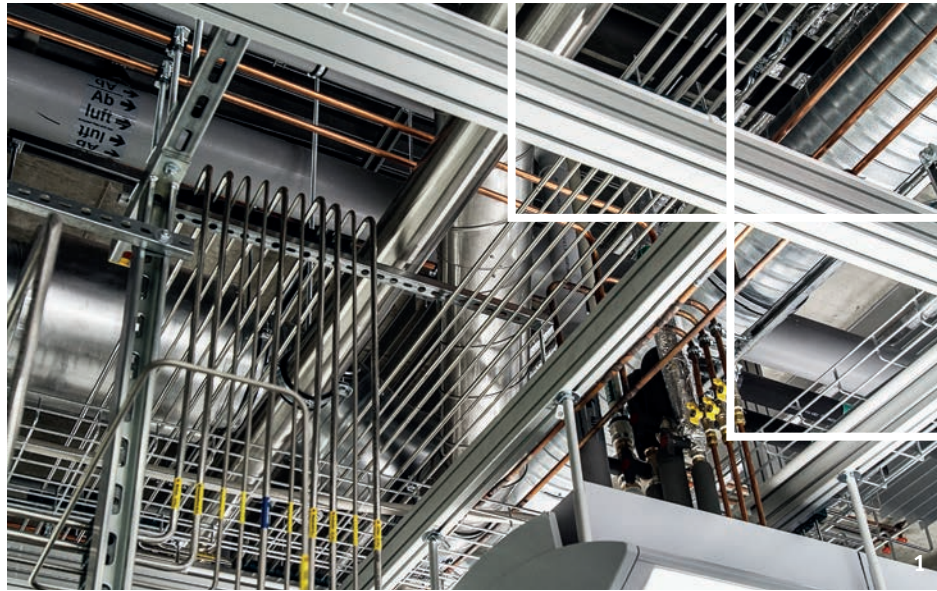
Inhalt / Table of Contents

- | | | | |
|----|--|----|---|
| 4 | Überblick
Overview | 22 | Thermodynamik (Prof. Dr. Burak Atakan)
Thermodynamics |
| 6 | Fluiddynamik (Prof. Dr.-Ing. Andreas Kempf)
Fluid Dynamics | 24 | Massenspektrometrie in reaktiven Strömungen
(Prof. Dr. Tina Kasper)
Mass Spectrometry in Reactive Flows |
| 8 | Reaktionsmechanismen und Aerosoldynamik
(Dr.-Ing. Irenäus Wlokas)
Reaction Mechanisms and Aerosol Dynamics | 26 | Ausgewählte Publikationen
Selected Publications |
| 10 | Nanopartikel-Prozesstechnik (Prof. Dr. Markus Winterer)
Nanoparticle Process Technology | 27 | Kooperationspartner
Partners |
| 12 | Reaktive Fluide (Prof. Dr. Christof Schulz)
Reactive Fluids | | |
| 14 | Kinetik (Dr. Oliver Welz)
Kinetics | | |
| 16 | Lasermesstechnik (Apl. Prof. Dr. Thomas Dreier)
Laser Diagnostics | | |
| 18 | Nanomaterialsynthese (Dr. Hartmut Wiggers)
Nanomaterials Synthesis | | |
| 20 | Verbrennungsmotoren (Prof. Dr. Sebastian Kaiser)
Internal Combustion Engines | | |



(1) Infrastruktur in den Labors des IVG
Lab infrastructure in the IVG

(2) Direkte Simulation der Mischung eines Freistrahls
Direct simulation of the mixing in a free jet



Überblick

Seit 1985 erforscht das Institut für Verbrennung und Gasdynamik (IVG) technische Prozesse bei hohen Temperaturen. Als einer der ersten Standorte nutzt das IVG die Kenntnisse zur Rußbildung und -vermeidung systematisch, um Verfahren zur gezielten Herstellung von Nanopartikeln in der Gasphase zu entwickeln.

Mit den Lehrstühlen für **Thermodynamik** (Professor Atakan), **Nanopartikel-Prozesstechnik** (Professor Winterer), **Reaktive Fluide** (Professor Schulz) und **Fluidodynamik** (Professor Kempf) deckt das IVG heute einen weiten Bereich zur Beschreibung von Hochtemperaturreaktionen ab. Im Team von ca. 85 Wissenschaftlern spielen insbesondere Professor Kasper, Professor Kaiser, Apl. Professor Dreier, Dr. Wiggers, Dr. Welz, Dr. Wlokas und weitere erfahrene Wissenschaftler wichtige Rollen. Mit dem Sonderforschungsbereich „Nanopartikel aus der Gasphase“, dem Graduiertenkolleg „Nanotronics“, der DFG-Forschergruppe „Polygeneration“, dem „NanoEnergieTechnikZentrum“ und weiteren koordinierten Großprojekten hat das IVG

die Forschung auch an der Universität Duisburg-Essen in erheblichem Maß mitgestaltet. Mit den universitätsweiten Forschungseinrichtungen CENIDE (Center for Nanointegration) CCSS (Center for Computational Sciences and Simulation) und CER.UDE (Center for Energy Research) ist das IVG in vielfältiger Weise verbunden.

Das IVG verfügt über eine einzigartige Ausstattung: Neben Reaktoren für die Nanopartikelsynthese vom Labor- bis zum Pilotmaßstab nutzt das IVG eines der größten Stoßwellen-Labors für Hochtemperaturkinetik weltweit. Prüfstände mit optisch zugänglichen Verbrennungsmotoren und umfangreiche Lasermesstechnik ermöglichen es, neue Messverfahren für die quantitative In-situ-Analyse reaktiver Strömungsprozesse zu analysieren und zu entwickeln. Die theoretisch orientierten Gruppen verfügen über eigene Rechnercluster und direkten Zugriff auf einen Großrechner mit über 4000 Kernen. Die Forschung am IVG wird durch 12 technische Mitarbeiter mit einem außergewöhnlich breiten Qualifikationsportfolio unterstützt.

Auch in der Lehre deckt das IVG einen breiten Bereich ab: von der Verbrennungs- und Strömungslehre bis hin zu chemischer Kinetik und Lasermesstechnik. Mit etwa 15 Promotionen und ca. 40 Abschlussarbeiten pro Jahr trägt das IVG erheblich zur Ausbildung des wissenschaftlichen Nachwuchses bei.

Overview

Founded in 1985, the Institute for Combustion and Gas Dynamics (IVG) conducts innovative research on high-temperature gas processes in engineering. Well known for its expertise on the prevention of soot formation, the IVG was among the first institutions to apply this knowledge to the production of valuable nanoparticles from the gas phase. With its four chairs, **Thermodynamics** (Professor Atakan), **Nanoparticle Process Technology** (Professor Winterer), **Reactive Fluids** (Professor Schulz), and **Fluid Dynamics** (Professor Kempf), the IVG covers a wide range of research on high-temperature reactions. The team consists of over 80 scientists, including Professors Kasper and Kaiser, Apl. Prof. Dreier, Drs. Wiggers, Welz, and Wlokas, and many postdocs and graduate students. The institute has actively shaped the research at the University of Duisburg-Essen, in particular through its DFG-funded collaborative research center “Nanoparticles in the Gas Phase“, the research training group “Nanotronics“, the research unit “Polygeneration“, and the “Nano Energy Technology Center“. The IVG plays a key role in the university’s research networks CENIDE (Center for Nanointegration), CCSS (Center for Computational Sciences and Simulation) and CER.UDE (Center for Energy Research).

The IVG has unique experimental facilities and instruments, including reactors for nanoparticle synthesis up to the pilot scale, optically accessible internal combustion engines, and one of the world’s largest shock-tube laboratories for the investigation of high-temperature kinetics. A wide array of laser diagnostics enables the development and application of new strategies for quantitative *in situ* analy-



sis of reactive flows. The IVG also commands computational resources supporting its theoretical and modeling work, with over 1500 processors in-house and direct access to various high-performance computing centers. Twelve highly qualified and experienced technical staff support the experimental and computational research.

The IVG is a major contributor to undergraduate and postgraduate teaching, from ther-

modynamics, fluid mechanics, and combustion to chemical kinetics, laser diagnostics, and numerical techniques. A total of fifteen doctoral degrees and forty bachelor’s and master’s theses each year give evidence of the institute’s active role in educating the next generation of scientists and engineers.



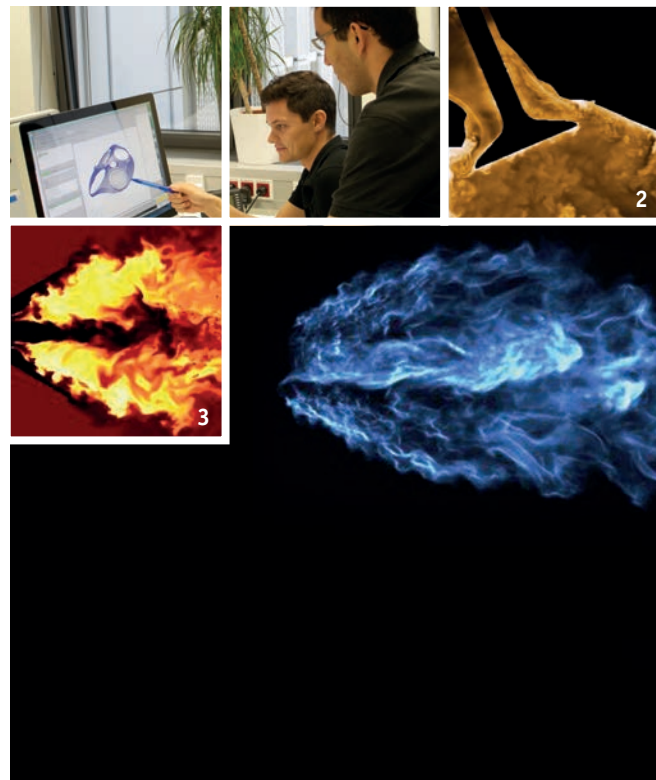
Fluidynamik

Das fünfzehnköpfige Team um Professor Kempf beschäftigt sich mit der Simulation reaktiver Strömungen, die in Anlagen wie Gasturbinen-Brennkammern, Kolbenmotoren, Biomasse- und Kohlestaubfeuerungen oder in Nanopartikel-Synthesereaktoren vorkommen. Die Simulation verschafft dabei Einblicke in messtechnisch unzugängliche Bereiche und ermöglicht die Untersuchung und das Verständnis der isolierten Teilprozesse und ihrer Interaktionen. Für die Verbrennung und für Anlagen der chemischen Verfahrenstechnik schlägt die Simulation eine Brücke zwischen Labor- und Industriemaßstab. Die außerordentlich komplexen Vorgänge in Synthese- und Verbrennungsanlagen verlangen detaillierte Modelle und genaue numerische Methoden zur Beschreibung der chemischen Reaktionen und der Transportprozesse.

Die Entwicklung von Modellen und numerischen Methoden, die zur Beschreibung der turbulenten Verbrennung, von Mehrphasenströmungen sowie der Reaktionskinetik notwendig sind, und deren Implementierung in Computerprogrammen bilden den Schwerpunkt der Forschung. Im Mittelpunkt stehen dabei Methoden zur „Large-Eddy-Simulation“ (LES), die eine besonders genaue Abbildung turbulenter reagierender Strömungen ermöglichen.

In der industriellen Anwendung ermöglichen es die Ergebnisse effiziente, flexible und sichere Anlagen zu entwickeln und gleichzeitig Kosten für Versuchsstände und Pilotanlagen zu reduzieren.

In einem interdisziplinären Ansatz werden Fragestellungen aus Chemie, Physik, Material-



und Ingenieurwissenschaften mit Methoden der angewandten Mathematik behandelt. Es besteht eine enge Zusammenarbeit mit den vielfältigen experimentellen Arbeiten des IVG. Einerseits zum Austausch von Messdaten zur Verifikation der Simulationsmethoden, andererseits aus Interesse der Experimentatoren an Simulationen zur besseren Interpretation von Beobachtungen.

In der Lehre werden Kompetenzen auf den Gebieten der Strömungssimulation, der Beschreibung reagierender Strömungen und der Turbulenzmodellierung vermittelt.

- (1) Raytracing der Chemilumineszenz einer Kohlestaubflamme (LES)
Rendering of the chemiluminescence signal from a pulverized coal flame (LES)
- (2) Temperaturverteilung im Brennraum eines Otto-Motors (LES)
Temperature field inside an IC engine from LES
- (3) Temperaturverteilung in einer Kohlestaubflamme, instantan aus LES
Temperature field in a pulverised coal flame from LES

materials synthesis require detailed models and precise numerical techniques for describing turbulence, multiphase flows, transport processes, and reaction kinetics. The group works on the development of efficient models for these processes and their implementation in efficient numerical methods. The key expertise is the “large-eddy simulation“ (LES), which enables a very detailed, time-resolved and accurate prediction of the turbulent reacting flow. The team’s vision is to contribute to the development of more cost effective, cleaner, and safer systems for combustion and process engineering at reduced cost for large-scale testing.

The group applies an interdisciplinary approach to address problems from chemistry, physics, materials and engineering sciences, using methods from applied mathematics. There is a close collaboration with the various experimental projects carried out at IVG, including the exchange of measured and computed data for cross validation and improved interpretation, but also the simulation of diagnostic techniques to determine and compensate possible biases in the experiments.

The chair teaches advanced skills in fluid mechanics, flow simulation, turbulence and combustion modeling and numerical techniques.

Fluid Dynamics

The team around Professor Kempf is focused on the simulation of turbulent reacting flows that occur in combustion systems – such as gas-turbine combustors, reciprocating piston engines, or coal- and biomass boilers. The simulations grant insight to regions that cannot be accessed for measurements, they permit the analysis of isolated sub-processes with their interactions, and they help with scaling up combustion processes from the laboratory to the industrial scale. The complex interacting sub-processes involved in combustion and



Prof. Dr.-Ing. Andreas Kempf

andreas.kempf@uni-due.de

Telefon: +49 203 379-8103

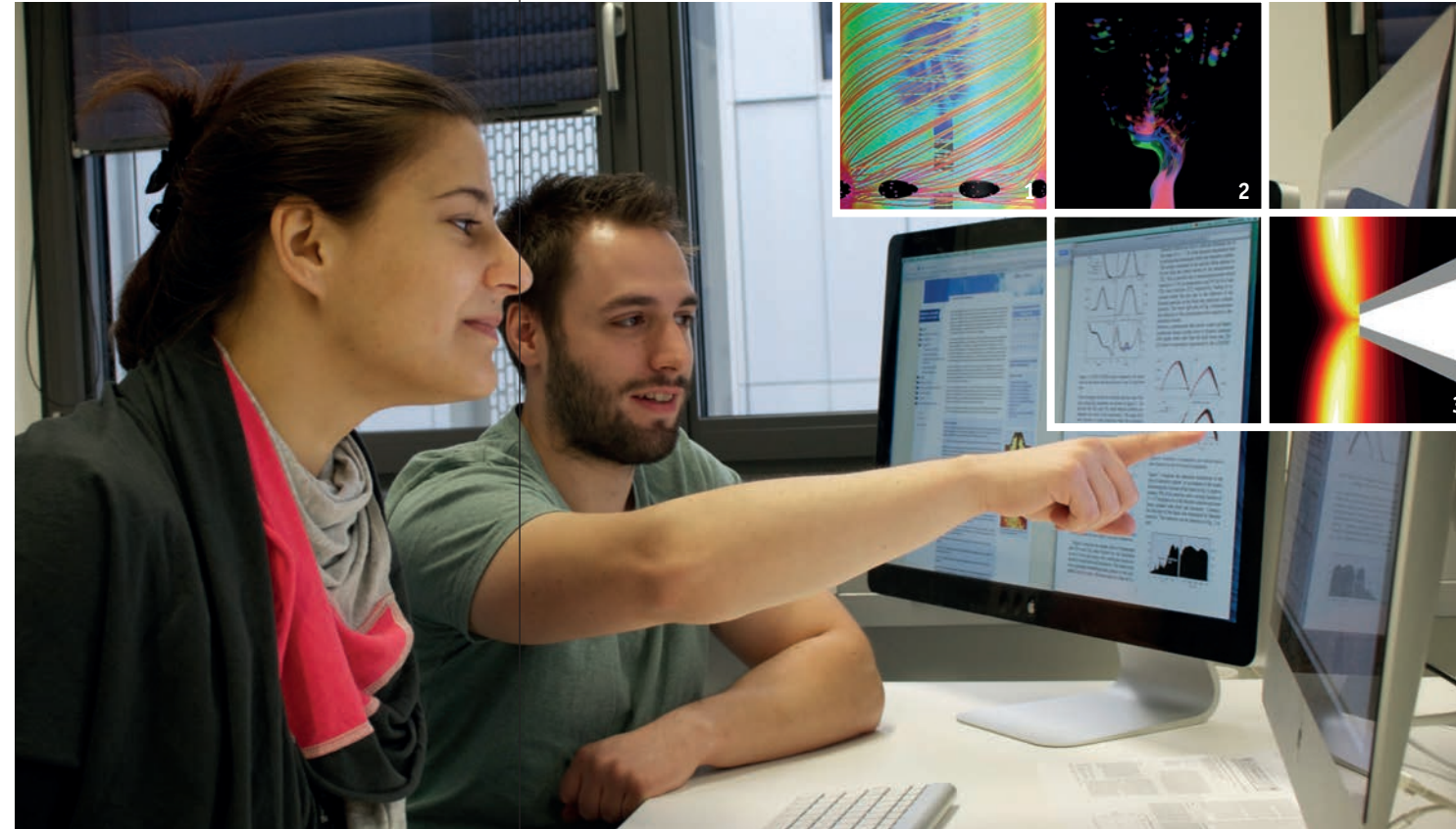
Telefax: +49 203 379-8102

Fluiddynamik: Reaktionsmechanismen und Aerosoldynamik

Die Arbeitsgruppe **Reaktionsmechanismen und Aerosoldynamik** entwickelt Modelle der Stoffumwandlungsprozesse in Brennkammern und Strömungsreaktoren. Ziel dieser Arbeit ist es, ein besseres Verständnis der chemischen Prozesse zu gewinnen und die so entwickelten Modelle effizient in Strömungssimulationen einzusetzen. Im Fokus stehen die am IVG eingesetzten Flammen-, Heißwand- und Mikrowellen-Plasma-Reaktoren. Partikelbildende Flammen mit Beigabe von (metallorganischen) Prekursoren stellen hierbei durch die veränderte Flammenchemie die größte Herausforderung dar. Die Erzeugung, Optimierung und Reduktion von Reaktionsmechanismen, die Modellierung der Aerosoldynamik, sowie die Simulation laminarer Flammen sind daher die Hauptaufgaben der Arbeitsgruppe. Für die Forschung und für die Entwicklung der Modelle werden verschiedene numerische Werkzeuge eingesetzt: Homogene Systeme ohne konvektiven Transport oder eindimensi-

onale, laminare Flammen werden mittels der quelloffenen Software Cantera untersucht. Zur Reduktion und Optimierung von Reaktionsmechanismen werden selbstentwickelte Programme auf Basis genetischer Algorithmen eingesetzt. Die Dynamik von Partikelentstehung und Partikelwachstum verlangt die Lösung der Populationsbilanzgleichung, oft gekoppelt an die Reaktionskinetik und den Transport. Dazu werden Simulationsprogramme auf Basis der Momentenmethoden entwickelt, in unterschiedlichen Graden der Kopplung zur Strömungssimulation. Um laminare, reagierende Strömungen in komplexer Geometrie detailliert beschreiben zu können wird die quelloffene Simulationsplattform OpenFOAM eingesetzt, eigens erweitert um die notwendigen Modelle. Die untersuchten Systeme sind meist Übergangsmetalle und deren Oxide, Silizium und Siliziumdioxid, sowie klassische Brennstoffe. Die Modellentwicklung ist in enger Weise mit den experimentellen Arbeiten des IVG verknüpft.

- (1) Entwurf der Dralldüse eines Plasmareaktors durch Simulation
Simulation-based design of a swirl nozzle of a plasma reactor
- (2) Simulation des primären Strahlzerfalls in einer Zerstäuberdüse
(vgl. Messung in Bild 4 auf Seite 16)
Simulation of the primary jet break-up in an atomizing spray nozzle (cf. measurement in frame 4 on page 16)
- (3) Detaillierte Simulation der Störung einer flachen Flamme durch eine Probenahme-Düse
Detailed simulation of the perturbation of a flat flame by a probing nozzle



Fluid Dynamics: Reaction Mechanisms and Aerosol Dynamics

The team **Reaction Mechanisms and Aerosol Dynamics** develops models for species conversion occurring in combustion chambers and flow reactors. The goal of this research is to obtain a better understanding of chemical processes to develop more efficient models for use in simulations of reactive flows. The work focuses on the flames, hot-wall and microwave-plasma reactors that are experimentally investigated at the IVG. Owing to alterations

in flame chemistry, particle-forming flames with admixtures of (metal-organic) precursors present the greatest research challenge. The generation, optimization, and reduction of reaction mechanisms, modeling of aerosol dynamics and simulation of laminar flames are the working group's primary concern. A variety of numerical tools are utilized for research and model development. The open-source software Cantera is employed to analyze homogenous systems without convective transport as well as one-dimensional laminar flames. Programs developed in-house on the basis of genetic algorithms are used in the reduction and optimization of reaction me-

chanisms. The dynamics of particle formation and growth requires solving the population balance equation, often coupled with reaction kinetics and transport. For this purpose, simulation programs are being developed based on the method of moments, in varying degrees of coupling with flow simulations. The open-source software platform, OpenFOAM, expanded to incorporate the required models, is used to simulate laminar, reactive flows in complex geometries. The systems under investigation are primarily transition metals and their oxides, silicon and silicon-dioxide, as well as conventional hydrocarbon fuels. The chemical mechanisms are developed in close collaboration with the experiments conducted at IVG.

IVG Institut für Verbrennung und Gasdynamik
Fluiddynamik



Dr.-Ing. Irenäus Wlokas
irenaeus.wlokas@uni-due.de
Telefon: +49 203 379-8104
Telefax: +49 203 379-8102

Nanopartikel-Prozesstechnik

Die Gruppe **Nanopartikel-Prozesstechnik** (NPPT) um Professor Winterer beschäftigt sich in Forschung und Lehre mit Synthese, Prozessierung und Anwendung von Nanopartikeln und Nanostrukturen. Das Ziel ist die Herstellung und Charakterisierung von funktionalen Nanomaterialien und deren Integration in Bauteile. Die erforderlichen Schritte entlang der Synthese- und Verarbeitungskette zu untersuchen und zu verstehen um dann zuverlässige Prozesse zu entwickeln, steht im Vordergrund der Arbeiten.



Der Arbeitsgruppe steht dazu eine Vielfalt an experimentellen Verfahren zur Verfügung. Ein integriertes modulares System für die chemische Gasphasensynthese (CVS) von Nanopartikeln und chemischer Gasphasenabscheidung (CVD) von Dünnschichten mit Heißwand-, Kaltwand- und Mikrowellenreaktoren erlaubt die gezielte Synthese komplexer Materialien in der Gasphase. Das System ist mit Zuführungen für definierte Ströme von Prekursoren, Gasen, Flüssigkeiten und Feststoffen ausgestattet ermöglicht In-situ- und Inline-Untersuchungen mit Aerosol-Massenspektrometrie und laser-induzierter Fluoreszenz. Die Prozessierung und Strukturierung von Nanopartikeln aus

kolloidalen Dispersionen oder Pulvern gelingt durch Tintenstrahldrucken und thermisches, Laser- und Strom-assistiertes Sintern. Zur detaillierten strukturellen Material-Charakterisierung stehen HRSEM, XRD, Gasadsorption sowie Röntgenstreuung und -Absorption zur Verfügung. Zudem werden Kolloide durch dynamische Lichtstreuung und bzgl. des Zeta-Potenzials untersucht.

Im Zentrum des Interesses stehen Oxide, einschließlich ternärer und quaternärer Systeme, dotierte Oxide sowie beschichtete und funktionalisierte Materialein, Carbide, Nitride und metallische Systeme.

Nanoparticle Process Technology

The **Nanoparticle Process Technology** group (NPPT) led by Prof. Winterer focuses its research and education on the synthesis, processing, and use of nanoparticles and nanostructures. The goal is to generate and characterize functional nanomaterials and integrate them into devices. Research focuses on investigating and understanding the steps required during synthesis and processing in order to develop reliable processes.

The team uses a range of advanced experimental techniques. An integrated modular system for chemical vapor synthesis (CVS) of nanoparticles and chemical vapor deposition (CVD) of thin films with hot-wall, cold-wall, and microwave reactors allows the targeted synthesis of complex materials in the gas phase. The system is equipped with feeds for well-controlled flows of precursors, gases, liquids, and solids to facilitate *in situ* and inline analysis with aerosol mass-spectrometry and laser-induced fluorescence. Processing and structuring of nanoparticles using col-

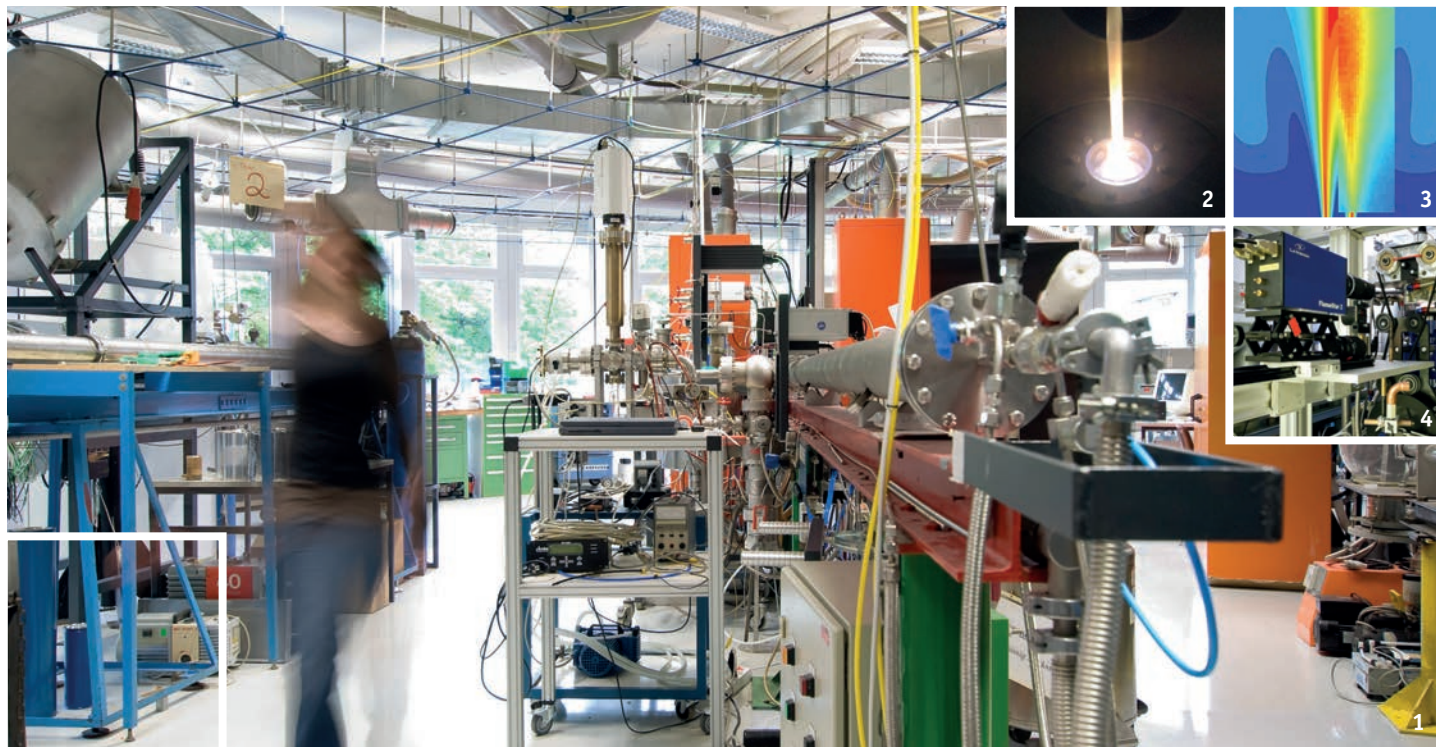
loidal dispersions or dry powders is carried out by ink-jet printing and thermal, laser-, or current-assisted sintering. HRSEM, XRD, gas adsorption, and X-ray scattering and absorption spectroscopy are employed for materials characterization. In addition, colloids are analyzed by dynamic light scattering and with respect to determining the zeta-potential.

As materials, oxides are of particular interest, including ternary and quaternary systems, doped oxides as well as coated and functionalized materials, carbides, nitrides, and metallic systems.

- (1) *Strukturiertes Drucken von Nanopartikel-Dispersionen*
Printing structures from nanoparticle dispersions
- (2) *Gewinnen frisch synthetisierter Materialien aus dem thermophoretischen Abscheider*
Harvesting freshly synthesized materials from the thermophoretic separator
- (3) *Funktionale Nanopartikel*
Functional nanoparticles



Prof. Dr. Markus Winterer
markus.winterer@uni-due.de
Telefon: +49 203 379-4446
Telefax: +49 203 379-4453



Reaktive Fluide

Verbrennungsprozesse und Nanomaterialsynthese in der Gasphase zu verstehen und zu kontrollieren, ist das beherrschende Thema für Professor Schulz und seine gut 45 Mitarbeiter. Die Arbeitsgruppe stellt Nanopartikel mit maßgeschneiderten Eigenschaften in Flammen, Plasmen sowie wandbeheizten Reaktionsapparaturen in der Abteilung **Nanomaterialsynthese** her. Im Mittelpunkt steht die Entwicklung neuer Materialien, insbesondere für die Energietechnik. Weitere Themen sind laserbasierte Techniken zur berührungsfreien Messung von Konzentrationen, Temperatur, Tropfen- und Partikelgröße sowie Geschwindigkeit in reaktiven Strömungen. Die Grundlagen zu neuen messtechnischen Verfahren erarbeitet die Gruppe **Lasermess-**

technik. Angewandt werden diese Verfahren insbesondere in der Abteilung **Verbrennungsmotoren**, die über spezielle Motorenprüfstände zur Aufklärung innermotorischer Prozesse mit optischen Verfahren verfügt. Die Arbeitsgruppe **Kinetik** untersucht Geschwindigkeit und Reaktionsmechanismen von Verbrennung, Zündung und Partikelbildung in Stoßwellenapparaturen: Die Kopplung von Stoßwellenapparaturen mit optischer und massenspektrometrischer Messtechnik erlaubt es, ultraschnelle Prozesse bei hohen Temperaturen in der Gasphase aufzuklären. Die Themen werden zusätzlich zur öffentlich finanzierten Grundlagenforschung mit zahlreichen Industriepartnern bearbeitet. Diese Arbeiten sind gleichermaßen in der Material-

synthese wie in der technischen Verbrennung in Kolbenmotoren und Gasturbinen, der Petrochemie und der Messverfahrensentwicklung angesiedelt.

Studierende erlernen die Beschreibung reaktiver Strömungen in Verbrennungstechnik und Materialsynthese sowie die Kinetik von Prozessen in der Gasphase bei hohen Temperaturen. Zum Lehrprogramm gehören Verbrennungslehre und -motoren sowie laseroptische Untersuchungsverfahren in reaktiven Strömungen. Das interdisziplinäre Team aus Ingenieuren, Chemikern und Physikern ist mit den weiteren Arbeitsgruppen des IVG eng verknüpft.

- (1) *Stoßwellen-Labor*
Shock-tube lab
- (2) *Plasmareaktor zur Synthese von Nanopartikeln*
Plasma reactor for nanomaterials synthesis
- (3) *Temperaturverteilung in einer Nanopartikel-Syntheseflamme: Messung (Reaktive Fluide) und Simulation (Fluidynamik)*
Temperature distribution in a nanoparticle synthesis flame: Measurement (Reactive Fluids) and simulation (Fluid Dynamics)
- (4) *Einzylindermotor für optische innermotorische Untersuchungen*
Single-cylinder engine for optical in-cylinder diagnostics

Reactive Fluids

Understanding and controlling combustion processes and the synthesis of nanomaterials in the gas phase is at the center of the research performed by Professor Schulz and his 45-member group. Nanoparticles with tailored properties are synthesized in flames, plasmas, and wall-heated reactors in the **Nanomaterials Synthesis** team. The work is aimed at the development of new materials, in particular for use in energy technologies. Research also includes laser-based techniques for *in situ* measurements of concentration, temperature, droplet and particle size, as well as velocity in reactive flows. The **Laser Diagnostics** team conducts fundamental research on new measurement techniques. These techniques are also employed by the **Internal Combustion Engines** team in engine test cells that are equipped for optical *in situ* measurements to shed light on in-cylinder processes. The **Kinetics** team uses shock tubes to investigate reaction rates and mechanisms in combustion, ignition, and particle formation. By coupling shock-tube reactors with optical and mass spectrometry it is possible to investigate ultra-fast processes at high temperatures in the gas phase. In their research, the interdisciplinary team composed of engineers, chemists and physicists works closely with other groups at the IVG.

In addition to publicly funded fundamental research, these topics are also addressed in collaboration with numerous partners from industry. These investigations are directed towards materials synthesis, practical combustion in piston engines and gas turbines, petrochemistry, and the development of measurement strategies.

In the classes and laboratory sessions offered, students learn to describe reactive flows in combustion technology and materials synthesis as well as the kinetics of processes in the gas phase at high temperatures. Courses include combustion theory, internal combustion engines, as well as laser-based diagnostics.



Prof. Dr. Christof Schulz
christof.schulz@uni-due.de
Telefon: +49 203 379-8161
Telefax: +49 203 379-8159



- (1) Stoßwellenlabor
Shock-tube lab
- (2) Kopfende des Stoßwellenrohrs für optische Messungen
Test section of the shock tube for optical diagnostics
- (3) Stoßwellenlabor
Shock-tube lab
- (4) Servicearbeiten am Mischungstank des Hochdruck-Stoßwellenrohrs
Servicing the mixing tank of the high-pressure shock tube

nes or flame reactors, the team's research contributes to improving the understanding and the performance of those processes.

Five complementary shock-tube facilities are used to carry out the experimental work. In these setups, gas mixtures can be heated to well-defined temperatures between 600 and 5000 K within a few microseconds. This temperature increase initiates chemical reactions that are monitored using a wide variety of modern detection techniques. With their high sensitivity and selectivity, optical (including laser-based) diagnostics are employed for the time-resolved detection of individual species, including reactive intermediates. High-repetition-rate time-of-flight mass spectrometry enables the time-resolved, simultaneous detection of multiple species and gas chromatography is applied for the quantitative product analysis in complex reaction systems.

The group also applies quantum chemical methods and statistical rate theory to get further insight into reaction mechanisms and to calculate accurate temperature- and pressure-dependent rate coefficients. These theoretical methods complement the experimental analysis and extend the parameter range to conditions not accessible experimentally.



Dr. Oliver Welz
oliver.welz@uni-due.de
Telefon: +49 203 379-1888
Telefax: +49 203 379-8159

Reaktive Fluide: Kinetik

Die Arbeitsgruppe **Kinetik** untersucht die Reaktionsgeschwindigkeit, Produktausbeuten und den Mechanismus von schnellen Hochtemperaturreaktionen in der Gasphase. Von speziellem Interesse sind komplexe Reaktionen, die entscheidende Rollen bei der Zündung und (Teil) Oxidation von konventionellen Kohlenwasserstoffen und neuartigen Brennstoffen, bei der Bildung von Schadstoffen (z.B. Ruß) in technischen Verbrennungsprozessen sowie bei der maßgeschneiderten Synthese von funktionalen Nanomaterialien aus der Gasphase spielen. Darüber hinaus untersucht die Gruppe das Zündverhalten von flüssigen und gasförmigen Brennstoffen über einen breiten Parameterbereich, auch unter

Hochdruck. Die gewonnenen detaillierten Informationen werden durch reaktionskinetische Modellierung auf komplexe Prozesse (Motoren, Flammenreaktoren) übertragen und leisten einen wichtigen Beitrag zum Verständnis und zur Optimierung dieser Prozesse. In fünf unterschiedlich ausgestatteten Stoßwellenapparaturen können Gasgemische sehr schnell (innerhalb weniger Mikrosekunden) auf definierte Temperaturen zwischen 600 und 5000 K gasdynamisch aufgeheizt werden. Zur Verfolgung des Reaktionsfortschritts und zur Detektion von Spezies stehen komplementäre Analysemethoden zur Verfügung: Optische Methoden eignen sich besonders zur selektiven und sensitiven zeitaufgelösten

Detektion einzelner Spezies. Die optischen Verfahren werden ergänzt durch Flugzeit-Massenspektrometrie zur zeitaufgelösten simultanen Detektion mehrerer Spezies sowie durch Gaschromatographie zur quantitativen Analyse von Endprodukten bei komplexen Reaktionssystemen.

Daneben setzt die Gruppe quantenchemische Methoden und statistische Reaktionstheorie ein. Dadurch können Mechanismus und Kinetik der experimentell untersuchten Reaktionen komplementär zum Experiment erforscht und kinetische Informationen auf experimentell nicht zugängliche Parameterbereiche extrapoliert werden.

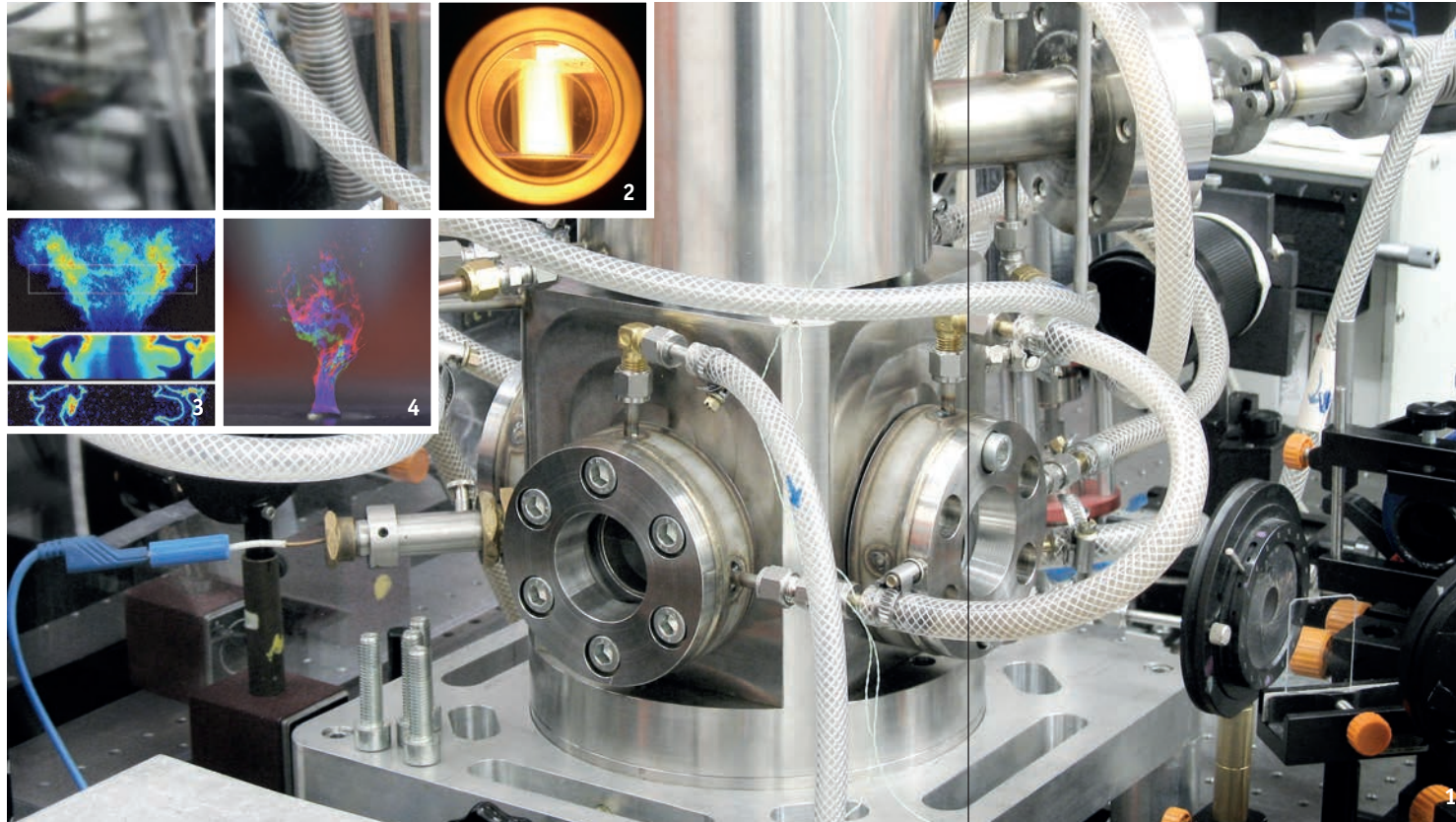
Reactive Fluids: Kinetics

The **Kinetics** team studies the chemical kinetics and mechanisms of fast high-temperature reactions in the gas phase. A central aspect is the elucidation of complex reaction networks that play key roles in the following areas: ignition and (partial) oxidation of conventional and novel fuels, formation of pollutants (such as soot) during practical combustion processes, and the tailored synthesis of functional nanomaterials from the gas phase. In addition, the group investigates ignition properties of liquid and gaseous fuels over a wide range of conditions including high pressure. By transferring the detailed kinetics and mechanistic information via chemical kinetics models to complex practical environments such as engi-

Reaktive Fluide: Lasermesstechnik

Die Arbeitsgruppe **Lasermesstechnik** beschäftigt sich mit der Entwicklung und praktischen Anwendung spektroskopischer Diagnostikmethoden zum Einsatz in Verbrennungssystemen oder reaktiven Strömungsprozessen. Dazu zählen insbesondere laserbasierte Verfahren wie Rayleighstreuung, spontane Ramanstreuung, laserinduzierte Fluoreszenz (LIF), laserinduzierte Inkandescenz (LII) oder Diodenlaser-Absorptionsspektroskopie.

In der Arbeitsgruppe werden grundlagenorientierte Experimente durchgeführt, um eine quantitative Interpretation der Messdaten auch in komplexen Situationen zu ermöglichen. Dazu gehört auch die Bestimmung von Fluoreszenz-Lebensdauern kleiner Moleküle (OH-Radikale, Formaldehyd, Toluol, Naphthalin). Diese liefern Aufschluss über intra- und intermolekulare Energietransferprozesse, die für die Variation von Signalintensitäten und Spektren verantwortlich sind. Ein weiteres Beispiel ist die Bestimmung der Lichtabsorption in dünnen Schichten wässriger Lösungen im nahinfraroten Spektralbereich. Darüber hinaus verfolgt die Arbeitsgruppe die Weiterentwicklung von laseroptischen Verfahren (wie LII) zur Größenmessung gasgetragener Nanopartikeln – z. B. für Ruß im Motor oder für Nanopartikel in Synthesereaktoren. Die Messmethoden werden zur Bestimmung wichtiger Parameter in Flammen oder anderen technisch interessanten Umgebungen eingesetzt. Ein Schwerpunkt liegt dabei auf abbildenden Verfahren, die die gewünschte Größe in einer Querschnittfläche im Prozess darstellen und somit Mischungs-, Reaktions- und Strömungsprozesse aufklären helfen. Die Schichtdicke und die Temperatur wässriger



flüssiger Filme wird über Absorptionsspektroskopie mit abstimmbaren NIR-Diodenlasern gemessen, um etwa schnell verdampfende Flüssigfilme auf heißen Oberflächen zeitlich aufgelöst zu betrachten. Weitere Beispiele sind die berührungslose quantitative Bestimmung der Wärmefreisetzung in turbulenten Flammen mittels abbildender LIF von OH und Formaldehyd sowie die zeit- und spektral aufgelöste Messung der Chemilumineszenz (OH*, CH*, CO₂*).

Reactive Fluids: Laser Diagnostics

The **Laser Diagnostics** group is devoted to the development and practical application of optical measurement technique for use in combustion systems or other reactive flows. This includes laser-based methods such as Rayleigh scattering, spontaneous Raman scattering, laser-induced fluorescence (LIF), laser-induced incandescence (LII), and diode-laser absorption spectroscopy.

The team carries out fundamental experiments that enable the quantitative interpretation of measurements even in complex situations. This includes the determination of fluorescence lifetimes of small molecules (OH radical, formaldehyde, toluene, naphthalene) to clarify intra- and intermolecular energy transfer processes that are responsible for variations in signal intensity and spectra. Another example is the identification of light absorption in thin films of aqueous solutions in the near-infrared spectral range. In addition, the group also contributes to the development of laser-optical techniques (such as LII) used to measure the size of gas-borne nanoparticles – e.g. for measuring soot in engines or nanoparticles in synthesis reactors.

The measurement techniques are employed for identifying important parameters in flames or other environments that are of interest from a practical point of view. One focus is on imaging techniques for two-dimensional visualization of mixing, reaction, and flow. The thickness and temperature of aqueous liquid films is measured using tunable NIR diode lasers via absorption spectroscopy for the time-resolved analysis of quickly evaporating liquid films on hot surfaces. Contact-free quantitative measurement of heat release in turbulent flames are carried out with LIF imaging of OH and formaldehyde as well as time- and spectrally-resolved detection of chemiluminescence (OH*, CH*, CO₂*).



Apl. Prof. Dr. Thomas Dreier
thomas.dreier@uni-due.de
Telefon: +49 203 379-8072
Telefax: +49 203 379-8159

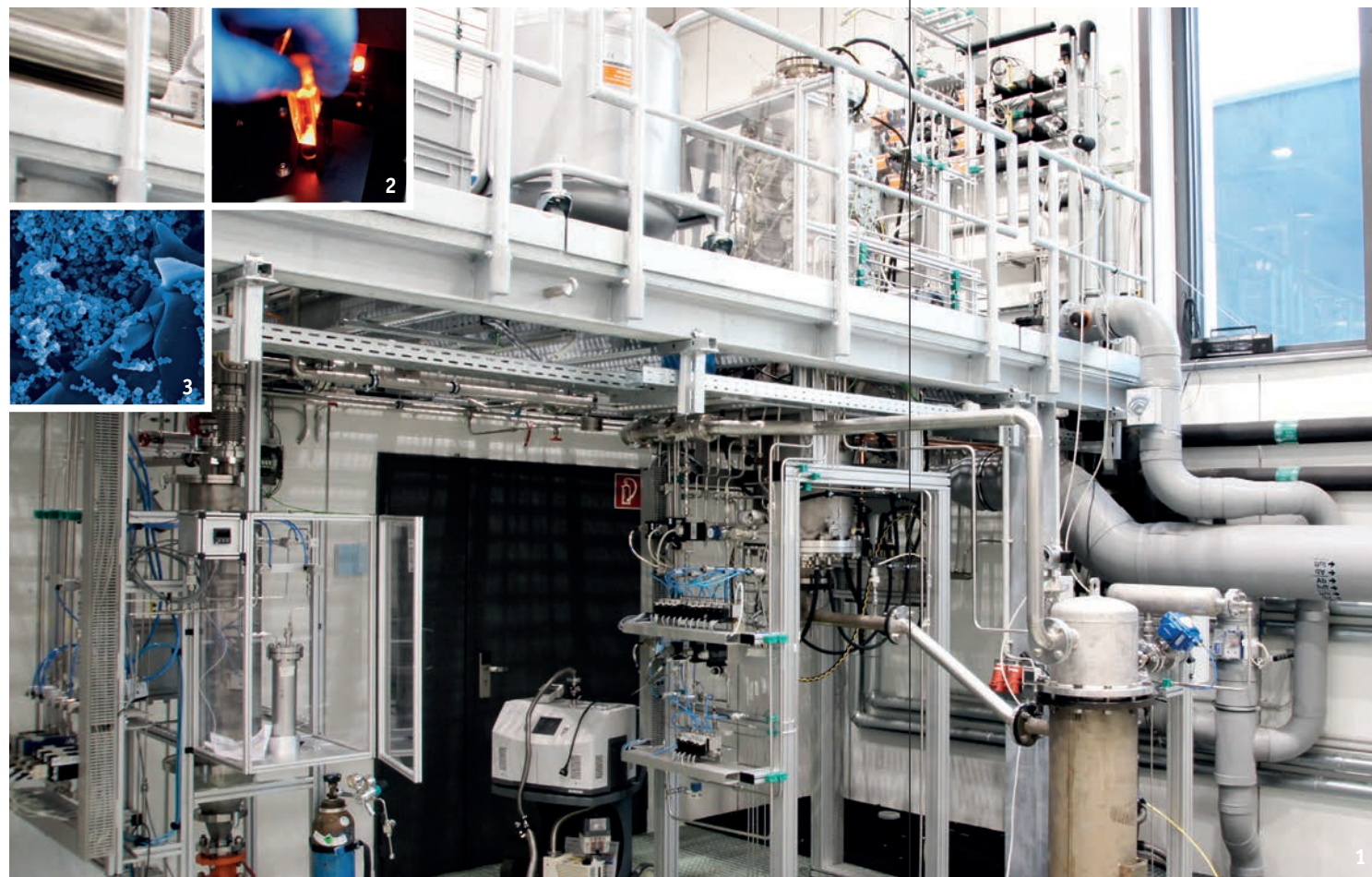
- (1) Hochdruckbrenner zur Untersuchung von rußenden Flammen
High-pressure burner for the investigation of sooting flames
- (2) Rußende Hochdruckflamme
Sooting high-pressure flame
- (3) Untersuchung turbulenter Flammen mit Chemilumineszenz und Lichtschnittverfahren (OH- und CH₂O-LIF)
Investigation of turbulent flames via chemiluminescence and light-sheet diagnostics (OH and CH₂O LIF)
- (4) Zeitaufgelöste Messung des Sprayaufbruchs
(vgl. Simulation S. 9 Bild 2)
Time-resolved visualization of spray break up
(cf. simulation on p. 9 frame 2)

Reaktive Fluide: Nanomaterialsynthese

Die Arbeitsgruppe **Nanomaterialsynthese** untersucht die Gasphasensynthese, Charakterisierung und Verarbeitung von Nanopartikeln aus zahlreichen Materialklassen. Es wird sowohl die Synthese oxidischer Materialien – vorzugsweise in Flammenreaktoren – als auch die Synthese keramischer oder metallischer Nanopartikel in Heißwand- und Plasmareaktoren erforscht. Ein Schwerpunkt ist die Untersuchung der beginnenden Partikelbildungsprozesse, ihre Kinetik und der Einfluss des Reaktionsmediums auf die chemische Zusammensetzung und Partikelmorphologie. Molekularstrahlprobennahme gekoppelt mit der am IVG entwickelten Partikelmassenspektrometrie ermöglicht die Korrelation von Reaktionsbedingungen mit Partikelgrößenverteilungen. In Kooperation mit der **Lasermesstechnik**-Gruppe werden optische Verfahren für die In-situ-Messung eingesetzt. So ist es möglich, sowohl den Einfluss der Reaktionsbedingungen als auch den der chemischen Umgebung in der Reaktionsmischung auf Partikelwachstum, -morphologie und -zusammensetzung zu untersuchen. Gemeinsam mit der Arbeitsgruppe **Fluidodynamik** wird das Ziel verfolgt, die Syntheseprozesse grundlegend zu verstehen. Auf dieser Basis ist auch die Skalierung der Verfahren bis in den industriellen Maßstab möglich. Einen Schwerpunkt der aktuellen Arbeiten stellen Materialien dar, die sich in der Energietechnik einsetzen lassen: Themenfelder wie Katalyse, elektrochemische Energiespeicher, Photovoltaik, Thermoelektrik und Brennstoffzellen werden mit Kooperationspartnern

aus Forschung und Industrie bearbeitet und stehen im Zentrum der Aktivitäten des NanoEnergieTechnikZentrums (NETZ). Da viele der genannten Anwendungsfelder potenziell große Materialmengen erfordern, gilt ein besonderes Augenmerk bei der Materialauswahl der Nachhaltigkeit – sowohl bei der Herstellung als auch bei der Verarbeitung und Anwendung. Das Institut für Energie- und Um-

welttechnik (IUTA) überträgt die am IVG-RF erforschten Syntheseverfahren für Nanomaterialien in den Technikumsmaßstab. Die Arbeitsgruppe trägt durch Vorlesungen und Praktika in außergewöhnlich gut ausgestatteten Labors in erheblichem Maß zum Curriculum des Studiengangs NanoEngineering bei.



- (1) Syntheseanlagen zur Herstellung von Nanopartikeln in der Gasphase
Facility for the gas-phase synthesis of nanoparticles
- (2) Lumineszierende Nanopartikel aus der Gasphasensynthese
Luminescing nanoparticles from gas-phase synthesis
- (3) Elektronenmikroskopie-Aufnahme eines Si-C-Komposits für Lithium-Ionen-Batterien
Si-C composite for lithium ion batteries visualized by electron microscopy

Reactive Fluids: Nanomaterials Synthesis

The **Nanomaterials Synthesis** team investigates the gas-phase synthesis of nanoparticles in combination with materials characterization and processing. Research is directed primarily at both oxidic materials – mainly in flame reactors – as well as ceramic or metallic nanoparticles in hot-wall and microwave-plasma reactors. Central aspects are the formation of the initial particles, in particular the kinetics

involved, and how materials properties can be tailored by modifying the reaction media. Molecular beam sampling coupled with particle-mass spectrometry developed at the IVG enable the correlation of reaction conditions with particle-size distributions. Working in cooperation with the **Laser Diagnostics** team, optical techniques for *in situ* measurements are employed to study the effect that reaction conditions and the chemical environment in the reaction mixture have on particle growth, morphology, and composition. Working jointly with the **Fluid Dynamics** group, the goal is to obtain a better understanding of the synthesis process and thereby make novel processes viable on an industrial scale. A focus of ongoing work relates to materials that can be used in energy technologies. Topics such as catalysis, electrochemical energy

storage, photovoltaics, thermoelectrics, and fuel cells are addressed in cooperation with partners in research and industry. This effort constitutes a centerpiece of the work carried out in the NanoEnergyTechnologyCenter (NETZ). Because many of the proposed applications may require large amounts of materials, particular emphasis is placed on sustainability in materials selection – during production as well as in processing and application. The university-associated Institute of Energy and Environmental Technology (IUTA) applies strategies developed by the IVG for nanomaterials synthesis at the pilot-plant scale. The group contributes to the teaching within the NanoEngineering study program both through lectures and research projects in the group's well equipped labs.



Dr. Hartmut Wiggers
hartmut.wiggers@uni-due.de
Telefon: +49 203 379-8087
Telefax: +49 203 379-8159

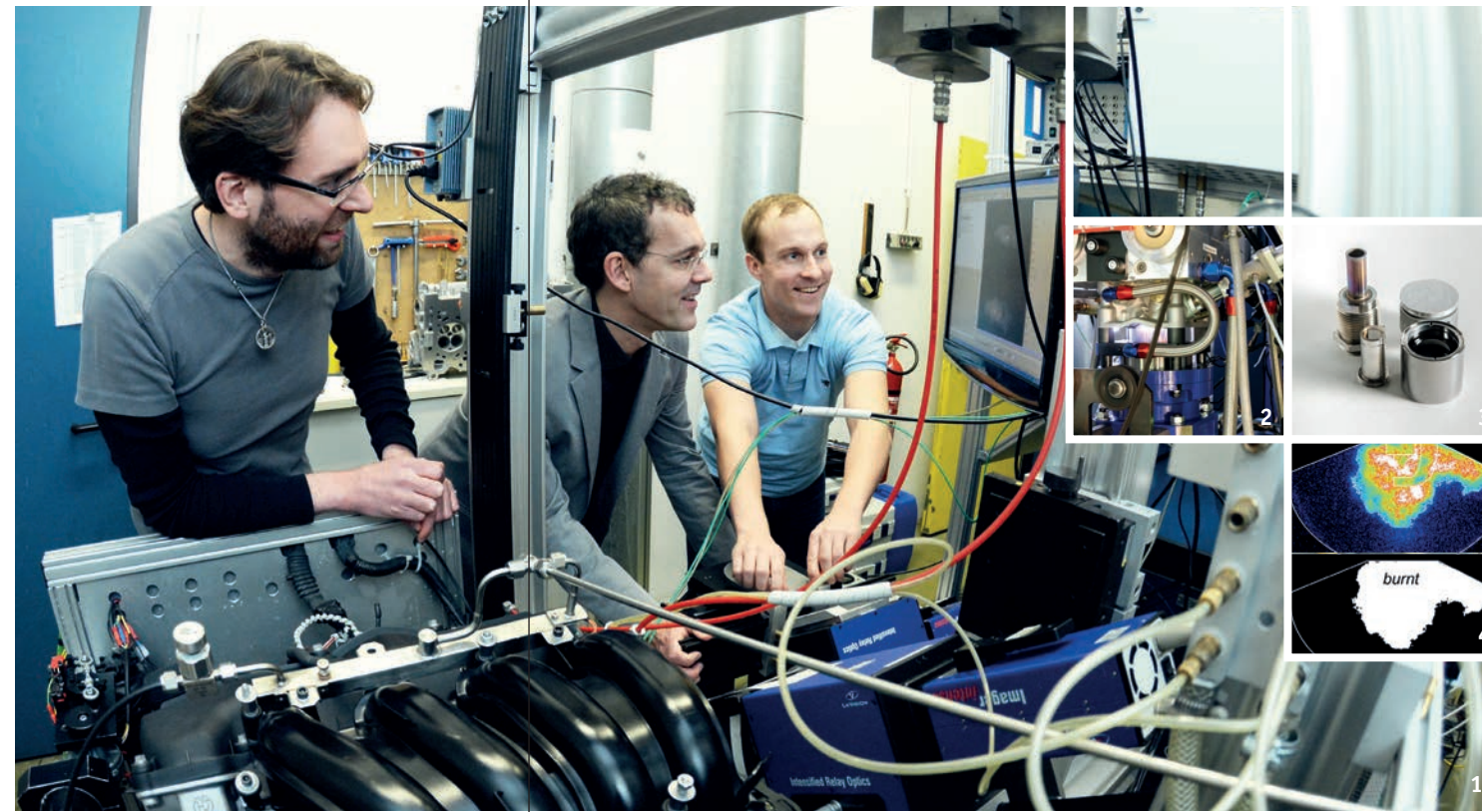
- (1) Serienmotorprüfstand mit endoskopischer Lasermesstechnik
Production engine equipped with endoscopic laser diagnostics
- (2) Optisch zugänglicher Einzylindermotor
Optically-accessible single-cylinder engine
- (3) Spezialendoskope für bildgebende Messung im Zylinder von Serienmotoren
Endoscope system for imaging measurements in the cylinder of production engines
- (4) Endoskopische Beobachtung der Flammenausbreitung im Motor mit dem Endoskopsystem
Endoscopic visualization of flame growth in the cylinder

Reaktive Fluide: Verbrennungsmotoren

Die Arbeitsgruppe um Professor Kaiser erweitert das grundlegende Verständnis der physikalischen und chemischen Prozesse in Verbrennungsmotoren: Optische Messmethoden dienen dazu, diese komplexen Vorgänge im Zylinder und im Brennraum direkt im Detail zu untersuchen. Das so gewonnene Verständnis wird in der Industrie genutzt, um effizientere und schadstoffärmere Motoren zu entwickeln.

Trotz ihrer langen Geschichte sind **Verbrennungsmotoren** weder vollständig optimiert noch im Entwurf komplett zu berechnen, denn hier kommen komplexe Geometrie, Hochtemperaturchemie und turbulente Strömung zusammen. Selbst modernste Simulationen, wie sie in der Industrie zur Entwicklung von Motoren verwendet werden, enthalten zwei Dutzend halbempirische Konstanten. Sie verlieren deshalb schnell ihre Zuverlässigkeit, wenn sie außerhalb des engen Bereiches angewendet werden, für den diese Parameter eingestellt sind. Ein im wörtlichen Sinn tiefer Einblick in den Motor ist also nötig – den

liefern Laser und Kamera. Laserbasierte Messverfahren, teils in der Arbeitsgruppe **Lasermesstechnik** vorentwickelt, werden hier am industriell relevanten Objekt eingesetzt: Die Motoren sind entweder speziell für diese Aufgabe mit Fenstern konstruiert oder werden minimalinvasiv mit eigens dafür entwickelten Endoskopen untersucht. Spezialkameras messen so flächig und quantitativ Parameter wie die Lufteinströmung in den Zylinder, die momentane Verteilung des Kraftstoffes während der Gemischbildung, die Temperatur vor der Zündung oder die Ausbreitung der Flamme. Solch detaillierte Messdaten bilden



auch die Basis für die Verifikation orts- und zeitauflösender Rechenverfahren, wie sie in der Arbeitsgruppe **Fluidodynamik** entwickelt werden.

Neben den Grundlagen von Verbrennungsmotoren und anderen Kolbenmaschinen werden den Studierenden die Technologie und Umsetzung optischer Messtechniken in Strömungen vermittelt. Besonders attraktiv sind Abschlussarbeiten an der Schnittstelle des klassischen Maschinenbaus zu Optik sowie Kamera- und Lasertechnik.

Reactive Fluids: Internal Combustion Engines

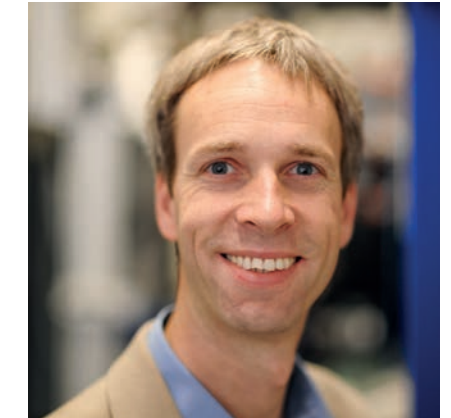
The team led by Professor Kaiser expands our fundamental understanding of the physical and chemical processes in **Internal Combustion Engines**. Optical measurement techniques enable detailed studies of the complex processes occurring in the cylinders of an engine. The knowledge obtained here is used by industry to develop cleaner, more efficient engines.

Despite their long history, internal combustion engines have are far from fully optimized, nor is predictive design truly possible because of the combination of complex geometry, high-temperature chemistry, and turbulent flow. Even the most advanced simulations

currently in use in industrial engine design contain two dozen semi-empirical constants. Their reliability is therefore much reduced when they are applied outside the narrow parameter range the underlying models were designed for. What is needed is literally a much deeper look inside the engine – like that provided by lasers and cameras. Thus in this group, laser-based measurement techniques, some of which were previously developed by the **Laser Diagnostics** team, are applied to combustion engines. The engines are either specifically designed for this research by incorporating windows or are studied in a minimally invasive fashion using purpose-built endoscopes.

An emphasis is on quantitative imaging of parameters such as intake-air flow into the cylinders, fuel distribution, temperature, and flame propagation during combustion. The data obtained here also serve to validate spatially and temporally resolved computations such as those developed in the **Fluid Dynamics** group.

Along with internal combustion engines and other piston machinery, students also learn about techniques for optical measurements in flows and their applications. Bachelor's and Master's theses are often at the interface of traditional mechanical engineering and optical technologies like cameras and lasers.



Prof. Dr. Sebastian Kaiser
sebastian.kaiser@uni-due.de
Telefon: +49 203 379-1840
Telefax: +49 203 379-8159

Thermodynamik

Die Forschung von Professor Atakan umfasst Themen der thermischen und chemischen Energiewandlung, der Untersuchung von thermodynamischen Stoffdaten und der Dünnschichtherzeugung.

Ausgehend von grundlegenden Aspekten wird die Fluidauswahl für thermodynamische Kreisprozesse genauso theoretisch analysiert wie Möglichkeiten der chemischen Energiespeicherung in Oxidations- und Pyrolyse-reaktionen. In Industriekooperationen werden Möglichkeiten der rationellen Nutzung von Prozess- und Abwärmeströmen in Industrieanlagen oder Kraftfahrzeugen analysiert und bewertet. Darüber hinaus untersucht die Arbeitsgruppe Mechanismen von Verbrennungs- und Hochtemperaturreaktionen sowie den Einfluss von Additiven mithilfe massenspektrometrischer und laseroptischer Analytik. Im Hinblick auf deren Zuverlässigkeit, Vorhersagekraft und mögliche Verbesserungen werden die Vorhersagen von Reaktionsmodellen mit den Messungen verglichen.

Ein weiteres Arbeitsfeld beschäftigt sich mit der experimentellen Untersuchung von Stabilität, Sublimations- bzw. Dampfdrücken und Diffusionskoeffizienten von metallorganischen Substanzen, aber auch von anderen Stoffen mit geringen Dampfdrücken (0,1–1000 Pa). Diese Substanzen werden eingesetzt, um dünne funktionale Schichten mittels Chemischer Dampfphasenabscheidung (CVD)- und Sol-Gel-Verfahren zu erzeugen. Der Zusammenhang zwischen den Reaktionsbedingungen bei der Abscheidung und deren Resultat wird experimentell und theoretisch untersucht.

Die Lehre bietet Grundlagenveranstaltungen zur „(Technischen) Thermodynamik“ und zur „Wärme- und Stoffübertragung“, aber auch Veranstaltungen wie „Thermische Systeme: Analyse, Modellierung und Design“ oder „Chemische Thermodynamik“.

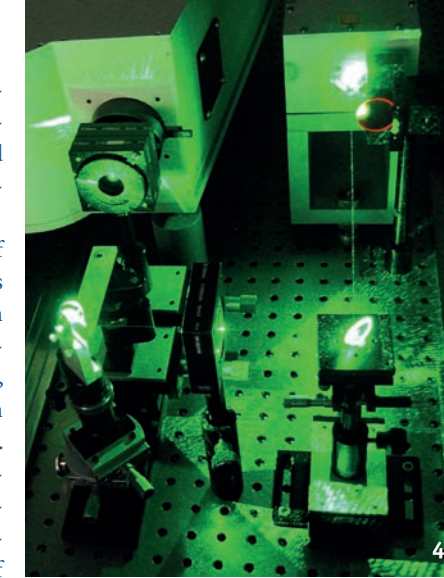


Thermodynamics

Professor Atakan's research is devoted to thermal and chemical energy conversion, the investigation of thermodynamic properties, and thin-film generation from gas-phase and sol-gel processes.

The fundamental aspects of the selection of fluids for thermodynamic cycles as well as the feasibility of chemical energy storage in oxidation- and pyrolysis reactions are investigated. Working in partnership with industry, the potential of using waste heat streams in industrial processes or in vehicles is analyzed. In addition, the group employs mass spectrometric and laser-optical analysis to investigate mechanisms in combustion and high-temperature reactions as well as the effects of additives on combustion. In order to evaluate their reliability, predictive value, and potential improvements, simulations based on reaction mechanisms are compared to the experimental results.

An additional research area concerns the investigation of stability, sublimation pressure, or vapor pressure of metal-organic substances, as well as other materials with low vapor pressures (0.1–1000 Pa). These substances are used to produce functional thin films by



chemical vapor deposition (CVD) and sol-gel synthesis. The relation between reaction conditions during deposition and resulting materials is investigated both experimentally and theoretically.

Teaching includes courses in (technical) thermodynamics and heat and mass transfer, while also covering topics like the analysis, modeling and design of thermal systems and chemical thermodynamics.

- (1) Anschließen des Vakuumsystems
Connecting the vacuum system
- (2) CVD-Schicht (REM Aufnahme)
SEM of a CVD film
- (3) Blick in einen CVD-Reaktor
View into a CVD reactor
- (4) Optische Messtechnik
Optical spectroscopy



Prof. Dr. Burak Atakan

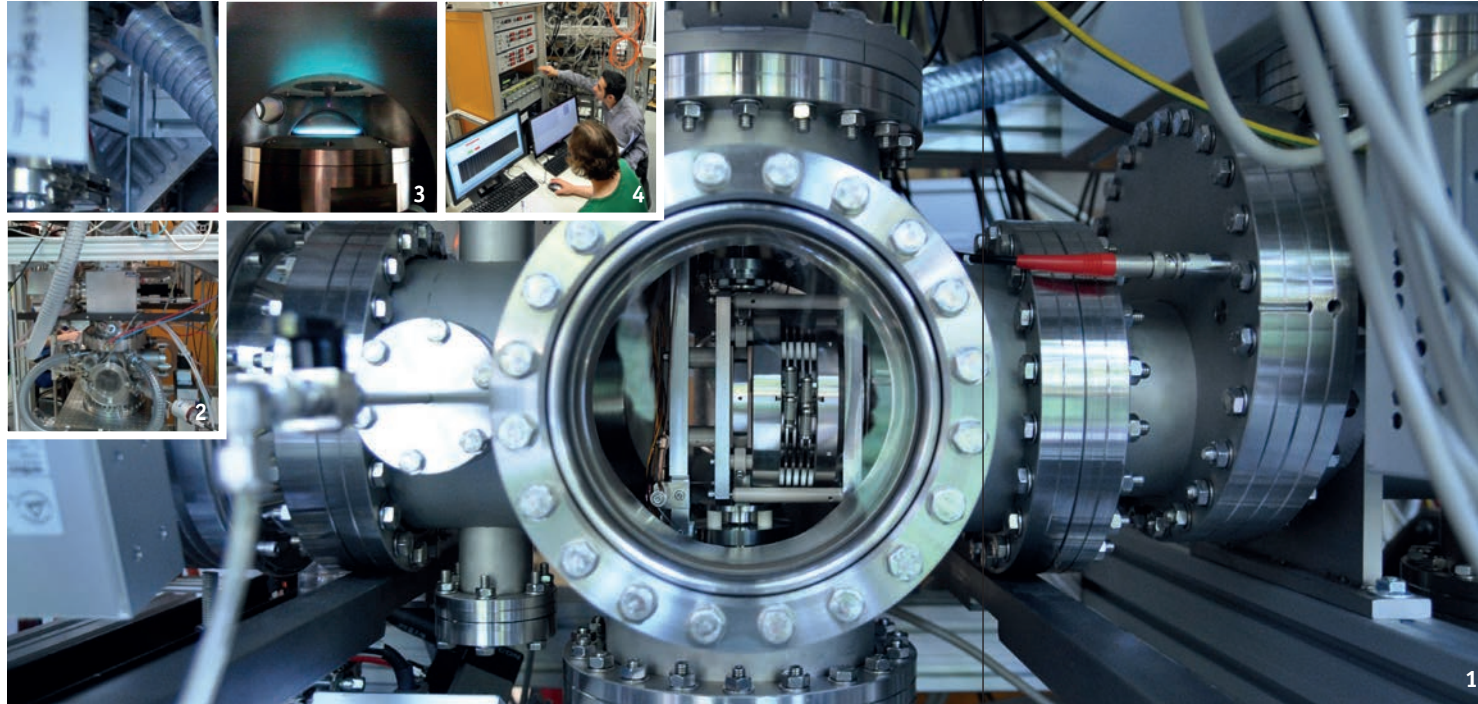
burak.atakan@uni-due.de
Telefon: +49 203 379-3355
Telefax: +49 203 379-1594

Thermodynamik: Massenspektrometrie in reaktiven Strömungen

Die Arbeitsgruppe **Massenspektrometrie in reaktiven Strömungen** beschäftigt sich mit der detaillierten experimentellen Untersuchung von Flammenchemie. In Flammen bildet sich nach dem initialen Zerfall von Brennstoffmolekülen ein Radikalpool aus, der das weitere Reaktionsgeschehen nachhaltig beeinflusst. Die experimentelle Bestimmung von Intermediat-Konzentrationen ermöglicht entsprechend Rückschlüsse auf die Reaktionswege in Flammen.

Durch Kopplung einer Brennkammer mit Modellbrenner an ein Massenspektrometer kann nach Molekularstrahlprobennahme die Gaszusammensetzung massenspektrometrisch bestimmt werden. Für die Analyse werden die Moleküle in der Gasprobe ionisiert. Elektronenionisation wird für schnelle Übersichtsmessungen und Laserionisation für die selektive und besonders empfindliche Detektion von Intermediaten – wie zum Beispiel polyaromatischen Kohlenwasserstoffen – eingesetzt. Für die Detektion ionischer Flammenspezies steht außerdem ein speziell konstruiertes Ionentransfermodul zur Verfügung. Weiterhin werden Messungen an einem Molekularstrahlmassenspektrometer an der Advanced Light Source (Berkeley, Kalifornien) und der Swiss Light Source (Villigen, Switzerland) durchgeführt. Die Ionisation erfolgt hier besonders schonend mithilfe von VUV-Synchrotronstrahlung. Anhand der Photoionisationseigenschaften lassen sich auch Isomere in den Flammen getrennt nachweisen.

Molekularstrahl-Massenspektrometer-Messungen liefern die quantitative Gaszusammensetzung von Modellflammen während



des Verbrennungsprozesses in unvergleichbarem chemischem Detail. Diese Daten bieten direkte Einblicke in die Verbrennungschemie: Insbesondere der Zerfall der Brennstoffmoleküle lässt sich sehr gut nachvollziehen und bietet bereits erste Hinweise auf die mögliche Bildung von brennstoffspezifischen Schadstoffen. Zudem werden die Daten für die Entwicklung und Validierung von chemisch-kinetischen Verbrennungsmechanismen benötigt. In Kooperation mit Modellierungsexperten arbeitet das Team an der Entwicklung von Reaktionsmechanismen.

- (1) Flugzeitmassenspektrometer zur Analyse von Flammgasen
Time-of-flight mass spectrometer for the analysis of flame gases
- (2) Niederdruckbrennerkammer
Low-pressure burner chamber
- (3) Laminare, flache Vormischflamme – ein Modellsystem zur Aufklärung von Verbrennungsreaktionen
Laminar premixed flat flames – a model system for the investigation of combustion reactions
- (4) Messungen am Molekularstrahlmassenspektrometer
Measurements with the molecular-beam mass spectrometer

Thermodynamics: Mass Spectrometry in Reactive Flows

The **Mass Spectrometry in Reactive Flows** group studies flame chemistry. Following the initial breakdown of fuels in flames, an intermediate radical pool forms that greatly influences the reaction processes. Experiments that identify intermediate concentrations help to disentangle reaction pathways in flames. Detailed local measurements of the gas composition are possible by coupling a combustion chamber with a model burner to a mass spectrometer via molecular-beam sampling. The molecules in the gas sample are ionized for analysis. Electron-ionization is used for quick overview measurements while laser ionization is used for more selective and sensitive detection of intermediates, e.g. polyaromatic hydrocarbons. In addition, a specially designed ion-transfer module is available for the detection of ionic flame species. Taking advantage of the photoionization properties isomer-selective detection is possible when measurements are performed at the Advanced Light Source (Berkeley, California) or the Swiss Light Source (Villigen, Switzerland) using VUV synchrotron radiation for photoionization.

Molecular-beam mass spectrometry measurements provide unrivaled chemical details and the quantitative gas composition of model flames during combustion. The experimental data offer direct insights into combustion chemistry, providing a clearer understanding of the breakdown of fuel molecules and supplying initial indications of potential pollutant formation. In addition, the data are also useful in developing and validating chemical-kinetic combustion mechanisms. The team works together with experts on chemistry modeling to develop reaction mechanisms.



Prof. Dr. Tina Kasper
tina.kasper@uni-due.de
Telefon: +49 203 379-1854
Telefax: +49 203 379-1250

Publikationen/ References

Fluidodynamik/Fluid Dynamics

C. Weise, J. Menser, S. Kaiser, A. Kempf, I. Wlokas, Numerical investigation of the process steps in a spray flame reactor for nanoparticle synthesis, *Proc. Combust. Inst.* 35 (2015) in press, DOI: 10.1016/j.proci.2014.05.037.
F. Proch, A.M. Kempf, Modelling heat loss effects in the large eddy simulation of a model gas turbine combustor with premixed flamelet generated manifolds, *Proc. Combust. Inst.* 35 (2015) in press, DOI: 10.1016/j.proci.2014.07.036.
M. Rabacal, B.M. Franchetti, F. Cavallo Marincola, F. Proch, M. Costa, C. Hasse, A.M. Kempf, Large eddy simulation of coal combustion in a large scale laboratory furnace, *Proc. Combust. Inst.* 35 (2015) in press, DOI: 10.1016/j.proci.2014.06.023.
F. Proch, A.M. Kempf, Numerical analysis of the Cambridge stratified flame series using artificial thickened flame LES with tabulated premixed flame chemistry, *Combust. Flame* 161 (2014) 2627-2646.
T. Nguyen, P. Janas, T. Lucchini, G. D'Errico, S. Kaiser, A.M. Kempf, LES of flow processes in an SI engine using two approaches: OpenFoam and PsiPhi, *SAE Technical Paper* 2014-01-1121 (2014).
N. Sikalo, O. Hasemann, C. Schulz, A. Kempf, I. Wlokas, A genetic algorithm-based method for the automatic reduction of reaction mechanisms, *Int. J. Chem. Kin.* 46, (2014) 41-59.

Nanopartikel Prozesstechnik/ Nanoparticle Process Technology

A. Sandmann, C. Notthoff, M. Winterer, Continuous wave ultraviolet-laser sintering of ZnO and TiO₂ nanoparticle thin films at low laser powers, *J. Appl. Phys.* 113 (2013) 044310 [1-6].
C. Schilling, R. Theissmann, C. Notthoff, M. Winterer, Synthesis of small hollow ZnO spheres from the gas phase, *Part. Part. Syst. Character.* 30 (2013) 434-437.

C. Notthoff, C. Schilling, M. Winterer, Gas temperature measurements inside a hot wall chemical vapor synthesis reactor, *Rev. Sci. Instr.* 83 (2012) 114903 [1-6].
M. Ali, M. Winterer, Influence of Nucleation Rate on the Yield of ZnO Nanocrystals Prepared by Chemical Vapor Synthesis, *J. Phys. Chem.* 114 (2010) 5721-5726.
R. Djenadic, G. Akgul, K. Attenkofer, M. Winterer, Chemical vapor synthesis and structural characterization of nanocrystalline Zn_{1-x}Co_xO (x = 0–0.50) particles by X-ray diffraction and X-ray absorption spectroscopy, *J. Phys. Chem. C* 114 (2010) 9207-9215.

Reaktive Fluide/Reactive Fluids

O.M. Feroughi, S. Hardt, I. Wlokas, T. Hülser, H. Wiggers, T. Dreier, C. Schulz, Laser-based in situ measurement and simulation of gas-phase temperature and iron atom concentration in a pilot-plant nanoparticle synthesis reactor, *Proc. Combust. Inst.* 35, in press (2015) in press, DOI: 10.1016/j.proci.2014.1005.1039.
S. Faust, M. Goschütz, S.A. Kaiser, T. Dreier, C. Schulz, A comparison of selected organic tracers for quantitative scalar imaging in the gas phase via laser-induced fluorescence, *Appl. Phys. B* (2014) in press, DOI: 10.1007/s00340-00014-05818-x.
N.A. Hamid, S.S. Wennig, S. Hardt, A. Heinzel, C. Schulz, H. Wiggers, High-capacity cathodes for lithium-ion batteries from nanostructured LiFePO₄ synthesized by highly-flexible and scalable flame spray pyrolysis, *J. Power Sources* 216 (2012) 76-83.
E. Friesen, C. Gessenhardt, S. A. Kaiser, T. Dreier, C. Schulz, In-cylinder temperature measurements via time-correlated single-photon counting of toluene-LIF through a fiber-based sensor, *Opt. Lett.* 37 (2012) 5244-5246.

L.R. Cancino, M. Fikri, A.A.M. Oliveira, C. Schulz, Ignition delay times of ethanol-containing multi-component gasoline surrogates: Shock-tube experiments and detailed modeling, *Fuel* 90 (2011) 1238-1244.
O. Welz, J.D. Savee, D.L. Osborn, S.S. Vasu, C.J. Percival, D.E. Shallcross, C.A. Taatjes, Direct kinetic measurements of Criegee intermediate (CH₂O₂) formed by reaction of CH₂I with O₂, *Science* 335 (2012) 204-207.

Thermodynamik/Thermodynamics

T. Bierkandt, T. Kasper, E. Akyildiz, A. Lucassen, P. Obwald, M. Köhler, P. Hemberger, Flame structure of a low-pressure, laminar premixed and lightly sooting acetylene flame and the effect of ethanol addition, *Proc. Combust. Inst.* 35 (2015) in press, DOI: 10.1016/j.proci.2014.05.151.
P. Obwald, P. Hemberger, T. Bierkandt, E. Akyildiz, M. Köhler, A. Bodi, T. Gerber, T. Kasper, In situ flame chemistry tracing by imaging photoelectron photoion coincidence spectroscopy, *Rev. Sci. Instr.* 85 (2014) 025101.
J. Brübach, C. Pflitsch, A. Dreizler, B. Atakan, On surface temperature measurements with thermographic phosphors: A review, *Progr. Energy Combust. Sci.* 39 (2013) 37-60.
M.A. Siddiqi, B. Atakan, Combined experiments to measure low sublimation pressures and diffusion coefficients of organometallic compounds, *Thermochimica Acta* 452 (2007) 128-134.
S. Staude, U. Bergmann, B. Atakan, Experimental and numerical investigations of ferrocene-doped propene flames, *Z. Phys. Chem.* 225 (2011) 1179-1192.
M.A. Siddiqi, B. Atakan, Alkanes as fluids in Rankine cycles in comparison to water, benzene and toluene, *Energy* 45 (2012) 256-263.

Kooperationspartner/ Partners



Das IVG ist eng mit **zentralen wissenschaftlichen Einrichtungen der Universität Duisburg-Essen (UDE)** verbunden. **CENIDE** vernetzt die Forschung in den Nanowissenschaften der UDE mit 58 beteiligten Arbeitsgruppen aus Physik, Chemie, Ingenieurwissenschaften und Medizin. Das Spektrum reicht von der Grundlagenforschung bis zur Herstellung und Verarbeitung von funktionalen Nanomaterialien, z.B. in den einzigartigen Synthesereaktoren des IVG. Das **CCSS** ermöglicht rechenzeitintensive Forschung und umfasst 35 Gruppen, die gemeinsam parallele numerischer Verfahren entwickeln. **CER.UDE** vernetzt die vielfältige Energieforschung in Natur-, Ingenieur-, Wirtschafts-, und Gesellschaftswissenschaften, um einen wichtigen Beitrag zur Entwicklung nachhaltiger Energiesysteme zu liefern. Die **Aninstitute der UDE** sind für das IVG wichtige Partner für angewandte Forschung. Am Institut für Energie- und Umwelttechnik, **IUTA**, entwickeln 150 Mitarbeiter Verfahren zur Abgasreinigung, CO₂-Abtrennung und Filtration. Eine Anlage zur Synthese hochspezifischer Nanopartikel im Kilogramm-Maßstab wurde gemeinsam mit dem IVG aufgebaut. Das Zentrum für BrennstoffzellenTechnik, **ZBT**, erforscht mit mehr als 60 Mitarbeitern neue Materialien, Fertigungsverfahren und Systemkonzepte für Brennstoffzellen, Kraft-Wärmekopplung und Batterien.

The IVG is closely linked to various **Research Centers of the University of Duisburg-Essen (UDE)**. **CENIDE** integrates research in nanosciences that is carried out by 58 groups in the Faculties of Physics, Chemistry, Engineering, and Medicine. The activities range from fundamental research to the synthesis and processing of nanomaterials in the unique large-scale reactors at IVG. **CCSS** enables compute intensive research for its 35 groups, who jointly develop parallel numerical algorithms. **CER.UDE** integrates the diverse activities in energy research, including the natural sciences, engineering, economics, and humanities of groups that work towards the creation of sustainable energy systems. **UDE's affiliated research institutes** are important partners for the applied research at the IVG. At the Institute for Energy and Environmental Technology, **IUTA**, more than 150 employees develop process technologies for flue gas treatment, carbon capture, and filtration. IUTA also operates a facility for the synthesis of nanoparticles on the kilogram scale, which has been designed in collaboration with IVG. The Fuel Cell Research Center, **ZBT**, develops materials, manufacturing techniques, and works on the design of integrated systems including fuel cells, cogeneration plants, and batteries with more than 60 employees.



IVG

Fakultät für Ingenieurwissenschaften
Institut für Verbrennung
und Gasdynamik