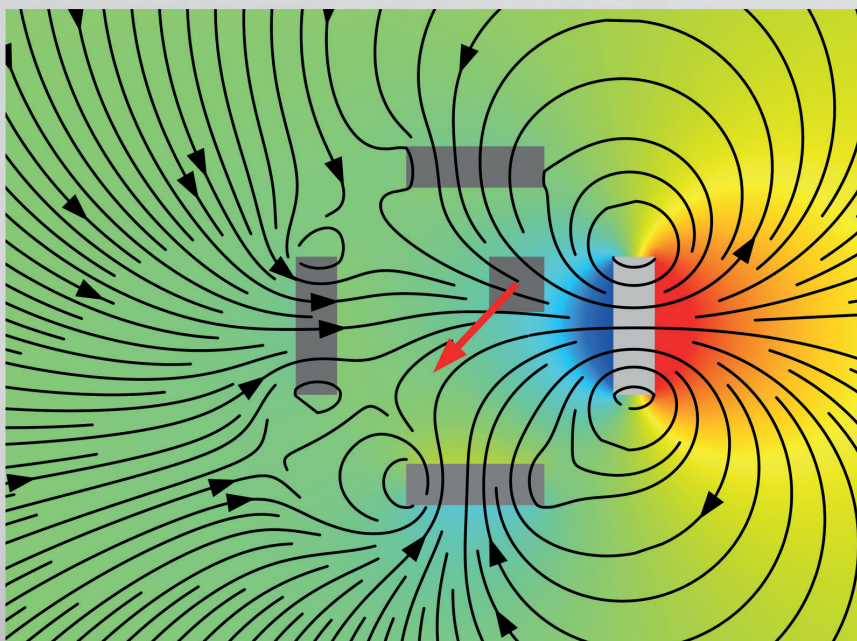




**School of
Engineering**

ICP Institute of
Computational Physics

Institutsbericht 2020



Das Titelbild zeigt die Simulationsresultate eines magnetisch kontrollierten freischwebenden Magneten. In der Abbildung wird die resultierende magnetostatische Kraft durch einen roten Pfeil dargestellt. Die Magnetfeldlinien sind schwarz eingezeichnet.

Vorwort

Mutig sein! Weiterforschen!

Nein, dieses Vorwort wird *nicht* der Corona-Pandemie gewidmet! Einzig, dass ich an dieser Stelle den Mitarbeitenden des ICP danken möchte, dass sie mit ausserordentlichem Einsatz grosser Flexibilität dafür sorgen, dass in Lehre und F&E trotz Notstand alles möglichst reibungslos weiterläuft.

In einer Zeit der Unsicherheit gibt uns eine anspruchsvolle und befriedigende Arbeit Halt. Am ICP profitieren wir von einem guten und engen Austausch und der gegenseitigen Unterstützung. Kreative Köpfe generieren gute Ideen, aber nur im Team werden daraus erfolgreiche Projektanträge und relevante wissenschaftliche Resultate. Interessante Forschung erfordert einen guten Umgang mit Risiken: Am Anfang ist es unsicher, ob Zwischenresultate erreicht werden und wie das Endresultat aussieht. Mutig und kreativ können anfangs verrückte Ideen weiterverfolgt werden. Wer dann bis zum Projektabschluss beharrlich dranbleibt, hat gute Chancen, die gewonnenen wissenschaftlichen Erkenntnisse praxisnah anzuwenden.

Am ICP konnten wir im vergangenen Jahr eine Reihe neuer nationaler und internationaler Forschungsprojekte initiieren und so bereits etablierte Kooperationen pflegen sowie die Zusammenarbeit mit neuen Partnern aufbauen. Neben Mut braucht es da auch eine gewisse Hartnäckigkeit. Es kann passieren, dass man abgelenkt wird, beispielsweise durch komplizierte Abläufe im Projektmanagement oder weil Doktoranden oder internationale Top-Forscher manchmal nur mit einem administrativen Spagat angestellt werden können. Aber sobald die Hürden überwunden sind, erfordern die Projekte wieder die volle Aufmerksamkeit. Dann bieten der Zusammenhalt im Institut und der gemeinsame Forscherdrang den Nährboden für gute Resultate.

Wie gewohnt werden im ersten Teil des Forschungsberichtes nach Schwerpunkten gegliedert die aktuellen Forschungsarbeiten aufgezeigt. Im Anschluss daran geht es um Spin-off-Firmen. Besondere Freude bereitet es mir, die Pläne für eine weitere Ausgründung zu unterstützen: David Schaltegger vom ICP und Pascal Vögeli vom INE werden im Laufe des Sommers 2020 eine Firma gründen und mit dem an der ZHAW erworbenen Fertigkeiten Beratungsdienstleistungen im Bereich der Kreislaufwirtschaft anbieten. Gratulation zu diesem mutigen Schritt und viel Erfolg!

An der School of Engineering und an der ZHAW wird gerade intensiv über Knowhowtransfer und Firmengründungen diskutiert, weshalb wir dieses Jahr dem Thema ein separates Kapitel im ICP-Jahresbericht widmen. Wir stellen fest, dass es immer wieder gelingt, Mitarbeitende zu diesem Wagnis zu motivieren. Im letzten Kapitel berichten wir über die Institutskultur und die konkrete Unterstützung, die diese Aktivitäten fördern.

Viel Spass bei der Lektüre!

Andreas Witzig,
Institutsleiter ICP

Inhaltsverzeichnis

Vorwort	I
1 Multiphysik-Modellierung	1
1.1 Experimentelle Untersuchungen zum Kupferraffinationsprozess	2
1.2 Untersuchung der Deformation von Schwingungsmodi bei Torsionsresonatoren	3
1.3 Simulationsbasierte Kalibrierung von Infusionssystemen	4
1.4 Eine auf einem mehrfach rotierenden Bezugsrahmen (MRF) basierende räumliche Mittelungsmethodik für Rührreaktoren	5
1.5 CFD-Modell der Abgasschadstoffe im Hafen von Tromsø	6
1.6 Modellbasierte Optimierung von CGO-Ni basierten SOFC-Anoden	7
1.7 Entwicklung einer neuen Generation von Hochleistungs-Lufterhitzern	8
1.8 Prüfstand zum Verschweissen von Kunststoffproben	9
1.9 Innovatives luftgestütztes Windenergiesystem	10
1.10 Entwicklung eines Prüfstands zur Bestimmung von Wärmeleitfähigkeiten	11
1.11 Modell-basierte Charakterisierung der Bewegung von Heissluftballons	12
2 Elektrochemische Zellen und Mikrostrukturen	13
2.1 Makro-homogene Modelle für organische Flussbatterien	14
2.2 DeMaPEM: Entwicklung und Vermarktung von Protonenaustauschmembran-Brennstoffzellen für Transportanwendungen	15
2.3 3-D-Modell des Wasser- und Wärmetransports in PEMFCs während der Verdunstungskühlung und -befeuchtung	16
2.4 Modellierung des Kapazitätsverlusts in organischen Redox-Flow-Batterien: Thermodynamik des Transports in konzentrierten Lösungen	17
2.5 Quantifizierung des Einflusses konvektiver Strömung und Mikrostruktur innerhalb poröser Elektroden auf die elektrochemische Leistung von Flussbatterien	18
3 Organische Elektronik und Photovoltaik	19
3.1 KI-unterstützte thermische und elektrische Charakterisierung von grossflächigen PV-Modulen	20
3.2 Dynamik von Ladungstransferzuständen in organischen Halbleiterbauelementen: Kombination von Experiment und Simulation (CTDyn)	21
3.3 Untersuchung des Ladungstransports in organischen Halbleitern mit elektrochemischen Methoden und theoretischen Modellen	22
3.4 Effizienz- und Lebensdaueruntersuchung von organischen Leuchtdioden	23

3.5	Organische Terahertz-Photonik.....	24
3.6	Hardware-Software-Integration und Validierung eines kompakten Terahertz-Systems ..	25
4	Sensorik und Messsysteme	26
4.1	Nachweis von Nanopartikeln in komplexen Umgebungen.....	27
4.2	Tragbares Gerät zur Frühdiagnose von Lymphödemen	28
4.3	Design und Entwicklung von künstlichen Hautmodellen für taktile Sensoranwendungen	29
4.4	Technologien zur Viskositätsregelung für die kontrollierte Applikation von Beschichtungsmaterialien	30
4.5	Artificial-Intelligence-Wärmepumpencontroller.....	31
4.6	Klimadecken-Wärmespeicher erlaubt Reduktion in Fassadendämmung.....	32
4.7	Raumtemperatursensoren im digitalen Zwilling	33
5	Startup-Kultur am ICP	34
	Anhang	38
A.1	Studierendenprojekte.....	39
A.2	Wissenschaftliche Publikationen	40
A.3	Buchkapitel	42
A.4	Konferenzen und Workshops	43
A.5	Vorlesungen	45
A.6	ICP-Mitarbeitende.....	47
A.7	Standort	48

1 Multiphysik-Modellierung

Multiphysik-Modelle sind wirksame Werkzeuge, um eine grosse Bandbreite an physikalischen Phänomenen zu erkunden, und so die Energieflüsse, Strukturen, elektromagnetische, thermodynamische, chemische und akustische Effekte miteinander zu verbinden. Auf diesem Gebiet gab es in den letzten Jahrzehnten enorme Fortschritte. Eine aktuelle Google-Abfrage der sprachlichen Neuprägung «Multiphysik» liefert über 3'640'000 Treffer. Die potenzielle Reichweite der Anwendungen wurde stetig ausgeweitet, zudem wurden numerische Methoden immer ausgefeilter und an die verfügbaren, wachsenden Rechnerkapazitäten angepasst. Heutzutage sind detaillierte physisch-chemische Modelle kombiniert mit belastbaren numerischen Lösungsmethoden beinahe zu einer Notwendigkeit für die Planung und Optimierung multifunktionaler technischer Apparate und Prozesse geworden.

Am ICP machen wir angewandte Forschung auf dem Gebiet der Multiphysik-Modelle und entwickeln Finite-Elemente- ebenso wie Finite-Volumen-Simulationssoftware.

Unsere weitläufige Erfahrung in numerischer Analyse, Modellierung und Simulation erlaubt es uns, simulationsbasierte Optimierung in vielen Fachgebieten erfolgreich anzuwenden. Dabei sind wir mit einer grossen Bandbreite an physikalischen Gleichungen vertraut und finden auch dann numerische Lösungen, wenn die Effekte in enger Wechselwirkung zueinander stehen. Wir entwickeln auch Ein-Zweck-Werkzeuge, die auf die Bedürfnisse unserer Partner spezifisch zugeschnitten sind, und wir nutzen kommerzielle Software dort, wo sie besser geeignet ist.

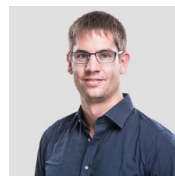
Zu unseren Spezialitäten auf diesem Gebiet gehören die Anwendung, Erweiterung und Entwicklung gekoppelter Modelle mittels unserer eigenen Finite-Element Software SESES, der Fluidodynamik Software OpenFoam (Open Source) und kommerziell angebotener Produkte wie COMSOL.



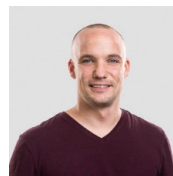
G. Boiger



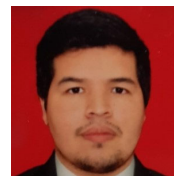
M. Boldrini



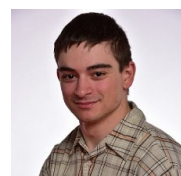
D. Brunner



V. Buff



A. Cabrera



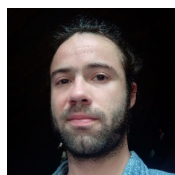
S. Ehrat



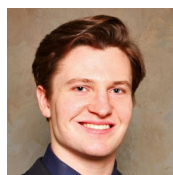
T. Hocker



L. Holzer



M. Hostettler



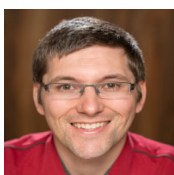
A. Jeffery



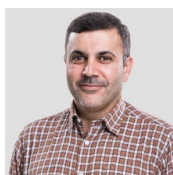
L. Keller



V. Lienhard



P. Marmet



Y. Safa



D. Sharman



B. Siyahhan



S. Spirig



A. Zubiaga

1.1 Experimentelle Untersuchungen zum Kupferraffinationsprozess

Hydrometallurgische Raffination oder Kupferelektrolyse ist das Bottleneck der gesamten Kupfergewinnungskette. Industrielle Kupferelektrolyse ist nach wie vor ein relativ langsamer diffusionsbasierter Prozess, der aber mittels selektiv eingesetzter, erzwungener Konvektion beschleunigt werden kann. Um diese Effekte im Labormassstab nachzubilden und entsprechend zu untersuchen, wurde am ICP eine experimentelle Kupferelektrolyseanlage entwickelt.

Mitwirkende: V. Buff, M. Boldrini, D. Brunner, V. Lienhard, G. Boiger
 Partner: Intern
 Finanzierung: Intern
 Dauer: 2017–2021

Die Kupferelektrolyse wird zur Raffination von Blisterkupfer mit einer Reinheit von etwa 98,5 % bis zu 99,999 % eingesetzt. Dazu wird eine Kathode aus reinem Kupfer in ein Elektrolytbad gegeben, welches aus Kupfersulfat, Schwefelsäure und einigen Zusatzstoffen wie Leim und Alkohol besteht [1]. Die Anode, die gewöhnlich aus Blisterkupfer besteht, wird parallel zur Kathode angeordnet. Während des Prozesses wird zwischen der Kathode und der Anode eine Spannung von etwa 0,3 V angelegt. Als Folge davon löst sich die Anode auf. Die Kupferionen folgen dem elektrischen Feld bis zur Kathode, wo sie sich abscheiden. Verunreinigungen und wertvollere Metalle als Kupfer sinken zu Boden, wo sie als Anodenschlamm aufgefangen werden können. Minderwertige Metalle verbleiben in der Lösung. Neben diesem Prozess tritt ein zweiter kinetischer Effekt auf, welcher auf natürlicher Konvektion beruht: Der Ionentransport von der Anode zur Kathode verändert die Kupferkonzentration im Elektrolyten. Aufgrund der daraus resultierenden Dichteunterschiede beginnt der Elektrolyt an der Anode nach unten und an der Kathode nach oben zu fließen, wodurch ein kreisförmiges Strömungsfeld entsteht.

Die industrielle Anwendung der Kupferelektrolyse ist relativ langsam. Die Kinetik des Ionentransportprozesses basiert auf natürlichen Konvektions- und Diffusionsprozessen. Daher stellt die Elektrolyse den Engpass in der gesamten Kupferlieferkette dar. Interne simulationsbasierte Voruntersuchungen [2] haben gezeigt, dass der bestehende elektrolytische Raffinationsprozess durch gezieltes Eingreifen (erzwungene Konvektion) in die vorherrschenden Ionentransportmechanismen zwischen den Elektrodenplatten deutlich beschleunigt werden kann. Gut kontrollierte, gerichtete und konstruktive Strömungsbedingungen können den langsamen, diffusions- und naturkonvektionsgetriebenen Ionentransport wesentlich unterstützen. Bislang wurde dieser Aspekt bei der Auslegung von derzeit in Betrieb befindlichen Kupferraffinationsanlagen nur ansatzweise berücksichtigt.

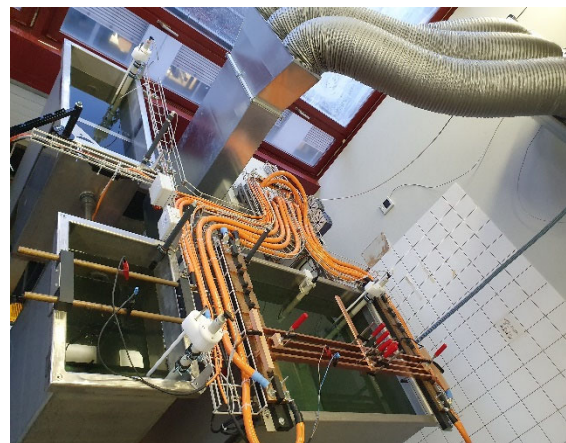


Abb. 1: Inbetriebnahme Kupferelektrolyseanlage, Januar 2020.

Um das Verhalten der entwickelten Strömungsgeräte zu untersuchen, wurde ein Prüfstand gebaut, welcher den industriellen Elektrolyseprozess simuliert. Der Prozess besteht aus zwei Gleichstromquellen, die die gewünschten elektrischen Spannungen und Ströme erzeugen. Die Kupferelektrolyse findet in dem großen Tank statt, in welchem Anoden und Kathoden parallel angeordnet sind [Abbildung 1]. Während der Elektrolyse wird der Elektrolyt zunehmend verunreinigt und erhitzt. Eine Umwälzpumpe transportiert den Elektrolyten aus dem Elektrolysebehälter zum Liberator, welcher die Kupfermenge in der Lösung reguliert. Nach dem Liberator wird der Elektrolyt im Konditionierer behandelt. Dabei wird der Säuregehalt korrigiert und im Elektrolyten gelöste unedlere Metalle ausgefällt. Gegebenenfalls muss auch ein Temperaturmanagementsystem implementiert werden. Nach dem Konditionierer wird der Elektrolyt in den Elektrolysetank zurückgeführt.

Quellen:

- [1] H. Sicius, Kupfergruppe: Elemente der ersten Nebengruppe, 2017.
- [2] D. Brunner et al., Model Based Analysis of Forced and Natural Convection Effects in an Electrochemical Cell, 2017.

1.2 Untersuchung der Deformation von Schwingungsmodi bei Torsionsresonatoren

Die Überwachung von Flüssigkeitseigenschaften wie der Viskosität ist in vielen industriellen Prozessen von entscheidender Bedeutung. Die Verwendung mechanischer Resonatoren ermöglicht die Messung der Viskosität während dem Prozess, was eine schnelle Reaktion und die Aufrechterhaltung einer hohen Qualität eines chemischen oder biochemischen Prozesses ermöglicht. Um diese Sensoren zu entwickeln, werden genaue Modelle benötigt, welche die Fluid-Struktur-Interaktion des Fluids mit dem Resonator vollständig beschreiben.

Mitwirkende: D. Brunner, H. A. Khawaja, G. Boiger
 Partner: Rheonics GmbH, UiT The Arctic University of Norway
 Finanzierung: Innosuisse
 Dauer: 2018–2021

Der in dieser Studie untersuchte Torsionsresonator ist ein rohrförmiger Resonator, welcher aus einem Rohr, Permanentmagneten und Entkopplungsmassen besteht, siehe Abbildung 1.

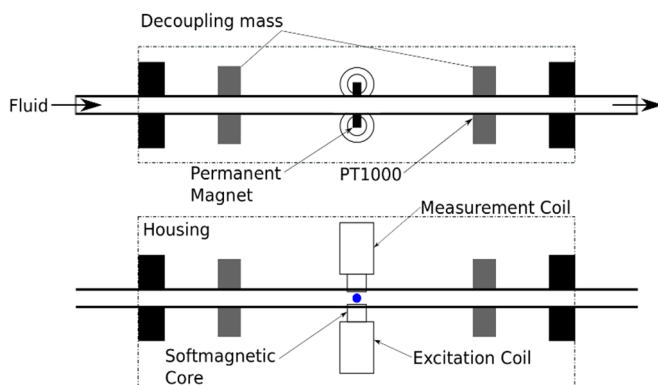


Abb. 1: Schema vom Sensor¹

Das Funktionsprinzip des Sensors beruht auf der Anregung eines Torsionsmodes und der anschliessenden Messung der Schwingung. Basierend auf dem gemessenen Signal werden Dämpfung und Resonanzfrequenz bestimmt, aus welchen die Viskosität des Fluids berechnet werden kann.

Ein wichtiger Aspekt der Modellierung ist die Wechselwirkung der Strukturschwingung mit dem Fluid. Um diese Wechselwirkung vollständig zu beschreiben, wurde der Sensor mit einem starken Fluid-Struktur-Interaktionsmodell modelliert, welches mit LS-DYNA gelöst wurde. Dabei wurden sowohl die Navier-Stokes als auch die Strukturgleichungen gleichzeitig gelöst, wodurch Struktur und Fluid direkt gekoppelt sind. Diese direkte Koppelung wurde in früheren Modellen vernachlässigt, wobei der Resonator im Frequenzbereich unter schwacher Fluid-Struktur-Interaktion modelliert wurde.

Um etwaige Koppeleffekte zu untersuchen, wurde der Sensor mit verschiedenen Trägheitsmassen im Zentrum modelliert, welche die Permanentmagnete repräsentieren. Dies ermöglicht die Variation des Verhältnisses zwischen Trägheits- und Fluidkräften. Dabei übt das Fluid bei geringerer Trägheitslast einen größeren Einfluss auf den Schwingungsmodus aus, was zu einer grösseren modalen Verzerrung führen kann. Die Ergebnisse der Simulation zeigen, dass das Fluid den Schwingungsmodus leicht deformiert. Die relative Deformation des Modes gegenüber einem niederviskosen Fluid $(A - A_{\eta_0})/\max(A)$ ist jedoch gering, sie liegt selbst bei sehr hohen Fluidviskositäten unter 0,5 %.

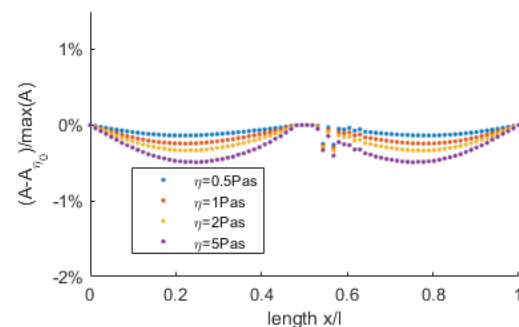


Abb. 2: Relative Deformation des Schwingungsmoden durch die Fluid-Interaktion.

Es wurde gezeigt, dass mechanische Torsionsschwingungen mit Einbezug von starker Fluid-Struktur-Wechselwirkung modelliert werden können, um Effekte wie die Deformation von Schwingungsmodi zu berücksichtigen. Der Deformationseffekt ist jedoch gering und kann in den meisten Fällen, einschliesslich dieser Studie, vernachlässigt werden.

Quellenangabe:

¹ 14th International Conference of Multiphysics, Dubai, UAE, 14-15 December 2019..

1.3 Simulationsbasierte Kalibrierung von Infusionssystemen

Infusionssysteme ermöglichen die kontinuierliche Verabreichung von Medikamenten in flüssiger Form. Für den medizinischen Betrieb ist es notwendig, einen exakten Volumenstrom aufrechtzuerhalten, was mit dem Einsatz von Peristaltikpumpen erreicht wird. Die Kalibrierung solcher Pumpen bedarf jedoch aufwändiger Messungen, was den breiten Einsatz solcher Systeme beeinträchtigt. Mittels eines Simulationsmodells soll das fluiddynamische Verhalten von Pumpe und Infusionssystem abgebildet werden, um eine effizientere Kalibrierung zu ermöglichen und unterschiedliche Konfigurationen des Produkts in Anwendung zu bringen.

Mitwirkende: M. Hostettler, G. Boiger

Partner: Codan Argus AG

Finanzierung: Innosuisse

Dauer: 2019–2021

Beim Einsatz von medizinischen Infusionssystemen ist eine hohe Genauigkeit betreffend der effektiv injizierten Medikamentenmenge erforderlich. Um einen gewünschten Volumenstrom einstellen zu können, werden unter anderem Peristaltikpumpen eingesetzt. Da insbesondere sehr kleine Volumenströme angestrebt werden, ist die direkte volumetrische Bestimmung der Durchflussmenge nicht möglich, die Durchflussrate muss aus den System- und Pumpenparametern bestimmt werden. Für die dafür notwendige Kalibrierung der Pumpe sind jedoch individuelle und höchst umfangreiche Messungen notwendig, welche den effizienten Einsatz solcher Geräte wesentlich einschränken.

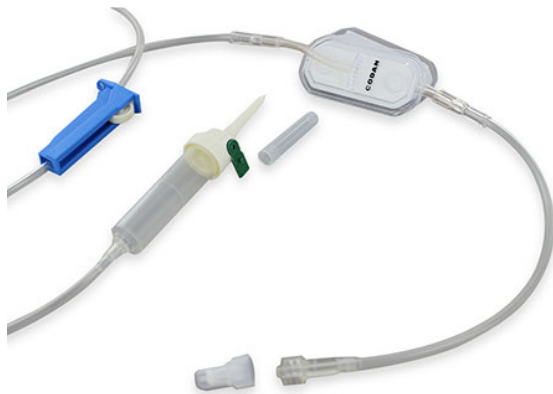


Abb. 1: Verschiedene Komponenten eines Infusionssystems (v. l. n. r. Durchflussregler, Tropfenzähler, Filter und Schlauch).

In der vorliegenden Arbeit wird das grundlegende Strömungsverhalten in Schlauchsystem und Peristaltikpumpe untersucht und ein Modell entwickelt, um die Kalibrierung solcher Systeme effizienter gestalten zu können.

Damit lassen sich auch beliebige Konfigurationen der im Infusionssystem verbauten Komponenten (siehe Abb. 1) besser realisieren und es wird eine breitere Anwendung des Produkts ermöglicht.

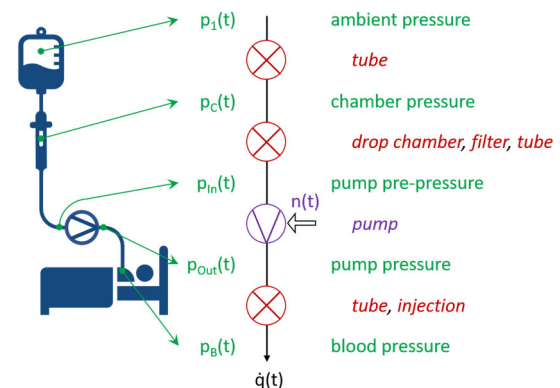


Abb. 2: Modell des Infusionssystems mit Pumpe und verschiedenen Komponenten.

Im Rahmen des Projekts werden umfassende experimentelle Messungen eingesetzt, um das Verhalten von sämtlichen strömungsführenden Komponenten individuell charakterisieren zu können. Für die Charakterisierung der Pumpe werden verschiedene numerische Modelle (von simplen eindimensionalen Methoden bis hin zu detaillierten CFD-Simulationen inklusive Fluid-Struktur-Kopplung) untersucht und mit Messungen verglichen.

Anhand der Messdaten der Einzelkomponenten und der Erkenntnisse aus der Pumpencharakterisierung wird das strömungsdynamische Modell entwickelt (siehe Abb. 2) und mittels spezifischer Experimente validiert.

1.4 Eine auf einem mehrfach rotierenden Bezugsrahmen (MRF) basierende räumliche Mittelungsmethodik für Rührreaktoren

Rührreaktoren spielen eine wesentliche Rolle bei der Zubereitung von chemischen Gemischen in der pharmazeutischen Industrie. Daher sind effiziente Simulationsmethoden zur Bewertung der Leistung dieser Reaktoren in diesem Bereich von grösster Bedeutung. In dieser Studie wird eine MRF-basierte CFD-Methodik (Computational Fluid Dynamics) für Rührreaktortanks entwickelt. Die zugrundeliegende Idee besteht darin, eine Reihe von stationären MRF-Strömungsfeldern zu kombinieren, um die Verteilung einer bestimmten chemischen Spezies innerhalb des Tanks vorherzusagen und dabei rechenaufwändige, instationäre Simulationen zu vermeiden.

Mitwirkende: B. Siyahhan, G. Boiger
 Partner: Novartis Pharma AG
 Finanzierung: Direktfinanzierung, Novartis Pharma AG
 Dauer: 2020

Die Simulation von Rührreaktoren ist herausfordernd, weil sie dynamische Netzbereiche erfordert, in denen sich die Rechenzellen zusammen mit dem Laufrad drehen. Open-FOAM, eine Open-Source-CFD-Simulationsbibliothek, bietet mehrere Solver, die mit solchen dynamischen Netzen umgehen können. Diese Solver sind jedoch transient und rechnerisch sehr teuer, weil stringente Bedingungen bezüglich der Grösse der erlaubten Zeitschritte bestehen. Wahlweise kann eine MRF-basierte Methode verwendet werden, bei der die Körperkräfte aufgrund der Rotation für einen Bereich um das Laufrad herum eingeleitet werden. In diesem Fall bleibt das gesamte Netz stationär. Auf diese Weise können schnelle, stationäre Simulationen für eine feste Konfiguration des Laufrads durchgeführt werden. In dieser Studie wird die Recheneffizienz der MRF-Simulationen genutzt, indem eine Reihe von MRF-Simulationen mit dem Laufrad in unterschiedlichen Konfigurationen kombiniert wird, um ein räumlich gemittelttes Strömungsfeld abzuleiten. Dieses stationäre Strömungsfeld wird subsequent in einer transienten passiven skalaren Simulation verwendet, um die Konzentration der chemischen Spezies im Tank aufzulösen.

In einem ersten Schritt werden Netze bei verschiedenen Laufradkonfigurationen erzeugt. Ein python-basiertes Skript dreht automatisch die Eingabe-Geometrie um vorgegebene Drehwinkel, wie in Abbildung 1 dargestellt. Dann werden die generierten Domänen mit cfMesh, einem hoch automatisierbaren Open-Source-Mesher, vernetzt. Anschliessend wird das stationäre Strömungsfeld in jedem Bereich simuliert.

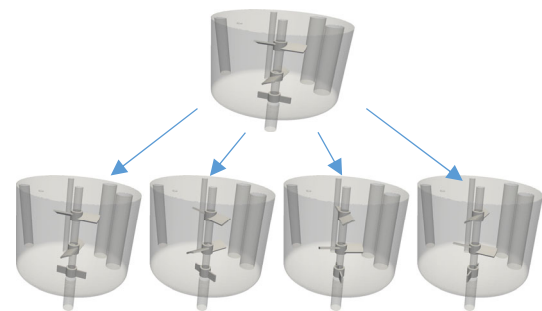


Abb. 1: Das Laufrad der Referenzgeometrie wird um einen vorgegebenen Inkrementalwinkel gedreht.

Danach werden diese Strömungsfelder auf eine Domäne ohne rotierende Teile abgebildet und dann räumlich gemittelt (Abbildung 2). Schließlich wird die Konzentration der chemischen Spezies auf dem gemittelten Feld simuliert (Abbildung 3).

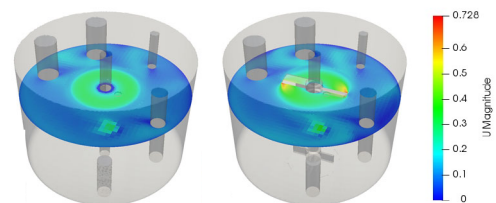


Abb. 2: Links das gemittelte Geschwindigkeitsfeld in der Domäne ohne die Laufräder, im Vergleich zum Geschwindigkeitsfeld einer MRF-Lösung auf der rechten Seite.

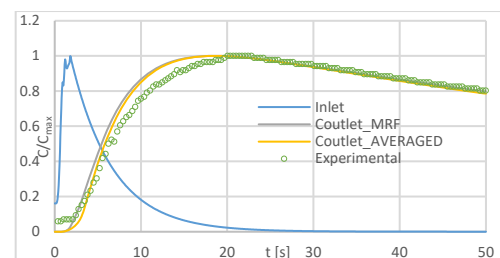


Abb. 3: Die Mittelwertbildungsmethode Coutlet_AVERAGED stimmt mit den experimentellen Daten besser überein als die MRF-Simulation, Coutlet_MRF, mit fester Laufradkonfiguration.

1.5 CFD-Modell der Abgasschadstoffe im Hafen von Tromsø

Die Abgasemissionen von Industrieaktivitäten und Schornsteinen grosser Boote können eine Reihe von Schadstoffen in die nahegelegenen Städte tragen, was sich negativ auf die Lebensqualität und Gesundheit der Bürger und Ökosysteme auswirken kann. Diese werden durch den lokalen Wind über bewohnte Gebiete transportiert und Spuren davon erreichen das Strassenniveau, was zu einer Verunreinigung der Luft führt. Die Hauptschadstoffe sind Abfallprodukte der industriellen Tätigkeit oder der Verbrennungsprozesse, die in der Gasphase oder als Feinstaub ausgestossen werden. Die Schadstoffe in der Gasphase verteilen sich in der Umgebungsluft und werden durch den Wind über bewohnte Gebiete transportiert. Ohne Atmosphärensimulationen im realen Massstab ist der lokale Grad der Verschmutzung nur schwer zu bestimmen. Ein realistisches Simulationsmodell soll die atmosphärischen Bedingungen (Temperatur, Wind, Druck), die lokale Topographie und die Eigenschaften der Emissionsfahne (Temperatur, Verbrennungsnebenprodukte, Höhe des Schornsteins) beschreiben.

Mitwirkende: A. Zubiaga, H. A. Khawaja, G. Boiger
 Partner: UiT The Arctic University of Norway, Tromsø, Norway
 Finanzierung: Intern
 Dauer: 2019

Die wichtigsten Schadstoffe sind Abfallprodukte der industriellen Tätigkeit oder der Verbrennungsprozesse, hauptsächlich Kohlenmonoxid (CO), Stickstoff- und Schwefeloxide (NO_x , SO_x) in der Gasphase und feste Partikel.

Kohlendioxid (CO_2) ist der Hauptbestandteil im Abgas. Obwohl es keine gesundheitlichen Auswirkungen hat, ist das strömungsdynamische Verhalten von CO_2 vergleichbar mit und repräsentativ für jeden gasförmigen Schadstoff. In der vorliegenden Arbeit haben wir eine umfassende Studie über die Wirkung des CO_2 -Ausstosses aus den Schornsteinen am Hafen von Tromsø (Norwegen) auf die Schadstoffbelastung in der Stadt durchgeführt.

Wir haben die rechnergestützte fluiddynamische Modellierung der CO_2 -Konvektion und der Diffusion in der Luft verwendet. OpenFoam® wurde für die Simulation der Gasmischung verwendet. Die Navier-Stokes-Gleichung wurde gelöst, einschließlich Kompressibilitätseffekte und Auftriebseffekte perfekter

Gase. Turbulenzen wurden mit Hilfe von Reynoldsgemittelten Navier-Stokes-Modellen (RANS) behandelt. Die Online-Plattform KALEIDOSIM® wurde verwendet, um grosse Parameterstudien gleichzeitig durchzuführen, wodurch der Arbeitsablauf wesentlich verbessert wurde.

Eine hohe Windgeschwindigkeit und Schornsteinhöhe gelten als Hauptfaktor für die Verringerung der Schadstoffkonzentration in der Umgebung des Emissionsausstosses. Andererseits bestimmt die Windrichtung, welche Zonen stärker von den Emissionen des Abgases betroffen sind. Die lokale Orographie hat ebenfalls einen grossen Einfluss auf die Gasströmung und kann die Ablagerung von Emissionsgasen verstärken oder verringern¹.

Die vorgestellten Ergebnisse werden dazu beitragen, die Auswirkungen von Schadstoffen im Alltag der lokalen Bevölkerung zu bewerten.

Quellenangabe:

¹ 14th International Conference of Multiphysics, Dubai, UAE, 14-15 December 2019.

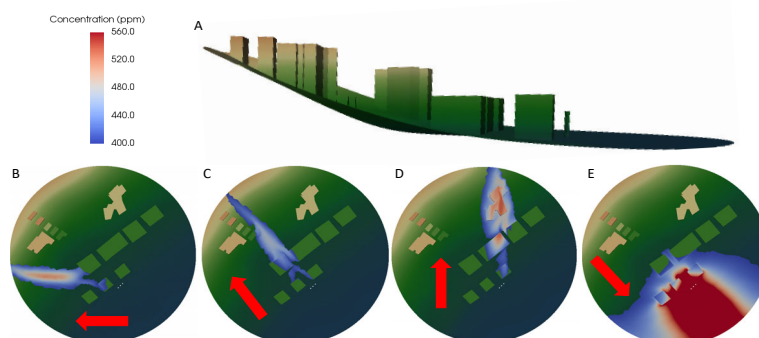


Abb. 1: A) Das topographische Modell zeigt die lokale Orographie im Hafen von Tromsø. Die Draufsichten stellen die Schadstoffkonzentrationen auf Strassenniveau für 4 Windrichtungen dar: B) West, C) Nordwest, D) Norden und E) Südosten. Die Schadstoffablagerungen im Meer, E, wird durch das Fehlen orographischer Hindernisse für den Wind verstärkt, im Vergleich zu C, wo der Wind bergauf landeinwärts weht.

1.6 Modellbasierte Optimierung von CGO-Ni basierten SOFC-Anoden

Kosten und Lebensdauer sind zurzeit die limitierenden Faktoren für den breiteren Einsatz von Festoxid-Brennstoffzellen (SOFC) mit Erdgas zur kombinierten Erzeugung von elektrischem Strom und Wärme. Darum ist eine systematische Optimierung von Materialien und Zell-Design erforderlich, um den Einsatz kostengünstigerer Komponenten zu ermöglichen und gleichzeitig Effizienz und Lebensdauer zu steigern. In unserem Ansatz setzen wir auf digitales Materialdesign (DMD), wobei Methoden der Multiphysik-Simulation, 3D-Mikrostrukturcharakterisierung (Tomographiedaten), und elektrochemische Impedanzspektroskopie (EIS) kombiniert werden. Basierend auf dem DMD-Ansatz werden die Beziehungen zwischen Materialeigenschaften, Mikrostruktur, Zell-Design und Performance auf einem quantitativen Level erarbeitet. Dieser Ansatz ermöglicht die Definition von Design-Richtlinien für optimierte Elektroden und beschleunigt den Innovationszyklus für zukünftige SOFC-Geräte.

Mitwirkende: P. Marmet, L. Holzer, T. Hocker, J. Brader, J. Grolig, H. Bausinger, A. Mai

Partner: Hexis

Finanzierung: Bundesamt für Energie

Dauer: 2019–2022

Für die nächste Generation von SOFC (Solid Oxide Fuel Cells) verlangt der Markt nach höherem Wirkungsgrad, längerer Lebensdauer und niedrigeren Systemkosten. Um diesen Anforderungen gerecht zu werden, arbeiten wir an neuen Anodenkonzepten, die auf dotiertem Ceroxid mit Nickel in Kombination mit kostengünstigen ferritischen Interkonnektoren basieren. Aufgrund der komplexen physikalisch-chemischen Prozesse, die den Gastransport in den Poren, den Transport von Ionen und Elektronen in der Ceroxidphase, die Brennstoffoxidationsreaktion an der Oberfläche des Ceroxids usw. beinhalten, gibt es zahlreiche entgegengesetzte Anforderungen, welche den Entwicklungsprozess erschweren. Für eine systematische Optimierung des Systems sind daher ausgefeilte Methoden erforderlich, die sowohl mathematische Modelle als auch experimentelle Methoden umfassen.

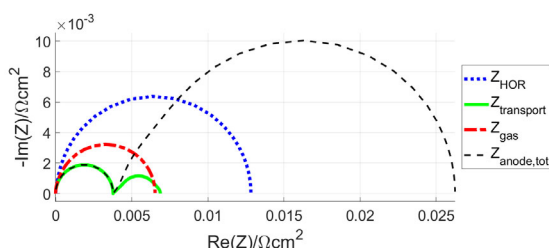


Abb. 1: Simuliertes Anoden EIS-Spektrum mit separierten Impedanzprozessen: Z_{HOR} = Wasserstoffoxidationsreaktion, $Z_{transport}$ = Transport der Ladungsträger, Z_{gas} = Gasimpedanz, $Z_{anode,tot}$ = Totale Impedanz der Anode.

In der SOFC-Forschung ist die elektrochemische Impedanzspektroskopie (EIS) ein wesentliches Charakterisierungswerkzeug, das als Grundlage für die Materialoptimierung auf Elektroden-, Zellen- und Stack-Level dient. Überlappende Prozesse in den EIS-Spektren und fehlendes Verständnis der komplexen Vorgänge machen es jedoch schwierig, die EIS-Spektren richtig zu interpretieren. Am ICP entwickelte Multiphysik-Simulationsmodelle mit

AC- und DC-Modi ermöglichen die Simulation der EIS-Spektren sowie des DC-Verhaltens während des normalen Zellbetriebs. Damit wird ein grundlegendes Verständnis der komplexen Prozesse und eine Separierung der EIS-Spektren erreicht. Mit einem kalibrierten Simulationsmodell können die Auswirkungen von Designanpassungen (z.B. Material- und Mikrostrukturvariationen) auf die Zellleistung beurteilt werden. Ein wesentlicher Punkt ist dabei die korrekte Beschreibung der Mikrostruktureffekte.

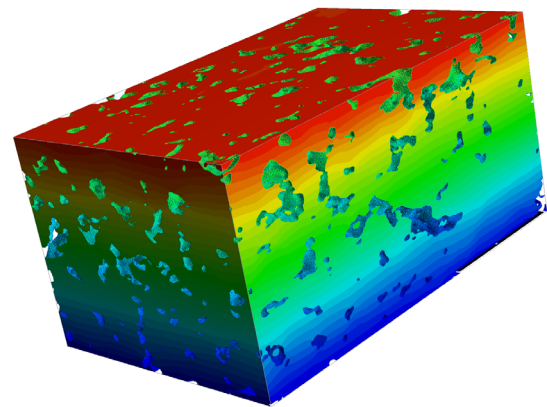


Abb. 2: Potentialabfall entlang einer Anodenmikrostruktur zur Bestimmung der effektiven Leitfähigkeit mit GeoDict ©.

Die Mikrostrukturanalyse auf der Grundlage der FIB-Tomographie ermöglicht die Quantifizierung morphologischer Merkmale (Tortuosität, Porosität usw.) und der damit verbundenen Transporteigenschaften. Mit dem Digital Materials Design (DMD)-Ansatz kann der Einfluss von Mikrostrukturvariationen auf die Zelleistung bestimmt werden. Indem die Beziehung zwischen Materialeigenschaften, Mikrostruktur, Zelldesign und Leistung hergestellt wird, können Richtlinien für ein neues Anodenmaterialdesign abgeleitet werden. Dies ermöglicht eine schnellere und systematischere Entwicklung neuer SOFC-Elektroden.

1.7 Entwicklung einer neuen Generation von Hochleistungs-Lufterhitzern

Die kontrollierte Erwärmung von Luftströmungen spielt bei einer Reihe von industriellen Prozessen eine grosse Rolle. Leister Technologies AG ist ein weltweit führender Hersteller für Kunststoffschweiss- und Prozessluftgeräte, die auf der effizienten und zuverlässigen Zufuhr von Heissluft basieren. In Zusammenarbeit mit dem Team von D. Penner und dem Team von S. Koll erforschen wir in diesem Projekt neue Heizmaterialien und Herstellungsverfahren zur Entwicklung einer neuen Generation von Hochleistungs-Lufterhitzern für den Einsatz in zukünftigen Leister-Produkten.

Mitwirkende: G. Boiger, S. Ehrat, T. Hocker, G. Sartoris, B. Siyahhan

Partner: ZHAW-IMPE-Team D. Penner, ZHAW-ZPP-Team S. Koll, Leister Technologies AG

Finanzierung: Innosuisse

Dauer: 2018–2020

Fortschritte bei der Entwicklung neuer Materialien und Herstellungsmethoden bieten ein grosses Potenzial zur Verbesserung von Lufterhitzern bei reduzierten Herstellungskosten. Da die Auswahl an potenziellen Heizmaterialien und Designs sehr gross ist, wäre die Optimierung allein durch trial and error aufgrund der grossen Anzahl wählbarer Parameter unmöglich. Stattdessen werden validierte Computermodelle eingesetzt, um ein grundlegendes Verständnis der ablaufenden physikalischen Phänomene zu gewinnen und umfangreiche Parameterstudien für Optimierungszwecke durchzuführen.

In Zusammenarbeit mit unseren Partnern vom IMPE, ZPP und der Leister Technologies AG entwickeln wir neue Heizelemente aus elektrisch leitenden Keramiken auf Basis unserer Patentanmeldung WO2019185291A1. Die spätere Herstellung wird auf einem kosteneffizienten Spritzgussverfahren basieren. Um eine Überhitzung bei höherer Leistungsaufnahme zu vermeiden, wurde ein elektro-mechanisch-thermo-fluidisches Hybrid-FE/FV-Modell entwickelt und in unserer inhouse Multiphysik-Simulationssoftware SESES implementiert.

Das Modell setzt sich aus dem eigentlichen Heizelement, der umgebenden Luftströmung sowie dem Gehäuse zusammen. Alle Materialparameter sind temperaturabhängig, was für die Reproduzierung des thermischen Verhaltens eines realen Heizelements unumgänglich ist. Das Modell berechnet die erzeugte Wärme aus dem elektrischen Stromfluss im Heizelement. Die Wärme wird durch erzwungene Konvektion an die umgebende turbulente Luftströmung und durch Oberflächenabstrahlung an das Gehäuse übertragen. Die thermischen Materialparameter des Modells wurden durch IR-Temperaturmessungen unter Verwendung einer vereinfachten Probengeometrie kalibriert. Wie in Abb. 1

gezeigt, ist die Übereinstimmung zwischen Modell und IR-Daten sehr gut.

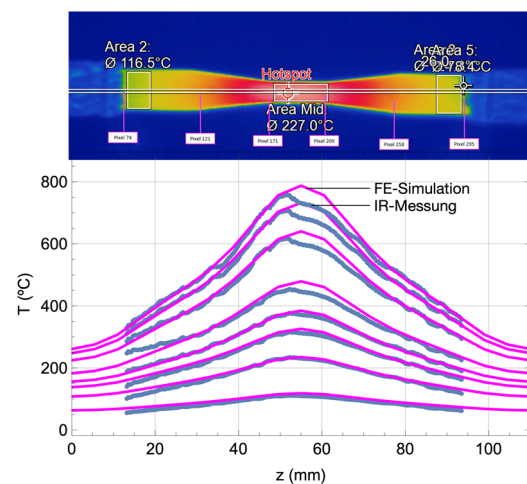


Abb. 1: Modellkalibrierung auf der Grundlage von IR T-Messungen einer Probenheizung bei verschiedenen Leistungsniveaus.

Abbildung 2 zeigt die T-Verteilung eines typischen Heizelements. Da der zu erwärmende Luftstrom von hinten eintritt und vorne austritt, kommt es von hinten nach vorne zu einem enormen Temperaturanstieg von fast 1000 °C.

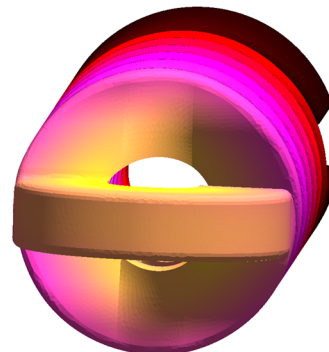


Abb. 2: Temperaturen eines neu entwickelten Lufterhitzers unter stationären Betriebsbedingungen. Hellere Farben weisen auf höhere Temperaturen hin. Das verwendete SESES FE/FV-Modell besteht aus etwa 10 Millionen Elementen.

1.8 Prüfstand zum Verschweissen von Kunststoffproben

Infrarot-Schweissen ist eine etablierte Methode zum Verbinden von Kunststoffrohren. Die Rohre werden dabei an ihren Stirnflächen über eine Infrarotheizung solange erwärmt, bis der Kunststoff schmilzt. Anschliessend werden die Rohre mit einer definierten Kraft zusammengepresst und abgekühlt. Durch das kontaktlose Aufwärmen der Rohre weisen die Schweissnähte eine hohe Reinheit auf. Aus diesem Grund wird dieses Verfahren beispielsweise für die Herstellung von Rohrleitungen in Reinräumen der Halbleiterindustrie verwendet. Auf einem Prüfstand sollen anhand einfacher Kunststoffproben verschiedene Heizsystemlösungen im Hinblick auf eine optimale Schweissnahtqualität evaluiert werden.

Mitwirkende: N. Jenal, M. Gorbar, S. Spirig, T. Hocker, C. Brändli

Partner: ZHAW-IMPE-Teams C. Brändli, D. Penner, Georg Fischer Piping Systems

Finanzierung: Innosuisse

Dauer: 2018–2021

In Zusammenarbeit mit Georg Fischer Piping Systems wurde ein Prüfstand entwickelt, um quaderförmige Kunststoffproben mit dem Infrarot-Schweisverfahren zu verbinden. Unterschiedliche Heizsystemkonzepte können auf dem Prüfstand im Hinblick auf eine optimale Schweissnahtqualität getestet werden, siehe Abbildung 1.

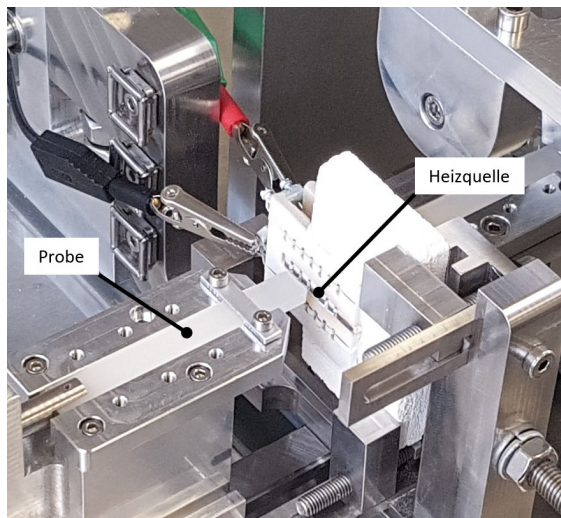


Abb. 1: Prüfstand zum Verschweissen von Kunststoffproben

Ein Schweissvorgang besteht aus drei Schritten. Zuerst werden die Stirnflächen der Proben erwärmt, bis der Kunststoff schmilzt. Anschliessend werden die Proben zusammengepresst. Danach erfolgt die Abkühlung bis sich die Schweissnaht verfestigt. Die Stirnflächen der Proben stehen beim Aufwärmen nicht in Kontakt mit dem Heizsystem. Aus diesem Grund werden die Enden primär durch Wärmestrahlung erwärmt. Ein neuartiges Heizsystem soll eine möglichst gleichmässige Schmelzfront liefern.

Letztere bezeichnet den Übergang zwischen dem flüssigen und festen Kunststoff nach dem Aufwärmprozess, siehe Abbildung 2.

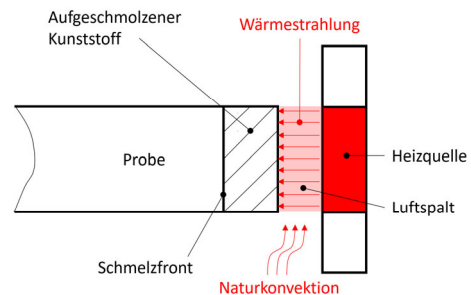


Abb. 2: Kontaktloses Aufwärmen von quaderförmigen Kunststoffproben.

Aus den verschweissten Proben werden Mikrotomschnitte erstellt, um die Form der Schmelzfront unter einem Lichtmikroskop zu untersuchen, siehe Abbildung 3. Diese Aufnahmen dienen zur Evaluation des besten Heizsystems sowie zur Validierung der CFD-Modelle, über die der gesamte Schweissprozess nachgebildet wird.

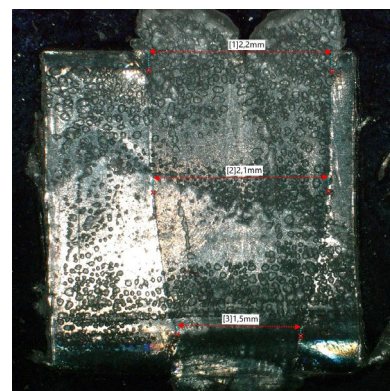


Abb. 3: Mikrotomschnitt unter Mikroskop

1.9 Innovatives luftgestütztes Windenergiesystem

Klassische Windkraftanlagen sind in Regionen mit schwachen und stark fluktuierenden Winden in Bodennähe häufig nicht praktikabel. Hingegen sind Winde in mehreren hundert Metern Höhe über dem Boden generell viel stärker und beständiger. Um in dieser Höhe Windenergie zu produzieren, kommen in der Luft schwebende Windturbinen zum Einsatz, die den im Generator produzierten Strom über eine Kabelverbindung zur Erde schicken. Solch eine neuartige "Lighter-Than-Air" (LTA) Windkraftanlage wird vom ICP-Spin-off Zarawind entwickelt. Das System ist so konzipiert, dass es in grosser Höhe in einem nahezu stationären Zustand betrieben werden kann und aufgrund der dort herrschenden Starkwinde eine hohe Effizienz aufweist. In diesem Forschungsprojekt charakterisieren wir die Aerodynamik eines neuen innovativen Rotorkonzepts für eine LTA-Windkraftanlage. Wir untersuchen die Einflüsse der Geometrie auf die Leistung des neuen Windkraftrotors und analysieren die Haltbarkeit der verwendeten Rotormaterialien.

Mitwirkende: Y. Safa

Partner: Zarawind, ZHAW-IMPE-Team C. Brändli, ZHAW-ZAV-Team L. Manfredi

Finanzierung: BfE Bundesamt für Energie

Dauer: 2018–2020

In mehreren hundert Metern Höhe über dem Boden sind die Windströmungen stärker und viel beständiger als in Bodennähe. Um die dort herrschende Windkraft zu nutzen, stellt Zarawind ein neues Konzept eines Windkraft-Rotor-Generator-Systems vor, das von einem Aerostaten getragen wird, um Strom durch eine Fesselkabelverbindung zum Boden zu schicken. Die Effizienz dieses Konzepts ergibt sich aus folgenden Fakten: Erstens kann das System unabhängig von den Windverhältnissen in grossen Höhen gehalten werden. Zweitens gewährleistet es eine kontinuierliche und wirtschaftliche Nutzung der Windenergie bei hohem Leistungskoeffizienten. Dieser basiert auf einem innovativen vertikalen gegenläufigen Rotor, der als erster mit einem flexiblen Blatt realisiert wurde, das mit passiver Faltung und Entfaltung arbeitet und so die aerodynamische Leistung erhöht, siehe Abb. 1. Die vorher genannten Vorteile führen zu einer Erhöhung der Nutzlast und zu einer Verringerung der Installationskosten.

Der omnidirektionale Vertikalrotor ist in der Tat durch ein Spannungsintegritätskonzept (Tensegrity) aufgebaut. Dies gewährleistet eine zuverlässige Drehmoment-Übertragung durch die Rotorstufen mit massereduzierten Bauteilen, die biege- und schubfrei sind. So kann der Rotor eine hohe Leistung bei kontrollierter Nutzlast des Auftriebssystems aufrechterhalten.

Unter realen Windströmungen sind der schwebende Aerostat, der Rotor und das Halteseil schwankenden aerodynamischen Widerstandskräften ausgesetzt. Dies führt zu einer unvermeidlichen Neigung des vertikal angebundenen Rotors. Sich gegenseitig konkurrierende Effekte zwischen Fesselzug, Fesselseil-Last und Aerostat-Kräften bestimmen die Kurvenform des Fesselseils, siehe Abb. 1. Tatsächlich variiert der Anbindewinkel mit der Höhe zwischen Aerostats und Befestigungspunkt am Boden. Die Untersuchung verschiedener Aerostatmodelle ergab, dass der Anbindewinkel je nach Aerostatmodell von Null bei Windstille bis zu 45 Grad bei starkem Wind reichen kann. Eine unkontrollierte Krümmung des Halteseils könnte jedoch die Leistung des Rotors beeinträchtigen, indem er an Höhe verliert. Um eine stationäre Positionierung des Aerostats in grösseren Höhen zu gewährleisten, könnte man das Auftriebsvolumen entsprechend dimensionieren, was jedoch die Installationskosten des Systems stark erhöhen würde.

Anstatt dessen erzeugt der neu entwickelte Rotor eine Aufwärtsschubkraft, siehe Abb. 1. Diese Kraft wirkt bei starkem Wind den Fesselkrümmungseffekten entgegen. Der Rotor ist wie ein bionisch inspiriertes Konzept konstruiert, bei dem die Blätter die Interaktion der Vögel mit dem Wind nachahmen. Das flexible Blatt wird in der Aufwindbewegung passiv gefaltet, um eine Flügelkonfiguration anzunehmen, die Auftriebskräfte erzeugt und so die Rotation und Elevation antreibt. Für eine erfolgreiche Implementierung der Technologie muss der Rotor eine bestimmte aerodynamische Schwellenleistung gewährleisten. Zentral ist deshalb die Frage nach einem guten Kompromiss zwischen Blattleistung und Nutzlastkosten. In diesem vom Bundesamt für Energie (BFE) unterstützten Projekt werden die Forschungsaufgaben zwischen den ZHAW-Instituten ICP, IMPE und ZAV geteilt. Dabei werden numerische Simulationen, Materialtests, Modellkonstruktionen, Windkanalexperimente und Konstruktionsanalysearbeiten miteinander kombiniert.

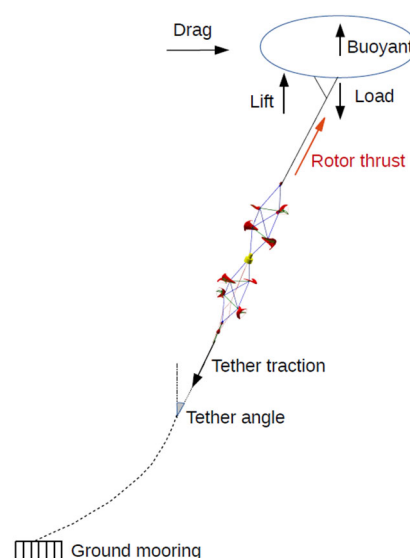


Abb. 1: Mechanismus des in grossen Höhen schwebenden Zarawind-Systems. Der vom Rotor erzeugte Aufwärtsschub wirkt der Neigung entgegen.

1.10 Entwicklung eines Prüfstands zur Bestimmung von Wärmeleitfähigkeiten

Computersimulationen von Wärme- und Stoffflüssen sind in der Entwicklung thermisch angeregter Systeme heutzutage nicht mehr wegzudenken. Entscheidend für deren Genauigkeit sind die darin verwendeten Stoffparameter. Speziell Wärmeleitfähigkeiten zur Beschreibung von Wärmeleitungsphänomenen sind häufig nur grob und nur bei Raumtemperatur bekannt. Deshalb entwickeln wir einen Prüfstand, der Wärmeleitfähigkeiten von Feststoffen und Verbundanordnungen über einen grossen T-Bereich misst.

Mitwirkende: S. Ehrat, T. Hocker

Partner: ZHAW-IMPE: Team D. Penner & Team C. Brändli, Georg Fischer Piping Systems

Finanzierung: Innosuisse

Dauer: 2018–2021

In unseren F&E-Projekten spielen Wärmeleitungsphänomene eine wichtige Rolle. Die zur Optimierung solcher Systeme eingesetzten Computermodelle werden in ihrer Aussagekraft und Genauigkeit durch die im Modell verwendeten Wärmeleitfähigkeiten eingeschränkt. Letztere zeigen meist eine starke Temperaturabhängigkeit und hängen bei mikrostrukturierten Materialien zudem von deren Porosität ab. Weitere Unsicherheiten ergeben sich durch thermische Kontaktwiderstände zwischen verschiedenen Materialschichten, die nur über Wärmeleitungsmessungen der ganzen Verbundanordnung ermittelt werden können. Aus diesen Gründen haben wir uns dazu entschieden, einen Prüfstand zur Bestimmung von Wärmeleitfähigkeiten von Feststoffen zu entwickeln.

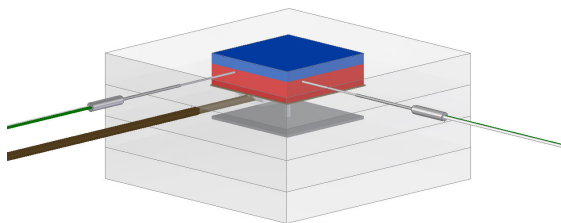


Abb. 1: CAD-Darstellung des Prüfstandes mit Probenmaterial in Blau, Kupferblock in Rot, Heizfolie in Braun, sowie Thermoelementen (Grün, Weiss) und erste Isolationsschicht (Transparent).

Abbildung 1 zeigt den simplen Aufbau des geplanten Prüfstandes. Die Probe (blau) wird mittels eines beheizten Kupferblockes (rot) auf die gewünschte Temperatur gebracht und dort gehalten. Mit der gemessenen Temperaturdifferenz zwischen der Ober- und Unterseite der Probe im stationären Zustand sowie der bekannten Heizleistung und der Probendicke kann die Wärmeleitfähigkeit der Probe berechnet werden. Die Temperaturen an der Probeunterseite werden mittels Thermoelemente vom Typ K gemessen, während eine Wärmebildkamera für die Temperaturmessung an der Oberseite vorgesehen ist. Um aus den Wärmebildern möglichst genaue T-Werte zu extrahieren, muss zusätzlich die Emissivität der untersuchten

Proben bestimmt werden. Eine elektrische Widerstandsheizung ist in eine MICA-Folie eingebettet (braun), welche Temperaturen bis 500 °C erreicht. Für die Auslegung der thermischen Isolation sind CFD-Simulationen zum Zuge gekommen. Als optimale Isolationslösung ergab sich eine Verbundanordnung verschiedener Dämmmaterialien. Als erste Isolationsschicht kommt eine nanoporöse Dämmplatte auf Basis von Siliciumdioxid zum Einsatz. Auf diese Dämmung folgt eine Schicht aus Steinwolle und eine abschliessende XPS-Dämmplatte.

Die Abbildung 2 zeigt die stationäre Temperaturverteilung dieser Anordnung auf. In der Bildmitte sind der beheizte Kupferblock und die darüber platzierte Probe zu erkennen. Diese Bauteile sind von der nanoporösen Dämmung umgeben. Diese Dämmschicht ist nur 3 cm dick, reduziert aber die Temperatur um 300-400 °C. Die Oberseite ist gegen die Umgebung offen und somit luftgekühlt. Dies ist in der Abbildung anhand der über Naturkonvektion aufsteigenden heissen Luft zu sehen.

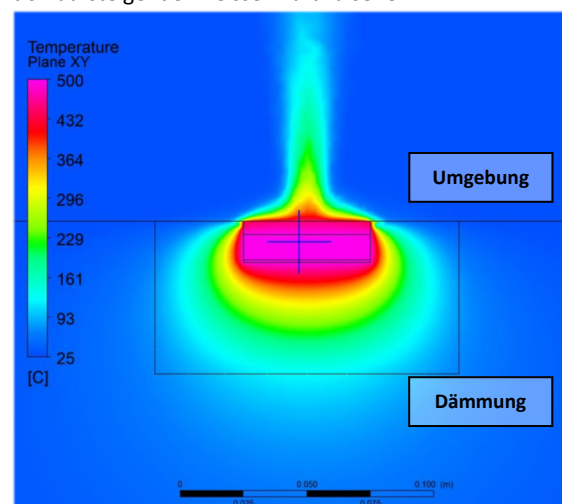


Abb. 2: CFD-Simulation der Temperaturverteilung im Prüfstand. Die höchsten Temperaturen herrschen im beheizten Kupferblock (violett). Ausserdem erkennt man den Effekt der Naturkonvektion in der Umgebungsluft oberhalb der Probe.

1.11 Modell-basierte Charakterisierung der Bewegung von Heissluftballons

Der Heissluftballon ist das älteste Luftfahrzeug überhaupt und fasziniert immer noch Jung und Alt. Dieses Projekt hat zum Ziel, ein detailliertes physikalisches Modell eines Heissluftballons zu entwickeln, das seine Bewegung basierend auf realen Wetterdaten beschreibt. Das Modell soll später im Aviatik-Studiengang zur Förderung des Verständnisses der beim Ballonfahren auftretenden Phänomene sowie als Planungs- und Analysetool für Heissluftballonpiloten eingesetzt werden. Als Voraussetzung für «virtuelle» Ballonfahrten müssen zunächst unbekannte Modellparameter mithilfe von Literaturdaten und über eigene Versuche ermittelt werden. Für Letztere wurden während einer Parallel-Ballonfahrt die Umgebungsbedingungen sowie die Temperatur der Ballonhülle gemessen.

Mitwirkende: J. Stoll, T. Hocker, S. Ehrat

Partner: Air Ballonteam Stefan Zeberli GmbH

Dauer: 2020

Die Bewegung eines Heissluftballons ergibt sich aus seiner Masse und den am Ballon wirkenden Kräften, d. h. seiner Gewichtskraft, seiner Auftriebskraft sowie der Luftwiderstandskraft, die von den an der jeweiligen Position herrschenden Winden abhängt. Für das Aufstiegs- und Sinkverhalten ist die Heisslufttemperatur massgebend, die wiederum von der Energiezufuhr über den Brenner und den Wärmeverlusten über die Ballonhülle abhängt. Aus diesem Grund wurden während einer Parallel-Ballonfahrt mit Lea und Stefan Zeberli die Umgebungsbedingungen sowie die Temperatur der Ballonhülle auf unterschiedlichen Höhenniveaus gemessen und der Treibstoffverbrauch geschätzt.

Für die Oberflächentemperaturmessung wird eine Wärmebildkamera eingesetzt, da diese grossflächig misst. Messungen mit diesem Instrument sind jedoch kompliziert, da die Emissivität der Ballonhülle, die Messdistanz, die Umgebungstemperatur und die Luftfeuchtigkeit Einfluss auf die Genauigkeit der Messung haben. Deshalb ist es wichtig, bei der Erarbeitung des Messablaufs Massnahmen zur Minimierung der Messfehler zu treffen. Beispielsweise wurde für die Wärmebildkamera eine Abschirmvorrichtung entwickelt, die sie vor der Abstrahlung des Brenners schützt. Zudem ist zu berücksichtigen, dass in Abhängigkeit seiner Position der Anteil der vom Ballon abgestrahlten Wärmestrahlung, der von der Atmosphäre absorbiert wird, berechnet werden muss. Basierend auf diesem Anteil wird dann die Temperatur der Ballonhülle korrigiert.

Abbildung 1 zeigt ein typisches Wärmebild, das während einer Parallel-Ballonfahrt in einer Höhe von 1080 m aufgenommen wurde. Man erkennt, dass die Temperatur der Ballonhülle von unten nach oben zunimmt. Ausserdem ist zu erkennen, dass die

Ballonhülle aus unterschiedlichen Stoffbahnen mit unterschiedlichen Emissivitäten besteht, die im Wärmebild zu deutlichen Messfehlern führen.

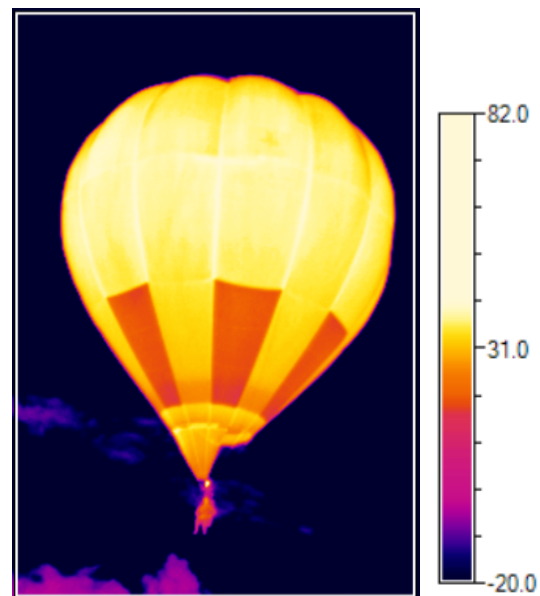


Abb. 1 Wärmebildaufnahme der Heissluftballonfahrt von Lea Zeberli auf einer Höhe von 1080 m, Temperaturskala in °C.

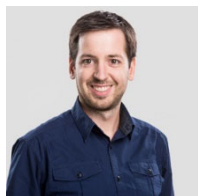
Für ein vollständiges Modell sind zahlreiche Einflussgrössen der Atmosphäre miteinzubeziehen. Konkret sind in Abhängigkeit der jeweiligen Position Windgeschwindigkeit, Windrichtung, Temperatur, Luftfeuchtigkeit und Luftdruck zu berücksichtigen. Diesbezüglich wurde eine umfangreiche Recherche zu nationalen und internationalen Wettermodellen zur Beschaffung von Forecast- und Reanalyse-Daten durchgeführt. Dabei hat es sich als schwierig erwiesen, frei zugängliche Wetterdaten in ausreichender örtlicher Auflösung zu beschaffen. Für 2020 ist geplant, die Wetterdaten zur Validierung des Modells, zur Analyse von realen Ballonfahrten und zur Planung von zukünftigen Fahrten einzusetzen.

2 Elektrochemische Zellen und Mikrostrukturen

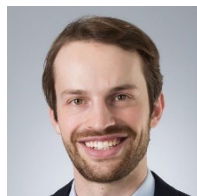
Brennstoffzellen sind ein herausragendes Beispiel für elektrochemische Zellen. Sie verwandeln Treibstoffe wie Wasserstoff, Erdgas oder Methanol in elektrische Energie und Hitze. Brennstoffzellen können an Stelle von Batterien in Elektrogeräten verwendet werden, zur kombinierten Erzeugung von Hitze und Elektrizität in Haushalten und als Energiequelle in elektrischen Fahrzeugen. Wegen ihres flachen Designs können Brennstoffzellen leicht skaliert werden, indem sie zu Serien in der Form von Stapeln zusammengefasst werden. Elektrische Wirkungsgrade von über 60 % sind möglich, was deutlich über denen anderer dezentralisierter Energieerzeugungstechnologien liegt. Redox-Flow-Batterien gelten als vielversprechende Energiespeichertechnologie. Diese Batterien sind hocheffizient und bieten eine Energiespeicherlösung für fluktuierende Energie aus Windkraftanlagen und Photovoltaikzellen.

Das ICP unterstützt den Fortschritt bei der Entwicklung von elektrochemischen Zellen durch die Entwicklung von Multiphysik-Computermodellen. Grundsätzlich kann uns das Modellieren dabei helfen, die Kopplung von chemischen, thermischen, elektrischen, mechanischen und strömungstechnischen Prozessen besser zu verstehen mit dem Ziel, Schwächen des Systems zu erkennen und Design-Verbesserungen anzubieten. Häufig basieren diese Modelle auf detaillierten Informationen über die Mikrostrukturen der untersuchten Materialien. Deshalb ist beispielsweise die Charakterisierung von Gas-Diffusionsschichten und der Elektrolyt-Mikrostruktur in 2D oder 3D ein integraler Bestandteil unserer Modellierungsarbeiten.

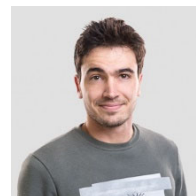
Neben Brennstoffzellen und Redox-Flow-Batterien arbeiten wir auch an der Modellierung von Perowskit-Solarzellen und photoelektrochemischen Zellen (PECs), welche die Sonnenenergie zur Spaltung von Wasser und so zur Herstellung von Wasserstoff als Treibstoff verwenden.



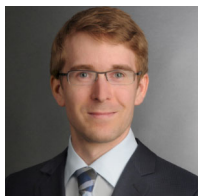
D. Bernhardsgrütter



R. Herrendörfer



G. Mourouga



R. Schärer



J. Schumacher



J. Wlodarczyk

2.1 Makro-homogene Modelle für organische Flussbatterien

Redox-Flussbatterien sind eine vielversprechende Technologie zur stationären Energiespeicherung. Die Verwendung reichlich vorhandener, kostengünstiger, organischer Verbindungen stellt eine attraktive Alternative zu konventionellen Elektrolyten dar. Die Identifizierung geeigneter organischer Verbindungen für Redox-Flussbatterien ist jedoch aufgrund des grossen verfügbaren chemischen Raums eine Herausforderung. In dem europäisch geförderten Projekt SONAR wird ein mehrskaliges Modellierungs- und Optimierungsframework entwickelt, welches Hochdurchsatz-Screenings chemischer Verbindungen als auch die Optimierungen von Redox-Flussbatteriekomponenten und des gesamten Systemdesigns ermöglicht. Als Teil des mehrskaligen Modellierungsframeworks werden am ICP makrohomogene Zellmodelle in einer und drei räumlichen Dimensionen entwickelt, die eine effiziente Simulation wichtiger physikalisch-chemischer Prozesse innerhalb einer elektrochemischen Zelle erlauben.

Mitwirkende: R. P. Schärer, G. Mourouga, J. K. Wlodarczyk, J. O. Schumacher

Partner: Fraunhofer Institute for Chemical Technology, Fraunhofer Institute for Algorithms and Scientific Computing, Technical University of Denmark, Laboratoire de Réactivité et Chimie des Solides, Karlsruhe Institute of Technology, University of New South Wales

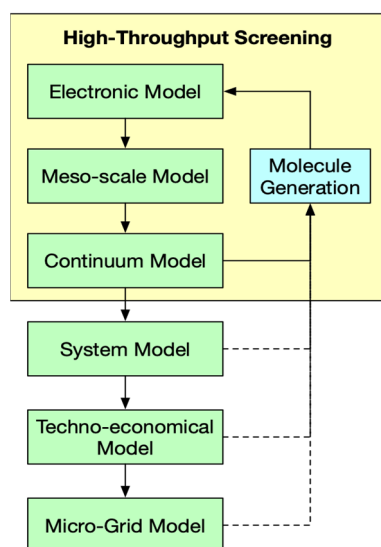
Finanzierung: Europäische Kommission, Horizon 2020

Dauer: 2020–2023

Der grosse chemische Raum, der für organische Redoxpaare zur Verfügung steht, ermöglicht eine hohe Justierbarkeit der chemischen Eigenschaften. Eines der Ziele des SONAR-Projekts [1] ist die Identifizierung vielversprechender Verbindungen für organische Redox-Flussbatterien, um die kommerzielle Nutzung sicherer und kostengünstiger Energiespeicher zu beschleunigen. Zu diesem Zweck wird im Rahmen des SONAR-Projekts ein mehrskaliges Modellierungs- und Simulationsframework entwickelt, das die mathematische Beschreibung von organischen Redox-Flussbatterien von der atomistischen bis zur

Die am ICP entwickelten makro-homogenen Kontinuumsmodelle ermöglichen die Simulation physikalisch-chemischer Effekte innerhalb einer einzelnen elektrochemischen Zelle. Die Kontinuumsmodelle beschreiben die thermodynamischen Kräfte und Flüsse von Masse und Ladung, die elektrochemischen Reaktionen des aktiven Materials in den porösen Elektroden sowie die kritischen Transportphänomene innerhalb der Membran.

Einer der ersten Meilensteine ist die Entwicklung und Veröffentlichung eines benutzerfreundlichen, quelloffenen 1D-Zellenmodells für organische Redox-Flussbatterien, welches, ähnlich zum quelloffenen Brennstoffzellenmodell [2], die makroskopischen Feldgrößen wie Massen- und Ladungsdichten in Durchgangsrichtung der Zellanordnung beschreibt.



Mikrogitterskala ermöglicht.

Abb. 1: Skalen-spezifische Modelle, die bei der Suche nach optimalen Redoxpaaren und der Charakterisierung von Redox-Flussbatterien eingesetzt werden.

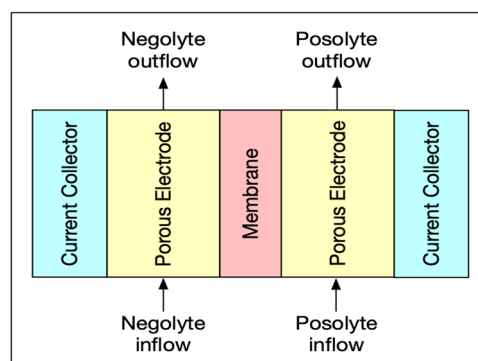


Abb. 2: Vereinfachte Geometrie einer Redox-Flussbatteriezelle.

Literatur:

[1] SONAR project web site: <https://www.sonar-redox.eu>.

[2] R. Vetter and J. Schumacher, "Free open reference implementation of a two-phase PEM fuel cell model", Comput. Phys. Commun., vol. 234, pp. 223–234, Jan. 2019.

2.2 DeMaPEM: Entwicklung und Vermarktung von Protonenaustauschmembran-Brennstoffzellen für Transportanwendungen

Im Projekt DeMaPEM entwickeln und vermarkten wir rechnerische Lösungen von Protonenaustauschmembran-Brennstoffzellen für Transportanwendungen: ein 1-D-parametrisiertes Modell der Membran-Elektroden-Einheit und ein 3-D-Einzelzellenmodell. Das Ziel ist eine schnellere und kosteneffizientere Produktentwicklung in der Brennstoffzellen-Lieferkette. Die Vermarktung der Modelle erfolgt über isomorph.ch.

Mitwirkende: J. O. Schumacher, O. Ilie, R. Herrendörfer

Partner: -

Finanzierung: Bundesamt für Energie

Dauer: 2019–2021

Im Rahmen der bundesrätlichen Energiestrategie 2050 haben die Eidgenössischen Räte eine Totalrevision des Energiegesetzes verabschiedet und eine drastische Reduktion der CO₂-Emissionen für private und gewerbliche Strassenfahrzeuge gefordert. Unsere Vision ist es, zum Erreichen dieses ehrgeizigen Ziels beizutragen, indem wir das Aufkommen der Brennstoffzellentechnologie als wettbewerbsfähige und emissionsfreie elektrische Energieversorgung vorantreiben. Niedertemperatur-Polymer-austauschmembran-Brennstoffzellen (PEMFCs) haben das Potenzial, fossile Brennstoffe durch reinen Wasserstoff zu ersetzen und damit zu einer erheblichen Dekarbonisierung des Verkehrssektors zu führen.

Das Ziel dieses Projekts ist es, dem ICP die Teilnahme an der internationalen Wertschöpfungskette von brennstoffzellenbetriebenen Transportanwendungen zu ermöglichen. Wir entwickeln und vermarkten rechnerische Lösungen, die auf die Bedürfnisse von Unternehmen und Forschungsinstituten zugeschnitten sind. Der Schwerpunkt liegt dabei auf Membran-Elektroden-Einheiten (MEAs) und Einzelzellen-PEMFCs. Unsere rechnerischen Lösungen in diesem Projekt, ein 1D-parametrisiertes MEA-Modell und ein 3D-Einzelzellenmodell (3D-SCM) einer PEMFC, zielen auf eine schnellere und kosteneffizientere Produktentwicklung in der Brennstoffzellen-Lieferkette ab. Diese Lösungen werden auf isomorph.ch angekündigt, um sie für mögliche Industriepartner sichtbar zu machen.

Das 3D-SCM umfasst Gasflusskanalplatten und eine MEA (Abbildung 1). Unser Ziel ist es, die makroskopische Beschreibung des Flüssigwassertransports an der Grenzfläche zwischen Gasdiffusionsschicht und Gaskanälen zu verbessern. Dies ist besonders bei hohen Stromdichten wichtig, bei denen Wasser in der Kathoden-Katalysatorschicht erzeugt wird.

Das 3D-SCM ermöglicht die Analyse des Wasser- und Wärmemanagements der Zelle, einschließlich der Temperaturverteilung (Abbildung 2) und des Wassergehalts der Membran im Verhältnis zu den Gaskanälen und Rippen. Bei steigender Stromdichte trocknet die Anodenseite der

Membran aufgrund des zunehmenden elektro-osmotischen Widerstands aus (Abbildung 3 a-d).

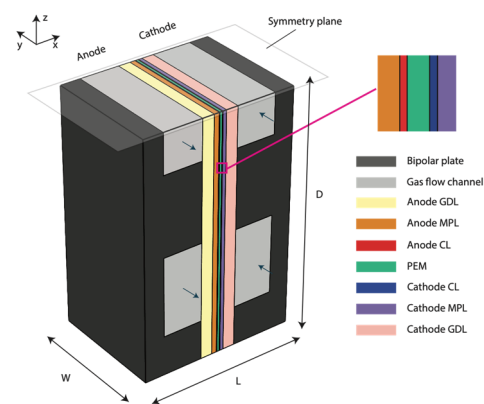


Abb. 1: Modellaufbau des 3D-SCM.

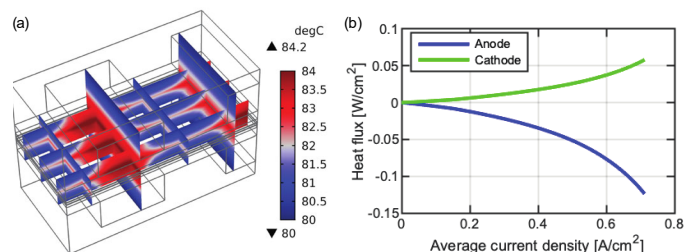


Abbildung 2 (a): Temperaturverteilung bei 0,025 V Zellspannung, (b) Wärmefluss in Anoden- und Kathoden-Bipolarplatte mit zunehmender Stromdichte.

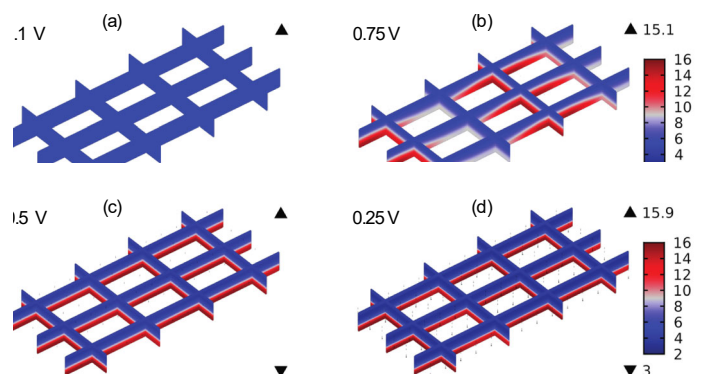


Abb. 3: Wassergehalt der Membran bei vier verschiedenen Zellspannungen.

2.3 3-D-Modell des Wasser- und Wärmetransports in PEMFCs während der Verdunstungskühlung und -befeuchtung

Es hat sich gezeigt, dass die Verdampfung in Gasdiffusionsschichten mit hydrophilen Linien eine gleichzeitige Kühlung und Befeuchtung in Protonenaustauschmembran-Brennstoffzellen (PEMFCs) ermöglicht. Das Ziel dieser Studie ist es, unser Verständnis der Verdunstungskühlung und -befeuchtung mit Hilfe numerischer Modellierung zu verbessern. Wir untersuchen die vorherrschenden Wärme- und Wassertransportprozesse und analysieren die lokale Empfindlichkeit des Modelloutputs gegenüber Änderungen der Betriebsbedingungen und Modellparametrisierungen.

Mitwirkende: R. Herrendörfer, J. O. Schumacher

Partner: SCCER Mobility: Swiss energy competence center: Efficient technologies and systems for mobility, Paul Scherrer Institute (PSI)

Finanzierung: Innosuisse

Dauer: 2014–2020

Die Verdunstungskühlung ist ein vielversprechendes Konzept, um das Wasser- und Wärmemanagement in PEMFCs zu optimieren und dadurch Kosten zu senken. Es basiert auf der Verdampfung von Wasser direkt in der Zelle, um eine gleichzeitige Befeuchtung und Kühlung zu ermöglichen. Das PSI hat ein Konzept entwickelt, das ausschließlich auf Modifikationen der Anodengasdiffusionsschicht durch lokale Änderung der Benetzbarkeit von hydrophob zu hydrophil beruht. Experimentelle Arbeiten am PSI haben die Anwendbarkeit dieses Konzepts nachgewiesen [1]. Am ICP haben wir ein makrohomogenes, nicht-isothermes 3-D-Zweiphasenmodell entwickelt, um die dominierenden Wärme- und Wassertransferprozesse während der Verdunstungskühlung und Befeuchtung in einer Einzelzellen-PEMFC zu untersuchen (Abbildung 1). Wir lösen für den Transport von Gas, flüssigem Wasser, gelöstem Wasser, Wärme, Elektronen und Protonen.

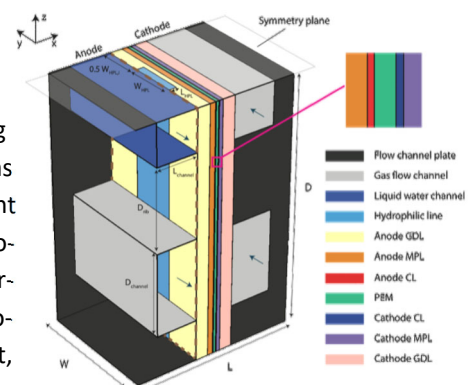


Abb. 1: 3D-Modellaufbau. Anodenströmungsfeld mit einem Gas- bzw. Flüssigwasserkanal, ein Kathodenströmungsfeld mit zwei Gaskanälen. Die Membran-Elektroden-Anordnung enthält die hydrophobe Anoden-Gasdiffusionsschicht mit einer hydrophilen Linie.

Im Referenzmodell, das hinsichtlich der Betriebsbedingungen und Eigenschaften an den Versuchsaufbau am PSI angepasst wurde, wird der meiste Wasserdampf, der entlang der hydrophilen Linien erzeugt wird, zum Ausgang des Anodengas-Strömungskanal transportiert und nur ein kleiner Teil des Wasserdampfes diffundiert zur Kathodenseite (Abbildung 2a-b). Während der größte Teil der Verdampfung an der Grenzfläche zwischen dem Gasströmungskanal und der hydrophilen Linie stattfindet, findet ein Teil an den Grenzflächen zwischen der hydrophilen Linie und der hydrophoben GDL statt (Abbildung 2b). Der in der Membran gelöste Wassergehalt ist auf der Anodenseite der Membran unterhalb der hydrophilen Linie und des Flüssigwasserkanals am höchsten.

Quellenangabe:

[1] Cochet, M., A. Forner-Cuenca, V. Manzi, M. Siegwart, D. Scheuble, and P. Boillat. Fuel Cells 18 (5): 619–26, 2018.

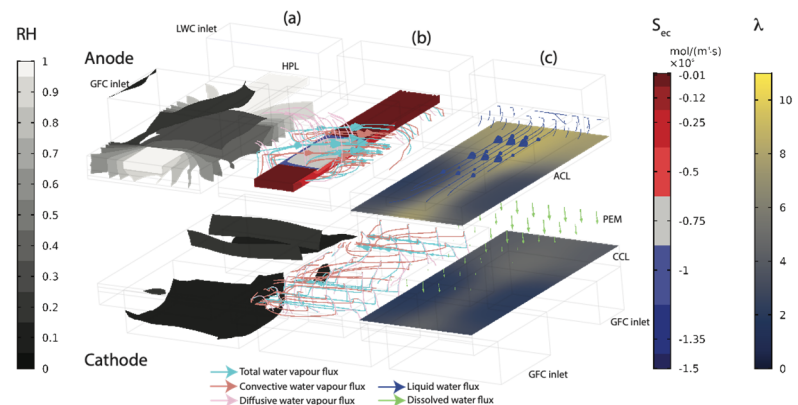


Abb. 1: Water management at anode side (top) and cathode side (bottom). (a) Relative humidity (RH). (b) Evaporation rate and streamlines of water vapour flux. (c) Streamlines of liquid water flux and dissolved water flux, in addition to dissolved water content (λ).

2.4 Modellierung des Kapazitätsverlusts in organischen Redox-Flow-Batterien: Thermodynamik des Transports in konzentrierten Lösungen

Organische Redox-Flow-Batterien (ORFB) sind ein vielversprechender, kostengünstiger und nachhaltiger Energiespeicher, der im Vergleich zu konkurrierenden Speichertechnologien eine längere Lebensdauer verspricht [1]. Ziel dieser Arbeit ist es, ein besseres Verständnis der Transportprozesse in Ionenaustauschermembranen, einer Schlüsselkomponente der Batterien hinsichtlich der Lebensdauer, zu erhalten. Das ICP arbeitet in dieser Hinsicht mit dem FlowCamp-Konsortium zusammen, einem Forschungs- und Ausbildungsprojekt, das durch das Marie-Sklodowska-Curie-Programm der Europäischen Union finanziert wird. FlowCamp umfasst 11 Partnerorganisationen aus 8 verschiedenen Ländern. Ziel der FlowCamp-Forschung ist die Verbesserung von Materialien für leistungstarke und kostengünstige Redox-Flow-Batterien der nächsten Generation.

Mitwirkende: G. Mourouga, X. Yang, J. O. Schumacher, T. J. Schmidt, C. Iojoiu

Partner: ETH Zürich, Univ. Grenoble-Alpes, JenaBatteries

Finanzierung: Europäische Kommission, Horizon 2020, Marie Skłodowska-Curie Training Networks

Dauer: 2018–2021

Eines der organischen Systeme, die im Rahmen des FlowCamp-Projekts untersucht werden, ist das vom Deutschen Startup JenaBatteries entwickelte rein organische Redoxpaar TEMPO/Paraquat [2]:

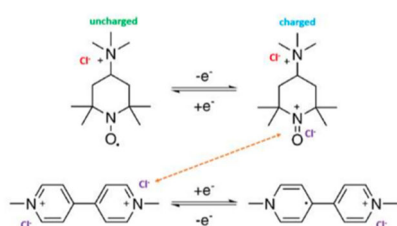


Abb. 1. Oxidation und Reduktion von TEMPO (oben) und Paraquat (unten) über Chloridaustausch.

Diese Moleküle ergeben einen schnellen chloridgekoppelten Elektronentransferprozess, und das Fehlen von Edelmetallkatalysatoren macht diese Chemie zu einem interessanten Kandidaten für grüne, kostengünstige Energiespeicherung [2].

Ein häufiges Problem, mit dem sich ORFBs jedoch konfrontiert sehen, ist der Transfer sowohl aktiver organischer Moleküle als auch von Lösungsmittel durch die Ionenaustauschermembran, die die positive und negative Elektrode trennt.

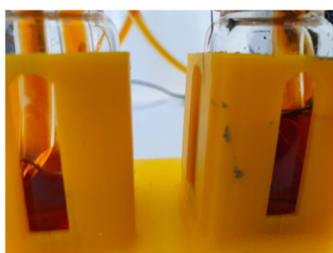


Abb. 2: Bild des positiven (links) und negativen (rechts) Reservoirs nach der Zyklierung. Die Höhe war anfänglich gleich.

Das Verständnis der Transportprozesse, die zum Crossover aktiver Moleküle und zum Lösungsmitteltransfer führen, ist ein wichtiger Schritt zur Verbesserung der Batterie Lebensdauer und erfordert eine sorgfältige thermodynamische Formulierung des Transports in konzentrierten Lösungen.

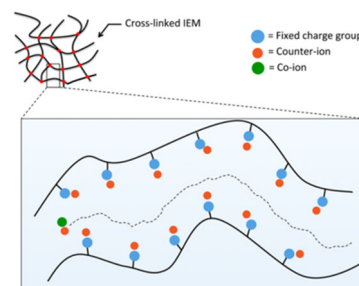


Abb. 3. Illustration der Ladungswechselwirkungen in konzentrierten Lösungen und Ionenaustauschermembranen.

Das Ziel unserer Arbeit im FlowCamp-Projekt ist es, einen thermodynamisch konsistenten Ansatz für die Simulation des Transports in konzentrierten Lösungen bereitzustellen, einschließlich der Modellierung der chemischen Aktivität und der osmotischen Prozesse.

Dieser Ansatz, der auf Ionenaustauschmembranen in Redox-Flow-Batterien angewandt wird, zielt auf das bessere Verständnis und die Vorhersage von Kapazitätsschwund ab und ist ein wichtiger Fortschritt für weitere Verbesserung des Membrandesigns und der Batterie Lebensdauer.

[1] X. Wei *et al.*, "Materials and Systems for Organic Redox Flow Batteries: Status and Challenges," *ACS Energy Lett.*, vol. 2, no. 9, pp. 2187–2204, Sep. 2017.

[2] T. Janoschka *et al.*, "An aqueous, polymer-based redox-flow battery using non-corrosive, safe, and low-cost materials," *Nature*, vol. 527, no. 7576, pp. 78–81, Oct. 2015.

2.5 Quantifizierung des Einflusses konvektiver Strömung und Mikrostruktur innerhalb poröser Elektroden auf die elektrochemische Leistung von Flussbatterien

Der rasche Übergang zu erneuerbaren Energieressourcen bringt einen dringenden Bedarf an Energiespeicherung im großen Maßstab mit sich. Gegenwärtig darf der Anteil erneuerbarer Energien bestimmte Schwellenwerte nicht überschreiten, damit das Netz stabil bleibt. Derzeit wird eine neue Technologie zum Ausgleich des Strombedarfs und der Stromversorgung mittels reversibler elektrochemischer Reaktoren, die als Flussbatterien bezeichnet werden, untersucht. Das Verständnis des Einflusses des makroskopischen Elektrolytflusses in porösen Elektroden auf die Umwandlungsrate der Reaktanten ebnet den Weg zu einem verbesserten Design der Elektrodenmikrostruktur. Die Studie ist Teil des FlowCamp-Projekts [1] (ein Forschungs- und Ausbildungsprojekt, das durch das Maria Skłodowska-Curie-Programm der Europäischen Union finanziert wird) und des SONAR-Projekts [2].

Mitwirkende: J. K. Włodarczyk, G. Mourouga, R. P. Schärer, J. O. Schumacher

Partner: Fraunhofer ICT (Deutschland), LRSC Amiens (Frankreich) und andere

Finanzierung: Die Europäische Union, Horizon 2020, Marie Skłodowska-Curie Actions

Dauer: 2018–2021

Poröse Elektroden werden häufig in Anwendungen für elektrochemische Sensoren, elektroorganische Synthese oder Stromerzeugung verwendet. Hochentwickelte Oberflächen fördern eine erhöhte Stromabgabe von einer verdichteten, kompakten und stapelbaren Elektrode. Die Komplexität der inneren Struktur der porösen Elektrode stellt aus theoretischer Sicht zahlreiche Probleme dar. Während die Theorie regelmäßiger Flachelektroden gut etabliert ist, erschwert das Zusammenspiel ungleichmässiger Oberflächeneffekte, gestörte Transportprozesse in inhomogenen Medien und überlagerte Elektrolytströmung im Innern poröser Elektroden deren mathematische Analyse. Das Verständnis des Einflusses der konvektiven Strömung innerhalb der Poren auf die elektrochemische Leistung poröser Elektroden ist entscheidend für ein verbessertes Design und die Optimierung der Betriebsbedingungen.

In den FlowCamp- und Sonar-Projekten werden die oben genannten Fragen in einer systematischen Studie mit Hilfe von numerischen Modellen auf gleicher Ebene wie die experimentelle Modellvalidierung behandelt. In der ersten Phase der Untersuchung wurde eine einfache 3D-Poren-Fasergeometrie im Mikrometerbereich konstruiert (Abb. 1), die aus 3 sich kreuzenden Fasern besteht, deren geometrische Fläche genau berechnet werden kann. Als nächstes wurde ein makroskopischer Elektrolytfluss in der Zelle überlagert, indem die Stokes-Gleichung gelöst wurde. Auf der Oberfläche der leitfähigen Fasern selbst wurde ein Reaktionsterm als Randbedingung definiert. Er emuliert eine einfache Reduktionsreaktion erster Ordnung, $Ox \rightarrow Red$, mit gegebener Reaktionsgeschwindigkeit. Die Umwandlungsgeschwindigkeit wird durch die Reaktionskonstante k_1 bestimmt. Das Ergebnis der Simulation, das die Verteilung der Produktkonzentration zeigt, ist in Abb. 1 dargestellt. Die Geschwindigkeitskonstante

kann variiert werden, um die durchschnittliche Oberflächenkonzentration des Reaktanten (Ox) zu untersuchen, die in Abb. 2 dargestellt ist. Später wird der Reaktionsterm erweitert, um den elektrochemischen Ladungstransfer zu simulieren ($Ox + e^- \rightarrow Red$). Durch Variation der periodischen Zellgeometrie kann künstlich Inhomogenität modelliert und deren Auswirkung auf die Elektrodenleistung quantifiziert werden.

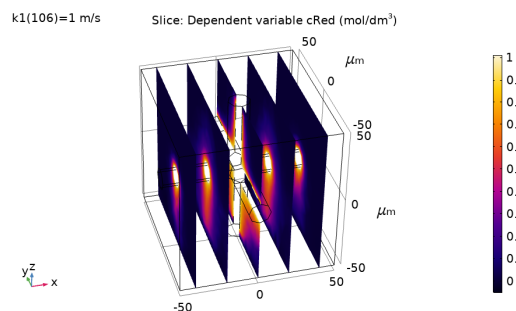


Abb. 1. Verteilung des Reaktionsprodukts (reduzierte Spezies) in den Porenhohlräumen im vereinfachten Porengeometriemodell.

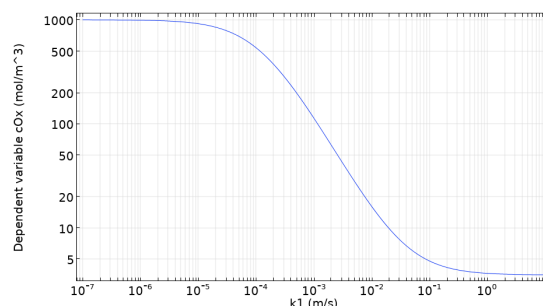


Abb. 2. Simulierte mittlere Oberflächenkonzentration der oxidierten Spezies als Funktion der heterogenen Reaktionsgeschwindigkeitskonstante in einer vereinfachten Porengeometrie (durchschnittliche Einlassgeschwindigkeit von 1 mm/s).

[1] Project website: <https://www.flowcamp-project.eu/>

[2] Project website: <https://www.sonar-redox.eu/>

3 Organische Elektronik und Photovoltaik

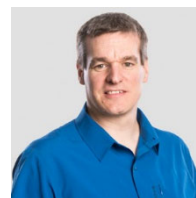
Organische Halbleiter erfreuen sich grosser Aufmerksamkeit seit 1987, als organische Leuchtdioden (OLEDs) von führenden Wissenschaftlern bei Kodak in den USA erfunden wurden. Nach mehr als 30 Jahren Forschung und Entwicklung und weltweiten Anstrengungen bei der Kommerzialisierung dieser Technik sind wir nun Zeugen einer grossen Bandbreite an OLED-Displays in Alltagsprodukten, die von Mobiltelefonen bis zu 77-Zoll-Fernsehern reichen. Die besonderen Vorteile der OLED-Technik liegen in ihrer dünnen Bauweise, dem grossen Betrachtungswinkel, der Farbskala und hohen Effizienz bei der Energieumwandlung. OLEDs bestehen aus einer Sequenz von dünnen organischen Halbleiter-Schichten, die zwischen zwei metallischen Elektroden angebracht werden. Organische Halbleiter finden auch Beachtung als starke Lichtabsorber und Ladungstransportmaterialien in organischen Solarzellen, mit denen flexible PV-Module gebaut werden können. In den letzten Jahren waren organische Halbleiter auch der Schlüssel für die bahnbrechende Perowskit-Solarzelle, eine organisch-anorganische Hybrid-Technologie, welche die bedeutendste sich in Entwicklung befindende Photovoltaik-Technologie ist und auch ein grosses Potenzial bei LED-Anwendungen hat. Tiefer in der unsichtbaren Bandbreite der elektromagnetischen Wellen ist die Terahertz-Photonik, ein wachsendes technisches Feld für nicht-invasive Diagnose-Anwendungen. Das ICP betreibt Forschung und Entwicklung auf dem Gebiet der OLEDs, OPV, Perowskit-PV und nicht linearen optischen Kristalle für Terahertz-Photonik-Messsysteme. Im ICP-Labor stellen wir zu Forschungs- und Entwicklungszwecken OLEDs und neuartige Solarzellen in einem kleinen Rahmen her, zusätzlich haben wir ein Terahertz-Photonik-Messsystem aufgebaut. Im unsichtbaren Spektralbereich der elektromagnetischen Wellen ist die Terahertz-Photonik angesiedelt als ein wachsendes technisches Feld für nicht-invasive Diagnose-Anwendungen. Dieses Kapitel gibt einen Überblick über die laufenden Forschungs- und Entwicklungsprojekte, die auf diesem interdisziplinären Forschungsgebiet des ICP ausgeführt werden.



E. Comi



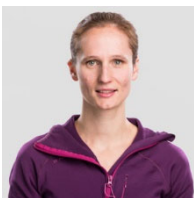
M. Jazbinsek



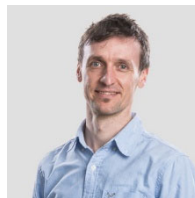
C. Kirsch



G. Kissling



E. Knapp



K. Pernstich



U. Puc



M. Regnat



B. Ruhstaller



A. Schiller



W. Tress



S. Züfle

3.1 KI-unterstützte thermische und elektrische Charakterisierung von grossflächigen PV-Modulen

Um Defekte in Solarmodulen während der Herstellung zu erkennen, wenden wir sowohl experimentelle Charakterisierung als auch Modellierung und Simulation von Photovoltaikzellen an. Zur Schätzung der Modellparameter werden maschinelles Lernen und traditionelle Methoden eingesetzt und verglichen.

Mitwirkende: E. Comi, C. Kirsch, E. Knapp, B. Ruhstaller

Partner: Fluxim AG

Finanzierung: Innosuisse

Dauer: 2019–2020

Im Rahmen des AIPV-Projekts arbeitet das ICP mit der Fluxim AG zusammen, die Simulationssoftware und Messhardware für Industrie und Wissenschaft herstellt. Eine kommerziell erhältliche Software ist Laoss, die für Simulationen von großflächigen Solarzellen und OLEDs verwendet wird, bei denen die obere und untere Elektrode auf 2D-Domänen reduziert und mit einer lokalen IV-Kurve gekoppelt werden. Im Laufe des Projekts wurde die Software von DC auf AC erweitert, und die Kopplung wird durch lokale Impedanz-Daten wie Leitfähigkeit und Kapazität vervollständigt. Das Modell besteht aus einem elektrischen und einem thermischen Teil und ermöglicht die Vorhersage der Potential- und Temperaturverteilung in den Elektroden. Die Joule'sche Erwärmung im Bauelement und in den Elektroden führt zu einer Erwärmung des Bauelements und beeinflusst die temperaturabhängigen Materialparameter, was wiederum zu einer Erhöhung der Joule'schen Erwärmung führen kann. Im AC-Modus berechnet Laoss die Impedanz von großflächigen

Bauelementen. Die Impedanz von Zellen wird auch experimentell gemessen. An die Messungen werden dann Simulationen angepasst und es können Material- und Zellparameter extrahiert werden. Dieser Schritt wird mit traditionellen Parameterextraktionsmethoden, z. B. dem Levenberg-Marquardt-Algorithmus, durchgeführt. Zusätzlich trainieren wir auch ein Maschinenmodell (1d-convolutional neural network) mit Simulationsdaten, die zuvor durch zufällige Variation der Material- und Zellparameter erzeugt wurden. Die Messdaten speisen wir dann in das Maschinenmodell ein, um die zugrundeliegenden Materialparametern der Messungen vorherzusagen. In Abb. 1 sind die drei Schritte zur Erstellung des Maschinenmodells dargestellt. Die extrahierten Parameter des Maschinenmodells werden analysiert und mit den Ergebnissen der traditionellen Methode verglichen. In einer zweiten Phase werden in ähnlicher Weise auch Wärmebilder mit Hilfe des maschinellen Lernens untersucht.

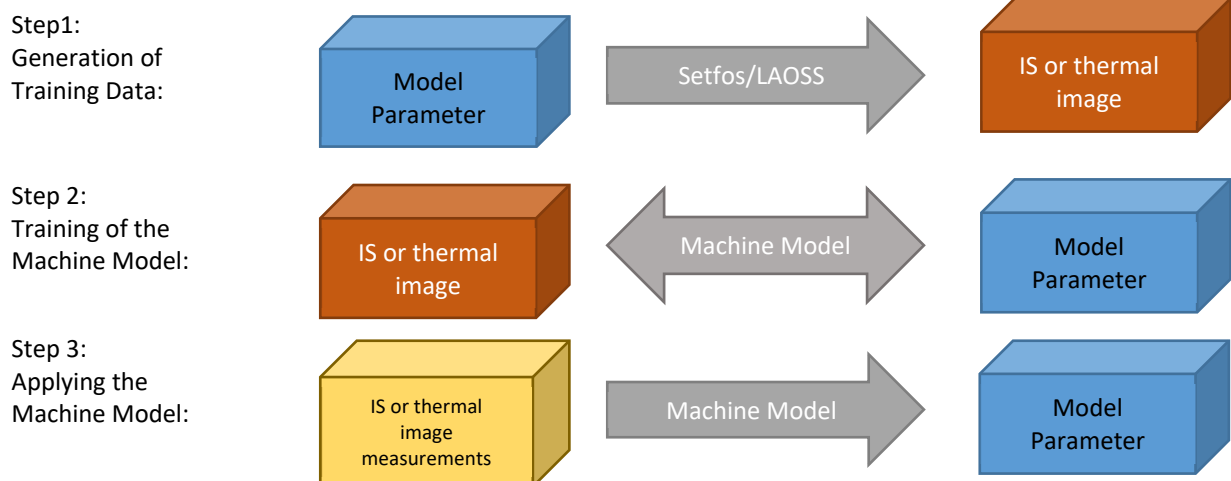


Abb. 1: Visualisierung der drei Schritte zum Aufbau eines Maschinenmodells. Schritt 1: Trainingsdaten werden erzeugt, indem Modellparameter in eine Simulationssoftware eingespeist werden, die Impedanzspektren oder Wärmebilder berechnet. Schritt 2: Die Trainingsdaten werden verwendet, um eine Verbindung zwischen den Impedanzspektren oder Wärmebildern und den Modellparametern zu erstellen. Schritt 3: Messungen von Impedanzspektren oder Wärmebildern werden in das Maschinenmodell eingespeist, das die zugrunde liegenden Modellparameter liefert.

3.2. Dynamik von Ladungstransferzuständen in organischen Halbleiterbauelementen: Kombination von Experiment und Simulation (CTDyn)

Dieses neue schweizerisch-deutsche Projekt erforscht Ladungstransferzustände (CT-Exzitonen), die eine entscheidende Rolle für das Verständnis und die weitere Verbesserung der Effizienz von organischen elektronischen Bauelementen wie OLEDs und organischen Solarzellen spielen. Unser Ansatz kombiniert optische und elektronische Messungen mit numerischen Simulationen, wobei im Projekt die zugrunde liegenden physikalischen Modelle und numerischen Methoden verbessert werden sollen.

Mitwirkende: M. Regnat, C. Kirsch, S. Züfle, B. Ruhstaller

Partner: Prof. W. Brütting, Universität Augsburg

Finanzierung: Schweizerischer Nationalfonds / Deutsche Forschungsgemeinschaft

Dauer: 2020–2023

Organische Leuchtdioden (OLEDs) sind eine neue Flachbildschirm-Technologie, die mit den etablierten LCDs konkurriert. OLEDs haben bereits einen hohen Reifegrad für Anwendungen in mobilen Geräten und großen Fernsehbildschirmen erreicht. Dabei konnte in den letzten Jahrzehnten durch ein verbessertes Verständnis und eine bessere Kontrolle der Exzitonenphysik in organischen Materialien eine wesentliche Steigerung der Quantenausbeute erzielt werden. Hierzu gehört der Wechsel von fluoreszierenden zu phosphoreszierenden Farbstoffen, zu Host-Guest-Systemen und kürzlich zu thermisch aktivierten Systemen mit verzögerter Fluoreszenz (TADF), bei denen eine 100%ige interne Quanteneffizienz realisiert werden kann. Insbesondere bei TADF-Bauteilen werden wichtige Materialparameter durch temperaturabhängige (meist optische) Messungen bestimmt. Darüber hinaus treten bei erhöhten Strömen zusätzliche exzitonische Prozesse auf, die zu (reversiblen oder irreversiblen) Leistungsverlusten führen können. Obwohl diese Prozesse bekannt sind, ist ein vollständiges Modell, das die gesamte relevante Physik für Ladungen und Exzitonen enthält und einen Satz von mehreren Experimenten beschreibt, immer noch eine große Herausforderung.

Das Projekt CTDyn untersucht die Dynamik von Exzitonen und die Wechselwirkung zwischen verschiedenen Exzitonspezies sowie zwischen Exzitonen und mobilen Ladungsträgern, sowohl innerhalb einzelner Schichten (intramolekular) als auch an Grenzflächen von mehrschichtigen organischen Halbleiterbauelementen (intermolekular). Wir werden unseren bereits etablierten 1D-Drift-Diffusionsansatz erweitern und mit einem neuartigen 3D-

Mastergleichungs-Modell kombinieren sowie mit analytischen 0D-Formeln vergleichen.

Dies erfordert einerseits die Definition spezifischer sauberer Modellsysteme, um die zugrunde liegenden Prozesse durch dedizierte Experimente zu isolieren; andererseits muss das Modell erweitert werden, um die erhöhte Komplexität dieser Systeme zu erfassen.

Die Physik der Exzitonenprozesse kann sowohl in OLED- als auch in Solarzellenkonfigurationen untersucht werden. Aufgrund der grundlegenden Thermodynamik und Reziprozität lassen sich viele der Erkenntnisse von OLEDs auf Solarzellen übertragen und umgekehrt. So planen wir beispielsweise die Messung der Leerlaufspannung von OLEDs (suns-Voc-Experiment) oder der Lumineszenz von Solarzellen. Hinsichtlich der Simulation streben wir ein umfassendes und universelles Modell an, das alle Prozesse abdeckt und sowohl für OLEDs als auch für Solarzellen eingesetzt werden kann.

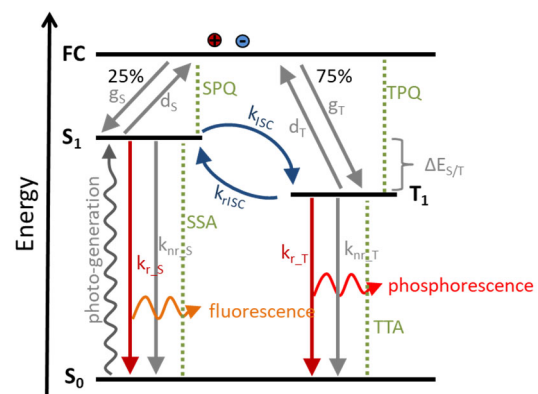


Abb. 1: Allgemeine Exzitonen- und Ladungstransferprozesse. FC bezeichnet die freien Träger, S1 das Singlett und T1 das Triplett-Exziton und S0 den Grundzustand. Der TADF-Prozess ist mit der k_{riisc} -Rate verknüpft.

3.3 Untersuchung des Ladungstransports in organischen Halbleitern mit elektrochemischen Methoden und theoretischen Modellen

Organische Halbleiter werden heutzutage in vielen verschiedenen technologischen Gebieten verwendet. Um hergestellte Produkte zu verbessern, müssen diese Materialien aber vollumfänglich verstanden werden. In unserem Projekt streben wir an, die organischen Halbleiter anhand elektrochemischer Messungen in Kombination mit Computersimulationen besser zu charakterisieren.

Mitwirkende: G. Kissling, E. Knapp, K. Pernstich

Partner: Fluxim AG

Finanzierung: Schweizerischer Nationalfonds

Dauer: 2020–2022

Organische Halbleiter werden im Bildschirm- und Beleuchtungsbereich (OLED- TVs und Lichtmodule) eingesetzt und kommen auch in neuartigen Transistoren, Sensoren, Computerspeicherelementen und Solarzellen zur Anwendung. Um die Anwendungen weiter zu optimieren, benötigt man ein besseres Verständnis der physikalischen Vorgänge und genauere Materialparameter.

In diesem multidisziplinären Projekt untersuchen wir organische Halbleiter mittels elektrochemischer Methoden und theoretischer multiphysikalischer Modelle. Das Projekt vereint die Modellier-Expertise des ICP mit elektrochemischer Grundlagenforschung.

Ziel des Projekts ist es, eine Methode zu entwickeln, welche es ermöglicht, einige Eigenschaften und Materialparameter organischer Halbleiter zuverlässig zu eruieren. Experimente werden es uns erlauben, einige Materialparameter der Halbleiter zu bestimmen, die enorm wichtig für eine detaillierte Modellierung sind und bisher gar nicht oder nur sehr aufwendig messbar waren. Gängige numerische Modelle können dann mit diesen Erkenntnissen verbessert werden.

In unserer Arbeit charakterisieren wir organische Halbleiter, bestehend aus Molekülen, wie zum Beispiel NPB (N,N'-Di(1-naphthyl)-N,N'-diphenyl-(1,1'-biphenyl)-4,4'-diamin), gezeigt in **Abbildung 1c**, mittels elektrochemischer Messmethoden. Die Moleküle werden entweder in Lösung oder als Dünnschichten elektrochemisch charakterisiert und auf ihre Stabilität und Halbleitereigenschaften (z. B. die Eigenschaften des Valenz- und Leitbandes und die Anwesenheit von Störstellen) geprüft.

Abbildung 1a und b zeigen unsere erste mit der COMSOL Multiphysics® Software [1] berechnete Simulation einer elektrochemischen Messung von NPB in Lösung. Der rot gezeichnete Teil in Abb. 1a

wurde mit Parametern aus der Literatur simuliert [2]. Der blau gezeichnete Teil und die Impedanzspektren in Abb. 1b sind eine modellierte Voraussage, die wir im kommenden Jahr experimentell bestätigen oder verwerfen werden.

Die Grundlagenforschung, welche wir in unserem Projekt betreiben, könnte Impulse liefern, die dazu beitragen, die gängigen Methoden der organischen Halbleiterforschung zu verbessern, indem für die Materialcharakterisierung genauere Modelle entwickelt werden können. Durch Zusammenarbeit mit unseren Industriepartnern könnte sich auch ein vermarktbare Produkt entwickeln lassen.

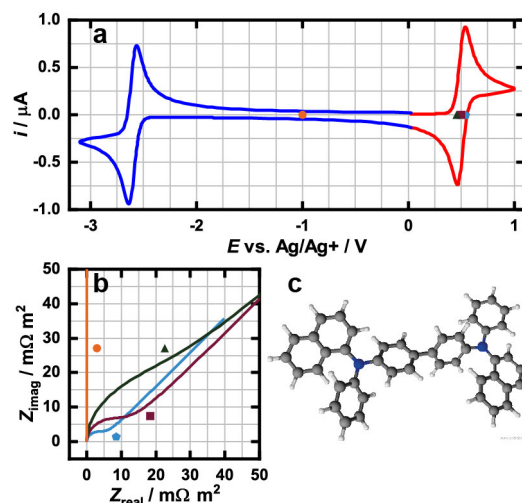


Abb. 1: a: Simulierte zyklische Voltammetrie: Der rote Bereich basiert auf Literaturwerten [2], der blaue Bereich auf ungefähren Schätzungen. Die Impedanzspektren in b wurden für die in a durch Symbole gekennzeichneten Potentiale berechnet: -1 V (oranger Kreis), 0.46 V (dunkelgrünes Dreieck), 0.5 V (violett Quadrat) und 0.54 V (blaues Pentagon). c Cartoon-Darstellung von NPB.

Literatur:

- [1] COMSOL Multiphysics® v. 5.5. www.comsol.com. COMSOL AB, Stockholm, Sweden.
- [2] J.-E. Park, S. Song and I.-S. Shin, Int. J. Electrochem. Sci., 2016, 11, 5891–5899

3.4 Effizienz- und Lebensdaueruntersuchung von organischen Leuchtdioden

Im Rahmen des Forschungsprojektes TripLED wurden vielversprechende organische Leuchtdioden (OLEDs) von Professor Jang-Joo Kims Gruppe von der Seoul National University untersucht. Mit Hilfe von unterschiedlichen, teilweise neu entwickelten Charakterisierungsmethoden in Kombination mit elektro-optischen 1D-Simulationen konnten mögliche Effizienz- und Lebensdauersteigerungen aufgezeigt werden.

Mitwirkende: M. Regnat, K. Pernstich, B. Ruhstaller

Partner: Prof. Jang-Joo Kim Gruppe von der Seoul National University, Südkorea

Finanzierung: SNF

Dauer: 2016–2019

Organische Leuchtdioden (OLEDs) findet man heutzutage in Bildschirmen von Mobiltelefonen, Fernsehern und teilweise in Lampen. Aktuell wird an der nächsten Generation von OLEDs mit sogenannter thermisch aktivierter verzögerter Fluoreszenz (engl. TADF) geforscht, um weitere Steigerungen in der Effizienz bei ausreichender Lebensdauer zu erreichen.

Im Rahmen dieses Projektes wurden in einem ersten Schritt derartige TADF OLEDs mit Hilfe von unterschiedlichen Charakterisierungsmethoden mit dem Paios-Messsystem [1] und elektro-optischen 1D-Simulationen mit Setfos [2] untersucht. Dadurch konnten verschiedene Möglichkeiten aufgezeigt werden, um die Effizienz in diesen OLEDs um bis zu 400 % (bei 1000 cd/m²) zu steigern, wie in Abbildung 1 schematisch dargestellt ist.[3]

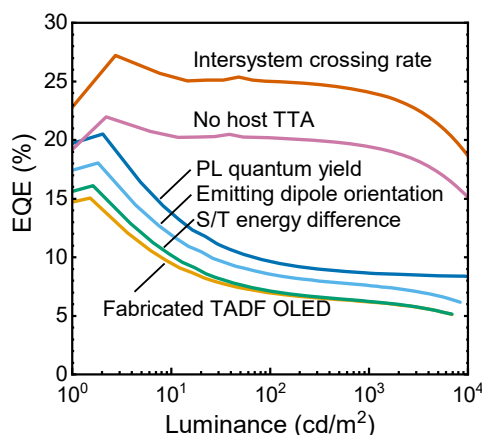


Abb. 1: Möglichkeiten die Effizienz (engl. EQE) der untersuchten TADF OLEDs weiter zu steigern. [3]

In einem weiteren Schritt wurden dann hocheffiziente TADF OLEDs auf ihre Lebensdauer untersucht. Dazu wurden diese unter konstantem Strom betrieben und in regelmässigen Abständen charakterisiert. Anhand von diesen Messdaten konnte ein

quantitatives elektro-optisches Modell erstellt werden, mit dem die Degradation über die Lebensdauer beschrieben werden kann. Die Abnahme der Strom-Spannungs-Kennlinien im untersuchten Zeitraum konnte hauptsächlich auf die Zunahme von Fehlstellen (engl. Traps) in den Lochtransportschichten der OLEDs zurückgeführt werden (siehe Abbildung 2).

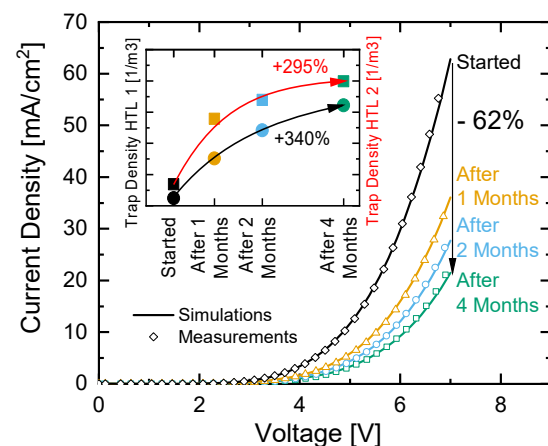


Abb. 2: Gemessene und simulierte Strom-Spannungs-Kennlinien der untersuchten TADF OLEDs über die untersuchte Betriebsdauer. Eingefügt die Zunahme der Fehlstellen in den Lochtransportschichten über denselben Zeitraum.

Zusammengefasst konnten wir in diesem Projekt somit zeigen, dass die Kombination von unterschiedlichen Charakterisierungsmethoden mit elektro-optischen 1D-Simulationen ein wichtiges Hilfsmittel sein kann für Effizienz- und/oder Lebensdauersteigerungen von OLEDs.

Literatur:

- [1] Setfos 5.0, <https://www.fluxim.com/setfos-intro/>.
- [2] Paios, CS 4.2, <https://www.fluxim.com/paios>.
- [3] Regnat, Markus, et al, Advanced Electronic Materials (2019): <https://doi.org/10.1002/aelm.201900804>

3.5 Organische Terahertz-Photonik

Das Ziel dieses Projekts ist die Entwicklung eines voll-organischen und lückenfreien Ansatzes zur Erzeugung und Detektion von Breitband-Terahertz (THz)-Wellen. Die Resultate werden von grossem Wert für eine Vielzahl von Anwendungen, die von grundlegenden Studien von THz-Wechselwirkungen zwischen Licht und Materie bis hin zu industrieller THz-Spektroskopie und Bildgebung reichen.

Mitwirkende: U. Puc, M. Jazbinsek
 Partner: Ajou Universität, Südkorea
 Finanzierung: SNF Bilaterale Programme
 Dauer: 2020–2023

Terahertz-Quellen auf der Basis organischer elektrooptischer Kristalle haben in den letzten Jahren für die THz-Photonik zunehmend an Bedeutung gewonnen. Dies liegt an ihren einzigartigen Möglichkeiten, extrem hohe elektrische THz-Felder zu erzeugen, die für die Untersuchung von Licht-Materie-Wechselwirkungen benötigt werden, sowie an ihrer ultra-breiten Abdeckung des gesamten THz-Bereichs von 0.1 THz bis über 20 THz, die benötigt wird, um bestimmte Grundmoden der Materie zu untersuchen und zu kontrollieren. Dies macht organische elektrooptische Kristalle einerseits essentiell für das aufkommende Feld der nichtlinearen THz-Photonik, andererseits bieten organische Kristalle eine einzigartige Möglichkeit, die THz-Spektroskopie und Bildgebungsanwendungen über die Bandgrenze der meisten derzeit verwendeten Quellen hinaus zu erweitern.[1] Allerdings besitzen diese Materialien selbst intrinsische Schwingungsmoden im THz-Bereich, was zu unerwünschten Modulationen bis hin zu kompletten Lücken im erzeugten THz-Spektrum führt. Diese Modulation stellt eine fundamentale Grenze für die THz-Photonik auf der Basis organischer elektrooptischer Kristalle dar, die wir in diesem Projekt überwinden wollen.

In dieser interdisziplinären internationalen Projektkollaboration entwirft und synthetisiert die koreanische Seite (Ajou Universität) neuartige organische

Molekularkristalle mit grosser makroskopischer optischer Nichtlinearität und kontrollierten Kristalleigenschaften. Die Schweizer Seite (ZHAW) evaluiert theoretisch und experimentell die optischen und THz-Eigenschaften dieser Kristalle und setzt sie für breitbandige THz-Anwendungen ein.

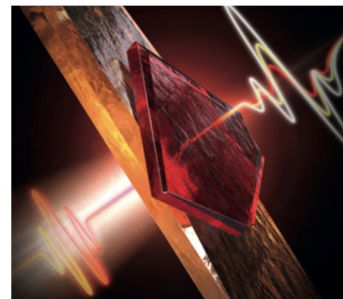


Abb. 1: In diesem Projekt werden organische elektrooptische Kristalle und ihre Kombinationen für die Erzeugung von Ultra-breitband-THz-Wellen verwendet. Abbildung: Ajou Universität [DOI: 10.1002/adfm.201707195].

Schliesslich werden wir unter Ausnutzung der Vorteile des neu entwickelten THz-Photonik-Ansatzes verschiedene neuartige organische Transportmaterialien untersuchen, die für eine Vielzahl von Anwendungen interessant sind, wie z. B. organische Solarzellen, organische Feldeffekttransistoren, organische Fotodetektoren und Gas-Sensoren.

Literatur:

[1] Jazbinsek, M.; Puc, U.; Abina, A.; Zidansek, A., 2019. Organic crystals for THz photonics. Applied Sciences. 9(5/882). Invited review paper.

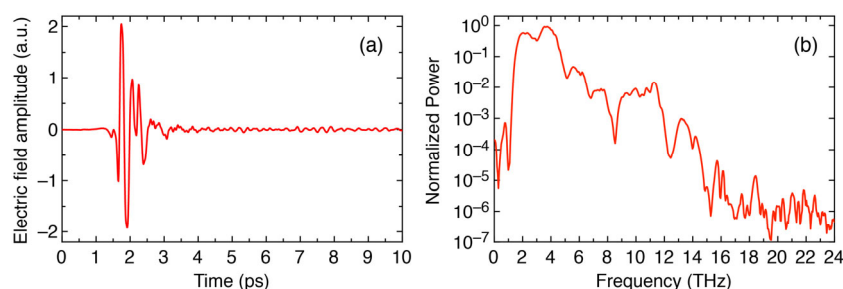


Fig 2: THz-Zeitbereichssignal (a) und das entsprechende Leistungsspektrum (b) des THz-Aufbaus auf der Basis organischer Kristalle: Das Ziel dieses Projekts ist es, die Modulation des in (b) gesehenen Signals zu reduzieren, um eine flache spektrale Antwort über den gesamten Frequenzbereich zu erreichen.

3.6 Hardware-Software-Integration und Validierung eines kompakten Terahertz-Systems

Am ICP entwickeln wir ein neues kompaktes Instrument für die zerstörungsfreie Prüfung und Charakterisierung im Terahertz (THz)-Bereich. Das neue System wird für spektroskopische THz-Messungen, THz-Bildgebung und THz-Dickenmessungen mit einem Ultrabreitband-Spektralbereich jenseits von 15 THz eingesetzt.

Mitwirkende: V. Michel, U. Puc, T. Bach, M. Jazbinsek
 Partner: Rainbow Photonics AG
 Finanzierung: Masterarbeit, Innosuisse
 Dauer: 2019–2020

Die THz-Photonik ist ein schnell wachsendes Gebiet mit vielversprechenden Anwendungen in der zerstörungsfreien Prüfung, Bildgebung und Materialidentifizierung/Spektroskopie. Während der letzten zwei Jahrzehnte wurden viele verschiedene Ansätze zur Erzeugung von THz-Wellen sowohl für Forschung als auch für industrielle Anwendungen vorgeschlagen. Gegenwärtig zeichnen die meisten kommerziellen und Labor-THz-Spektroskopie-Systeme nur Spektren bis zu wenigen THz auf. Das experimentelle System, das am ICP in Zusammenarbeit mit der Firma Rainbow Photonics AG entwickelt wurde, kann jedoch Frequenzen bis zu 20 THz messen, da es von der Kombination aus organischen Kristallen (DSTMS) und einem kompakten Telekom-Femtosekundenlaser profitiert, die zur Erzeugung und Detektion eingesetzt werden. Darüber hinaus ist das System so konzipiert, dass es die Erweiterung zu einem "Optical-Pump THz-Probe System" ermöglicht, ohne dass die Funktionalitäten des grundlegenden Zeitbereichsspektrometers verloren gehen. Die Ergebnisse zeigen eine ausgezeichnete Linearität sowohl bei der Erzeugung als auch der Detektion der THz-Felder, was eine Voraussetzung für eine zuverlässige Extraktion der Probenparameter ist, einschliesslich der Dicke und des komplexen Brechungsindex. Die gemessenen Frequenzen schmaler Wasserabsorptionslinien stimmen in hervorragender Weise mit den Literatur-Absorptionsspektren überein, so dass das DSTMS-basierte Spektrometer über die volle 20-THz-Bandbreite mit einer Genauigkeit von 2.7 GHz erfolgreich validiert werden konnte.

Dickenmessungen von Proben in Reflexionsgeometrie ermöglichen die Messung von Proben dünner als 50 μm mit einem relativen Fehler von 1 %. Gleichzeitige Brechungsindex- und Dickenmessungen an etwa 0.5 mm dicken Germanium-Wafern mit einer

Genauigkeit von 0.1 % wurden in der Transmissionsgeometrie nachgewiesen. Die Leitfähigkeitsänderungen einer Germaniumprobe bei optischer Anregung werden beobachtet, da die THz-Transmissionsänderungen im niedrigen THz-Frequenzbereich um mehr als 50 % betragen.

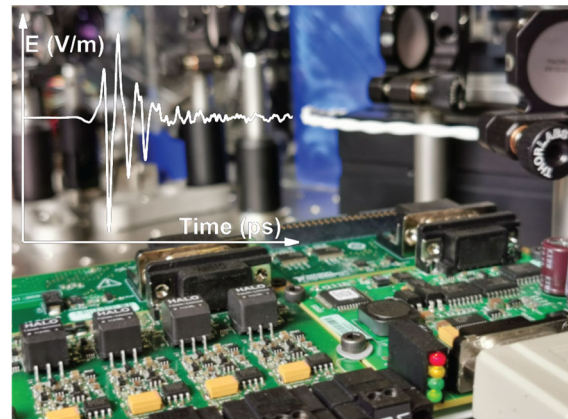


Abb. 1: Das entwickelte THz-Spektroskopiesystem basiert auf der Messung des elektrischen Feldes mit einer Auflösung im Sub-Pikosekundenbereich. Es wurden elektrische THz-Felder mit Frequenzkomponenten bis zu 20 THz erzeugt und detektiert. Dies ist durch die Integration und Optimierung von Photonik- und Elektronik-Komponenten und Datenerfassungssoftware möglich.

Die durchgeführte Arbeit demonstriert die fortschrittlichen Fähigkeiten des kompakten THz-Spektroskopiesystems, das an der ZHAW aufgebaut wurde, mit möglichen weiteren Verbesserungen bei der Optimierung der Detektionselektronik, um die Einflüsse des Laserrauschens zu minimieren und das Signal-Rausch-Verhältnis des Systems erheblich zu verbessern. Darüber hinaus wird die Weiterentwicklung von Algorithmen zur Datenextraktion eine bessere Genauigkeit bei der Extraktion von Dicken- und Materialparametern ermöglichen, was für verschiedene Forschungs- und Industrieanwendungen interessant ist.

4 Sensorik und Messsysteme

Unser Team von talentierten Ingenieuren und Wissenschaftlern der ZHAW wendet seit mehr als neun Jahren etablierte und neue Messmethoden auf relevante medizinische und biologische Probleme an. Wir arbeiten mit Startups, internationalen Unternehmen sowie führenden akademischen Partnern zusammen und bringen unser Ingenieurwissen in Projekte ein, die den neuesten Stand der technischen Entwicklung erfordern.

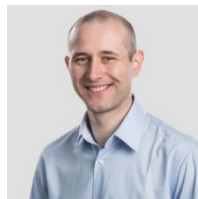
Wir kultivieren eine unternehmerische Denkweise, die über das akademische Publizieren hinausgeht, indem wir uns auf den Technologietransfer vom Labor zur Industrie konzentrieren. Zu unseren Finanzierungsquellen gehören die Schweizerische Agentur für Innovationsförderung (Innosuisse), die EU (Eurostars, Horizon 2020), der Schweizerische Nationalfonds (SNF) und verschiedene private Stiftungen sowie die direkte Finanzierung durch die Industrie.

Unsere Kernkompetenz ist die Entwicklung neuer Sensoren und Messverfahren in der Biomedizintechnik. Insbesondere haben wir Erfahrung in der Hautwissenschaft und -technologie: künstliche Hautmodelle, Computersimulationen, Entwicklung neuer Sensoren usw.

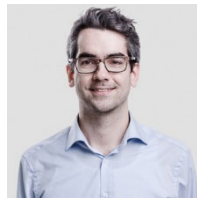
Wir profitieren von der hochmodernen Infrastruktur des Optoelektronischen Forschungslabors (OLAB), welches die Entwicklung anspruchsvoller Prototypen ermöglicht.



A. Bachmann



M. Bonmarin



D. Fehr



D. Kempf



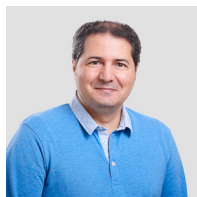
V. Metry



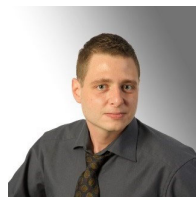
D. Schaltegger



M. Schmid



F. Spano



S. Weber



A. Witzig

4.1 Nachweis von Nanopartikeln in komplexen Umgebungen

Nanopartikel gibt es überall, von Medtech-Produkten bis hin zu Kosmetika oder Lebensmitteln. Deshalb ist es wichtig, Instrumente zu haben, um sie vor Ort zu überwachen. Die derzeitigen Methoden zum Nachweis und zur Charakterisierung von Nanopartikeln sind auf bestimmte Umgebungen (z.B. Flüssigkeiten) beschränkt oder erfordern eine aufwendige und teure Probenvorbereitung. Aus diesem Grund entwickeln wir in Zusammenarbeit mit dem Adolphe-Merkle-Institut der Universität Fribourg neue, auf Thermographie basierende Methoden zum Nachweis von auf Reize ansprechenden Nanopartikeln in komplexen Umgebungen.

Mitwirkende: M. Bonmarin

Partner: Adolphe-Merkle-Institut der Universität Fribourg

Finanzierung: Innosuisse und Stiftungen

Dauer: seit 2012

Nanopartikel sind winzige Partikel mit einer Grösse von 1 bis 100 nm (zum Vergleich: die Dicke eines Blattes Papier beträgt etwa 100'000 nm). Nanopartikel werden heute in vielen Produkten wie Verbundwerkstoffen oder medizinischen Geräten, aber auch in Kosmetika oder Lebensmitteln verwendet. Der Einsatz von Nanopartikeln wird vor allem in Europa zunehmend reguliert. Deshalb ist es von besonderer Bedeutung, über akkurate Instrumente zu verfügen, um sie nachzuweisen. Für den Nachweis und die Charakterisierung von Nanopartikeln stehen mehrere Methoden zur Verfügung, die jedoch oft Einschränkungen in Bezug auf das Medium, in dem die Partikel untersucht werden können, oder die Vorbereitung der Probe und die damit verbundenen Kosten aufweisen. Viele Nanopartikel reagieren auf Stimuli, d.h. sie haben die Fähigkeit, Wärme zu erzeugen, wenn sie stimuliert werden (durch Licht oder ein wechselndes Magnetfeld). Die resultierende Infrarotstrahlung kann leicht mit einer Wärmekamera erfasst werden. Mit Hilfe dieses Prinzips haben wir zusammen mit dem Adolphe-Merkle-Institut in Fribourg eine neue Methode entwickelt, um Nanopartikel in komplexen Umgebungen wie Zellkulturen, Gewebe oder Kompositmaterialien mit sehr hoher Genauigkeit zu charakterisieren. Wir haben mehrere Instrumente für magnetische Nanopartikel wie SPIONs oder plasmonische Partikel wie Gold entwickelt. Die Technologie wurde geschützt (2 Patente) und das Startup-Unternehmen NanoLockin GmbH mit Sitz in Fribourg vermarktet die Forschungsergebnisse. Wir sind überzeugt, dass die Thermografie eine vielversprechende Methode ist zur Untersuchung von Nanopartikeln, die gut auf Stimuli reagieren. Wir untersuchen derzeit das weitere Potenzial dieser Technik für viele Anwendungen im Bereich der Nanowissenschaften. Die Wahrscheinlichkeit, bis ans Lebensende ein Lymphödem zu entwickeln, liegt nach einer Brustkrebsbehandlung bei ca. 30 % –

und das ist nur einer der möglichen Risikofaktoren. Millionen von Menschen müssen daher mit einem erhöhten Risiko rechnen, an einem Lymphödem zu erkranken. Bei dieser Krankheit ist die Funktion des Lymphsystems dauerhaft gestört, wodurch z. B. die Arme irreversibel anschwellen, wenn nicht rechtzeitig eine geeignete Behandlung eingeleitet wird. Diese verlangsamt die Schwellung oder stoppt sie sogar komplett. Eine frühe Diagnose der Krankheit ist somit zentral. Dennoch gibt es zurzeit keine standardisierte, breit verfügbare Methode, die bei Menschen mit erhöhtem Risiko ein regelmässiges und zuverlässiges Monitoring erlaubt.



Abb. 1: Bild des Calorsito VIS-NIR Gerätes, das von der Firma NanoLockin GmbH entwickelt wurde. Die Firma ist eine Spin-off des Adolphe-Merkle-Instituts und des Instituts für Computational Physics der ZHAW.

Referenzen:

- [1] Journal of Physical Chemistry C, 124(2):1575-1584 (2020)
- [2] Particle & Particle Systems Characterization Journal, 36:1900224 (2019).
- [3] Journal of Physical Chemistry C, 121(48):27164-27175 (2017).
- [4] Journal of Magnetism and Magnetic Materials, 427:206-2011 (2017).
- [5] Nanoscale Journal, 8(27):13321-13332 (2016).
- [6] www.nanolockin.com

4.2 Tragbares Gerät zur Frühdiagnose von Lymphödemen

Mitwirkende: D. Fehr, A. Bachmann, M. Bonmarin

Finanzierung: Innosuisse

Dauer: 2018–2020

Die Wahrscheinlichkeit, bis ans Lebensende ein Lymphödem zu entwickeln, liegt nach einer Brustkrebsbehandlung bei ca. 30 % – und das ist nur einer der möglichen Risikofaktoren. Millionen von Menschen müssen daher mit einem erhöhten Risiko rechnen, an einem Lymphödem zu erkranken. Bei dieser Krankheit ist die Funktion des Lymphsystems dauerhaft gestört, wodurch z. B. die Arme irreversibel anschwellen, wenn nicht rechtzeitig eine geeignete Behandlung eingeleitet wird. Diese verlangsamt die Schwellung oder stoppt sie sogar komplett. Eine frühe Diagnose der Krankheit ist somit zentral. Dennoch gibt es zurzeit keine standardisierte, breit verfügbare Methode, die bei Menschen mit erhöhtem Risiko ein regelmässiges und zuverlässiges Monitoring erlaubt.

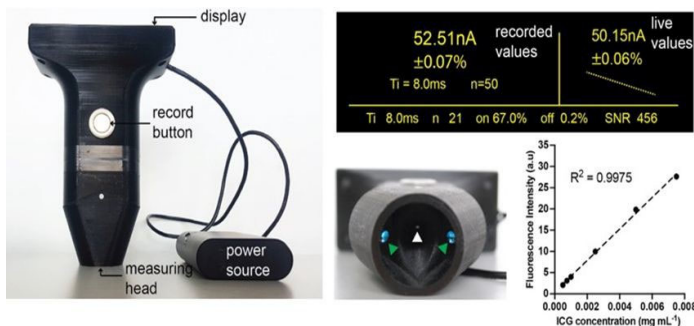


Abb. 1: Links: Autarkes Handgerät mit Batterie. Oben rechts: Display. Mitte: Messöffnung. Unten rechts: Gemessener Wert versus tatsächlicher Marker-Konzentration.

In dieser Arbeit wird, zusammen mit dem Institut für Pharmazeutische Wissenschaften der ETH Zürich, eine geeignete Methode zur Frühdiagnose von Lymphödem entwickelt. Sie besteht aus einem fluoreszierenden Marker, der in die Haut des Patienten injiziert wird, und aus einem, für medizinische Verhältnisse, einfachen Messgerät, welches die Abbaurate des Markers mittels der Fluoreszenzintensität bestimmen kann. Bei einer reduzierten Abbaurate besteht der Verdacht auf ein sich entwickelndes Lymphödem. Im Idealfall werden die Patienten mit dieser Methode ihr Lymphsystem selbständig und regelmässig überwachen können und im Verdachtsfall frühzeitig einen Spezialisten aufsuchen können. In verschiedenen Vorprojekten wurde ein geeigneter fluoreszierender Marker und ein erstes portables Messgerät mit optischer Sensorik zur Quantifizierung des Fluoreszenzsignals entwickelt. Dazu wurde die bestehende Optik (Abb. 2) um eine autarke Steuerelektronik und Bedienelemente ergänzt und in einem kompakten Gehäuse

verbaut (Abb. 1). Mit diesem Handgerät konnte die Methode bereits in verschiedenen präklinischen Versuchen validiert werden. Derzeit wird sie in Zusammenarbeit mit dem Universitätsspital Zürich in auch in einer klinischen Studie untersucht.

Zudem wurde das Messgerät überarbeitet und als tragbarer Sensor realisiert, d. h. das bisherige Handgerät konnte auf die Grösse einer Sportarmbanduhr verkleinert werden. Dazu wurde die Optik von Grund auf neu entwickelt, weil die bestehende prinzipbedingt nicht weiter verkleinert werden kann. Erste Versuche sind vielversprechend. Bei vergleichbarer Empfindlichkeit konnte die Optik beträchtlich verkleinert werden. Parallel wurde eine passende Smartphone-App als Bedieninterface und zur Anzeige der aufgezeichneten Messungen implementiert.

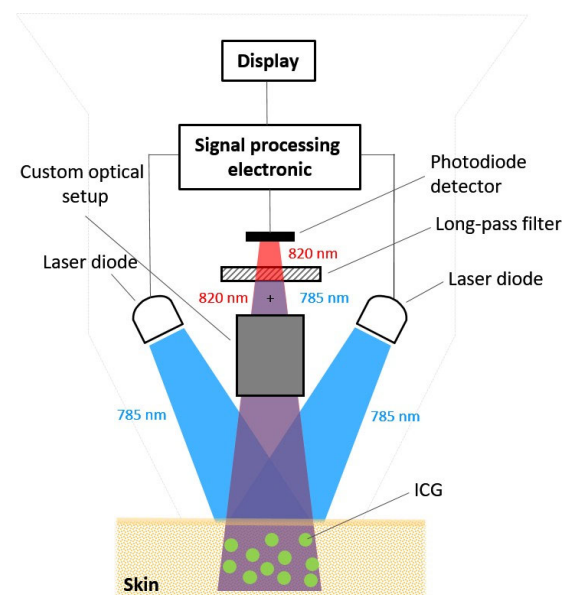


Abb. 2: Optische und elektronische Komponenten des Handgeräts.

Literatur:

[1] A. Polomska et al., *Minimally invasive method for the point-of-care quantification of lymphatic vessel function*, JCI Insight, 4(4), 2019.

4.3 Design und Entwicklung von künstlichen Hautmodellen für taktile Sensoranwendungen

Mitwirkende: F. Spano, D. Fehr, M. Bonmarin, J. Blunsch, R. Sassenburg

Dauer: 2019–2020

Trotz der bevorstehenden Einführung von vollständig zellbasierten Hautmodellen ist die Entwicklung der künstlichen Hautmodelle immer noch im Gange und relevant. Die zellbasierten Hautmodelle sind noch weit davon entfernt, die Eigenschaften der menschlichen Haut zu reproduzieren und die Bedürfnisse der Anwender abzudecken. Insbesondere besteht nach wie vor ein Bedarf an reproduzierbaren und stabilen künstlichen Hautmodellen, die verschiedene Eigenschaften der menschlichen Haut nachahmen. Darüber hinaus – und glücklicherweise – werden Tierversuche aufgrund neuer Vorschriften und ethischer Fragen nicht mehr toleriert. Daher werden künstliche Hautmodelle entworfen und entwickelt, die verschiedene Aspekte der menschlichen Haut emulieren können, wie z. B. die mechanischen, thermischen, transpirativen und taktilen Eigenschaften [1-2].

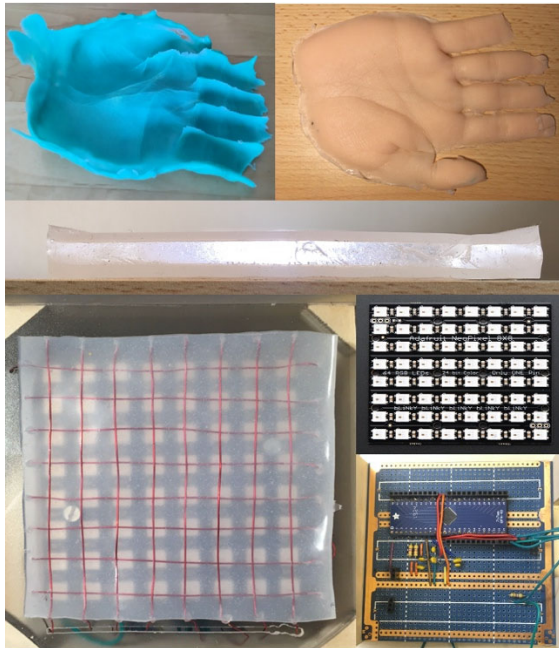


Abb. 1: Illustrationen der verschiedenen Herstellungsphasen: Materialentwicklung mit Handflächennachbildung; Mehrschichtiges Hautmodell mit der kapazitiv-sensorischen Matrix und der LED-Matrix, gesteuert durch die Versuchselektronik.

Die künstlichen Hautmodelle bestehen im Allgemeinen aus einer mehrschichtigen Kombination von Materialien, um die reale menschliche Haut und ihre verschiedenen Schichten (Stratum corneum, Epidermis, Dermis und Subdermis) nachzuahmen. Die zur Imitierung der physikalischen Eigenschaften der menschlichen Haut benutzten Materialien sind vielfältig [3]. Oft werden Materialien auf Silikonbasis verwendet, wie z. B. Polydimethylsiloxan (PDMS) oder gelatinöse Materialien [4]. Sie werden in Abhängigkeit von den zu simulierenden Eigenschaften ausgewählt. Hinsichtlich der Herstellungsprozesse verwenden wir klassische Ablagerungstechniken, wie z. B. Drop-

Casting und Bar-Coating. Darüber hinaus implementieren wir neue Technologien, wie z. B. das 3D-Bioprinting.



Abb. 2: Illustrationen der taktilen Fähigkeiten des künstlichen Hautmodells, das die reale menschliche Textur und die mechanischen Eigenschaften sowie die Farbveränderung in Abhängigkeit von der angewandten Kraft und der kapazitiven Mehrpunktsensorik implementiert.

Im Rahmen einer Bachelorarbeit konzentrierten wir uns auf Design und Herstellung einer künstlichen taktilen Haut. Das Hautmodell kombiniert die mechanischen Eigenschaften und die Textur der menschlichen Haut mit einem kapazitiven Sensor und einer LED-Matrix (Abb. 1), wodurch es die Berührungspunkte und die angewandten Kräfte durch einfache Farbwechsel visualisieren kann (Abb. 2).

Die mechanischen Eigenschaften wurden durch schichtweises Erzeugen eines mehrschichtigen Materials aus verschiedenen silikonbasierten Polymeren auf Siliziumbasis (Dragonskin FX Pro und Ecoflex) erzielt. Darüber hinaus wurde eine Nachbildung einer echten menschlichen Handfläche realisiert, die die Handtextur genau reproduziert und das Gefühl erhöht, mit einer menschlichen Hand zu interagieren. Unabhängig davon wurde ein flexibler kapazitiver Sensor entworfen und hergestellt, indem eine Matrix aus Drähten in die Polymerschicht eingebettet wurde. Im nächsten Schritt wurde eine LED-Matrix mit der kapazitiven Sensormatrix verbunden und programmiert. Die taktilen Haut ist in der Lage, auf Mehrpunktberührungen zu reagieren und die Variation des ausgeübten Drucks durch Farbwechsel anzuzeigen. Solche Hautmodelle können z. B. als Schnittstelle für von Menschen umgebene Roboter oder für interaktive Geräte zur Kommunikation in intelligenten Städten ins Auge gefasst werden.

Literatur:

- [1] M. Guan et al., Development of a sweating thermal skin simulant for heat transfer evaluation of clothed human body under radiant heat hazard, *Applied Thermal Engineering* 166, 114642 (2020).
- [2] L. Zhai et al., Development of a multi-layered skin simulant for burn injury evaluation of protective fabrics exposed to radiant heat, *Fire and Materials* 43 (2), 144-152 (2019).
- [3] A. K. Dabrowska et al., Materials used to simulate physical properties of the human skin, *Skin Research and Technology* 2016; 22: 3-14.
- [4] A. Dabrowska et al., A water-responsive, gelatine-based human skin model, *Tribology International* 113 (2017) 316-322.

4.4 Technologien zur Viskositätsregelung für die kontrollierte Applikation von Beschichtungsmaterialien

Eine Steuerelektronik zur Auswertung von Viskositätssensoren und die darauf ausgeführten DSP-Algorithmen wurden an eine neuartige Inline-Sensortechnologie angepasst. Danach ist ein Flow-Loop-System entwickelt und aufgebaut worden, um die Inline-Sensoren unter definierten Bedingungen zu testen und eine vollständige Charakterisierung der Sensoren durchzuführen. Erweitert man den Flow-Loop um eine automatisierte Verdünnerdosierung, so erhält man ein vollautomatisches Viskositätsregelsystem, welches eine konstant hohe Beschichtungsqualität gewährleistet und dem Anwender Einsparungen an Material, Anlagen- und Arbeitszeit ermöglicht.

Mitwirkende: D. Fehr, U. Vögeli, A. Bariska, S. Hauri, N. Reinke

Partner: Rheonics GmbH

Finanzierung: Innosuisse

Dauer: 2016–2019

Zur Auswertung der Sensorsignale eines neuartigen Inline-Viskositätsmeters wurde eine Auswerteeinheit auf Basis eines DSP (Digitaler Signalprozessor) entwickelt. Als Ausgangslage diente eine Elektronik mit zugehöriger Software von einem vorgängigen Projekt. Das Analog-Front-End und die Algorithmen wurden an die neuen Inline-Viskositätssensoren angepasst.

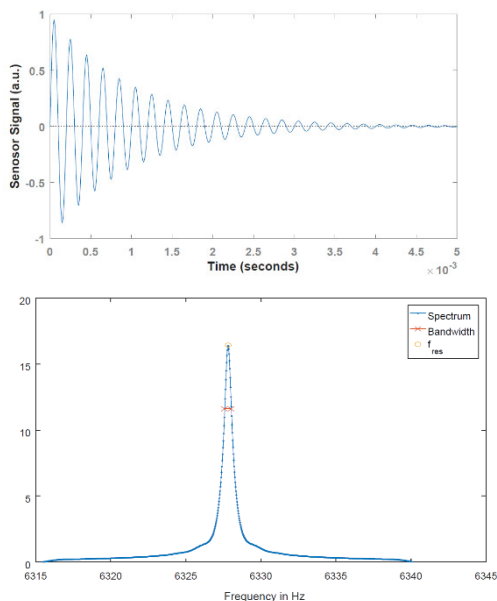


Abb. 2: Charakteristischer Ausschwingvorgang eines mechanischen Schwingers zur Viskositätsbestimmung (oben) und das zugehörige Spektrum, aus dem durch Bestimmung von Mittenfrequenz und Bandbreite auf die Viskosität des Fluids rückgeschlossen werden kann (unten).

Das zugrundeliegende Messprinzip kann wie folgt beschrieben werden: Die Elektronik versetzt den mit Fluid umspülten mechanischen Resonator in Schwingung. Dabei hängen Resonanzfrequenz und Dämpfung des Schwingers von der Dichte und Viskosität des Fluids ab. Abbildung 1 zeigt einen charakteristischen Ausschwingvorgang, der die Form

einer exponentiell abfallenden Schwingung aufweist. Die DSP-Elektronik bestimmt die Resonanzfrequenz und Dämpfung anhand des Spektrums des Ausschwingvorgangs, welches ebenfalls in Abbildung 1 zu sehen ist. Parallel zur Auswerteelektronik ist auch eine Teststrecke (Flow-Loop) entworfen und realisiert worden (Abbildung 2). Die Strecke ist wie ein typischer Nassbeschichtungsprozess aufgebaut: Förderung von Beschichtungsmaterial und Verdünner, Mischer, Zirkulation mit dem Inline-Viskositätssensor und einem Abgriff, der die Applikation des Beschichtungsmaterials simuliert. Mit dem Flow-Loop und der oben beschriebenen Auswerteelektronik können die Viskositätssensoren unter typischen Betriebsbedingungen getestet und charakterisiert werden. Weiterhin ermöglicht das System die Entwicklung einer Inline-Viskositätsregelung, bei der Verdünner automatisiert mit den Beschichtungsmaterialien gemischt wird. Mit dieser Technologie kann eine konstante Viskosität in industriellen Beschichtungsanlagen garantiert werden.

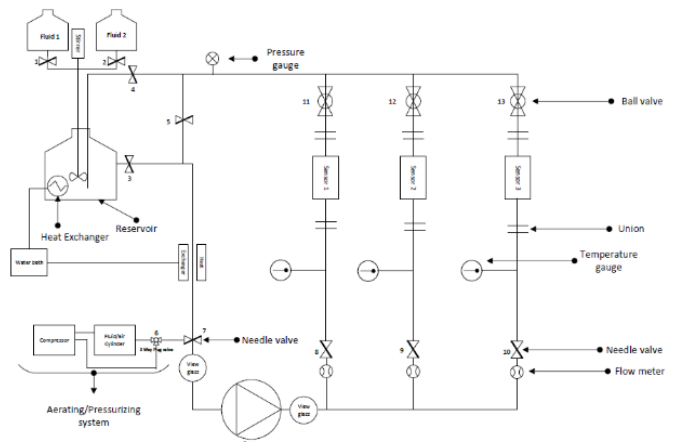


Abb. 3: Flow-Loop-Testsystem.

4.5 Artificial-Intelligence-Wärmepumpencontroller

Wir untersuchen eine massentaugliche Wärmepumpenregelung, die auf einem Reinforcement Learning Algorithmus basiert. Der Anwendungsfall sind kleine bis mittlere Anlagen. Normalerweise wird in diesen Systemen keine detaillierte Anlagenoptimierung gemacht. Der Artificial-Intelligence-Wärmepumpencontroller kann ohne Zusatzkosten und ohne Installationsaufwand auf Variationen der äusseren Bedingungen und des Nutzerverhaltens reagieren und das System laufend optimieren.

Mitwirkende: A. Witzig, S. Weber, D. Kempf

Partner: V. Ziebart (IAMP), N. Schmid (IAMP), M. Bättschmann (Firma BS2 AG)

Finanzierung: Innosuisse

Dauer: 2019–2020

Wärmepumpen sind als Ersatz von Öl- und Gasheizungen ein wichtiger Pfeiler der Energiestrategie 2050 und der weltweiten Anstrengungen zur Reduktion von CO₂-Emissionen. In Kombination mit Erdsonden haben sie ausserdem das Potential, einen signifikanten Beitrag zu leisten beim Ausgleich der stochastisch anfallenden Energieproduktion der neuen erneuerbaren Energien. Sie bieten – bei geeigneter Auslegung und Steuerung – für die Betreiber bereits heute eine finanziell interessante Möglichkeit zur direkten Nutzung von lokal produzierter Solarenergie.

Der Industriepartner BS2 bietet Wärmepumpen in diesem Segment an und integriert diese in das «2SOL»-System, siehe Abbildung. Der in dieser Arbeit vorgeschlagene neuartige Regler kann die verschiedenen Quellen und Senken sowie die Energiespeicherung ideal kombinieren und bei verändernden äusseren Bedingungen sowie bei Variationen im Benutzerverhalten das System in einem optimalen Zustand halten.

Es hat in der Vergangenheit bereits verschiedene Versuche gegeben, die Wärmepumpe mithilfe von künstlicher Intelligenz zu steuern. Die Lernsequenzen für maschinelles Lernen sind jedoch meist zu kurz, um befriedigende Ergebnisse erzielen zu können. In der vorliegenden Arbeit wird aufgezeigt, wie anhand von Simulationen ein Reinforcement-Learning-Algorithmus trainiert werden kann, so dass sich der Wärmepumpenregler auf unterschiedlichste Situationen, beispielsweise Gebäudedynamiken, Wettereinflüsse und Benutzerverhalten, einstellen kann.

Die verwendete Methodik ist einfach genug für die Einführung im Massenmarkt, sie braucht keine schnelle und stabile Internetverbindung und keine zusätzliche Sensorik.

Anpassung der Abläufe im Planungs- und Verkaufsprozess sind nicht nötig, und es werden keine sensiblen Betriebsdaten generiert. Während der Inbetriebnahme vereinfachen sich die Abläufe. Sobald die Wärmepumpe eingeschaltet wird, ermittelt sie automatisch den optimalen Betriebspunkt, sowohl für den Heizbetrieb als auch für die Regeneration der Erdsonde und gegebenenfalls für die Kühlung der Gebäude im Sommer. Das System ist erfolgversprechend, da es die Installation vereinfacht, Betriebskosten reduziert und den Komfort steigert.

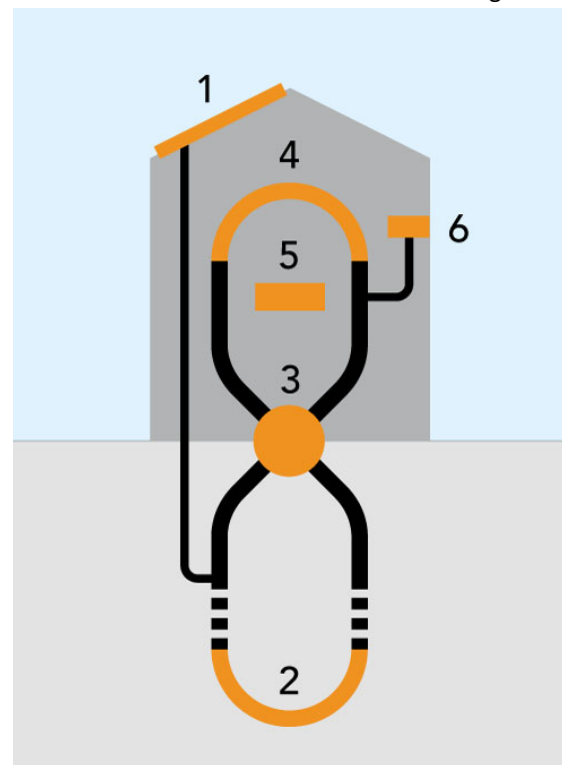


Abb. System «2Sol», siehe <http://www.2sol.ch/>: 1. Hybridkollektor, 2. Erdwärmesonde, 3. Wärmepumpe, 4. Wärmeverteilung, 5. Steuerung, 6. Lüftung mit Wärmerückgewinnung.

4.6 Klimadecken-Wärmespeicher erlaubt Reduktion in Fassadendämmung

Oft werden die harten Klimaschutzanforderungen im Gebäudebereich ohne energetische Optimierung des Heizsystems erreicht. Eine verpasste Chance! Die Unterlassung bezahlt man mit übermässiger Fassadendämmungen und potenziellen Überhitzungsproblemen im Sommer. In einem Validierungsprojekt wurde ein innovatives System untersucht, in dem fürs Heizen und Kühlen ein intelligentes Wärmepumpensystem eingesetzt wird. Mit der Aktivierung der Betondecken und deren Bewirtschaftung als Speichermedium profitiert das System zusätzlich von den Schwankungen der Strompreise, wie man sie in Zukunft erwartet.

Mitwirkende: A. Witzig, S. Weber

Partner: A. Bühler (Firma Klimatop in Deutschland)

Finanzierung: Direkt

Dauer: 2019–2020

Moderne Konzepte für die Altbausanierung haben zum Ziel, dass ein saniertes Gebäude übers Jahr bilanziert mehr Energie produziert als verbraucht. Ein erprobter Ansatz namens «Energiesprong» verfolgt dabei ein innovatives und skalierbares Konzept, das auch das Wärmepumpenheizsystem einschliesst [1]. Mit einer moderaten Fassadendämmung wird eine kostenoptimierte Lösung angeboten, die insbesondere in der Sanierung sehr attraktiv ist und im Klimaschutzprogramm 2030 der Deutschen Bundesregierung eine wichtige Rolle spielen könnte.

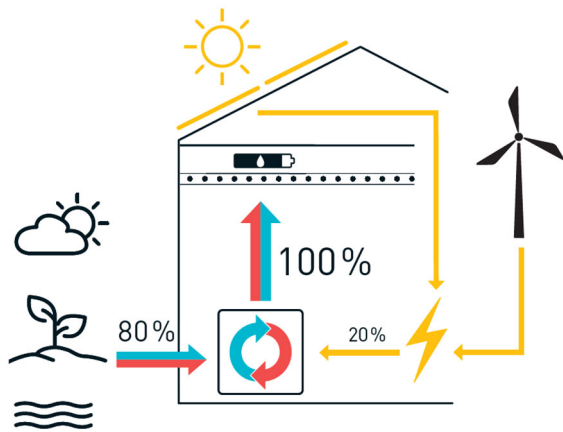


Abb. Die Wärmespeicherung in der Klimadecke und die intelligent angesteuerte Wärmepumpenheizung erlauben es, einen hohen Anteil erneuerbare Energie fürs Heizen von Innenräumen sowie die Gebäudeklimatisierung zu verwenden. Damit wird das System für eine kostengünstige Sanierung von Grossüberbauungen tauglich. In einer langfristigen Perspektive können die Speicherdecken ausserdem mit Überschussstrom aus fluktuierenden Energiequellen einen Beitrag zu Stabilisierung der Stromnetze liefern.

Um die so genannte «serielle Sanierung» kostengünstig anbieten zu können, schliessen sich mehrere Unternehmen zusammen, optimieren ihre internen Prozesse und setzen modernste digitale

Technologien ein. So erneuern sie im grossen Stil den urbanen Raum. Eine wichtige Rolle spielen dabei die Sektorkopplung – also die Vernetzung von Wärme, Strom und Mobilität – sowie städtebauliche und gesellschaftliche Überlegungen.

Um die geplante intelligente Systemtechnik zu prüfen und deren Eignung für den verbreiteten Einsatz unter verschiedensten Rahmenbedingungen zu validieren, wurde in diesem Projekt anhand von Simulationen das vorgeschlagene Heiz- und Kühlsystem untersucht. Die zum Einsatz kommenden Komponenten müssen massentauglich und kostenoptimiert sein. Die Planungswerkzeuge müssen digital sein und die Zusammenarbeit zwischen den Akteuren unterstützen. Das zukunftstaugliche Gesamtkonzept erlaubt ausserdem den Zusammenschluss von sehr vielen Einheiten, so dass im Europäischen Netzverbund gemeinsam ein positiver Effekt für die Stabilität der Stromversorgung erzielt werden kann. Dazu werden die Betondecken aller Gebäude als thermische Masse genutzt und als grosses Energiespeichermedium bewirtschaftet.

Literatur:

[1] «Energiesprong» Energiekonzept, www.energiesprong.org, aktuell mit Projekten in den Niederlanden, England, Frankreich und Deutschland.

[2] Raum-K Netzwerk https://raum-k.eu/wp-content/uploads/2020/01/Brosch%C3%BCre_RaumK_Panasonic_200107.pdf

4.7 Raumtemperatursensoren im digitalen Zwilling

In dieser Bachelorarbeit wurde der Einfluss der Position eines Temperatursensors auf die Heizungsregelung untersucht. Dies ist wichtig, um den Energieverbrauch und die Behaglichkeit in Innenräumen zu optimieren. Um in dieser Fragestellung weiter zu kommen, wurden neu implementierte Funktionalität im Simulationstool IDA ICE von der Firma EQUA AB genutzt.

Studentin: Sara Willi
 Kategorie: Bachelorarbeit
 Betreuer: A. Witzig, S. Weber
 Dauer: 2020

Temperatursensoren in Heizsystemen messen oft eine Kombination aus Lufttemperatur und Strahlung. In der digitalen Planung die Regelung des thermischen Komforts in Gebäuden deshalb anspruchsvoll. In dieser Arbeit werden Innenräume anhand von detaillierter physikalischer Simulation untersucht. Die durch die Sensoren gemessene Temperatur und die für die Regelung relevanten Informationen werden in einen Zusammenhang gebracht.

Weiter sollen die Erkenntnisse in die Gebäudeplanung und den Betrieb einfließen. Dafür kann es sinnvoll sein, einen digitalen Zwilling des Gebäudes zu erstellen. Dieser digitale Zwilling, welcher eine numerische Abbildung eines realen Objektes darstellt, enthält Modelle, mit welchen physikalische Prozesse abgebildet werden können. So kann beispielsweise die Temperaturverteilung in einem Raum aufgrund einer Lüftungsanlage graphisch dargestellt und die Regeltechnik verbessert werden.

Die theoretischen Grundlagen zu diesem Thema wurden bereits vor über 20 Jahren aufbereitet. Es wurde aufgezeigt, dass die Position des Temperatursensors einen massgeblichen Einfluss auf den Energieverbrauch haben kann. [1], [2]. Im digitalen Entwurf werden diese Zusammenhänge aber heute immer noch nur selten eingesetzt. Oft gehen vereinfachte Modelle von einer homogen durchmischten Lufttemperatur aus und Temperatursensoren werden nur ungenau abgebildet.

Ziel dieser Arbeit ist es, das Wissen in einer für die Baubranche nützlichen Form aufzuarbeiten und dabei die Prozesse und Werkzeuge zu verwenden, die heute für eine breite Nutzergruppe verfügbar sind. Dazu werden verschiedene neu implementierte Softwarefeatures von IDA ICE verwendet, um sie nach ihrer Eignung für die Abbildung der thermischen Behaglichkeit und des Energieverbrauches im digitalen Zwilling zu beurteilen.

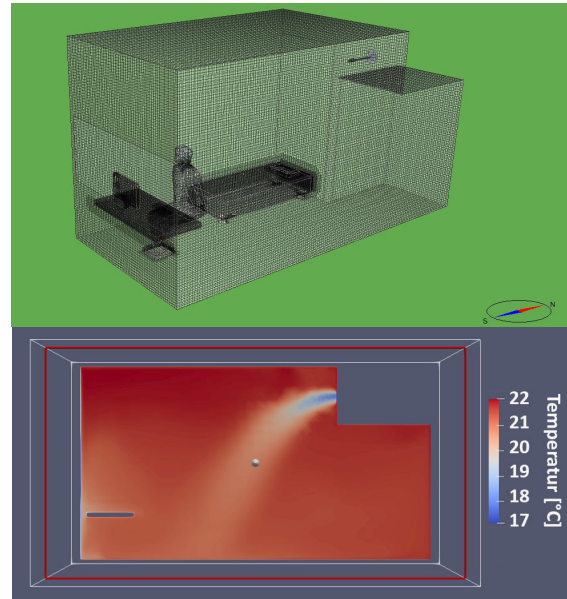


Abb. Temperaturverteilung in einem Hotelzimmer mit Lüftung. Oben: Gitter, Unten: Temperaturverteilung in Vertikal-Schnitt. IDA ICE bietet sowohl eine 3D-Lösung mit Finiten Volumen (unter Nutzung von OpenFoam), als auch ein numerisch effizientes Schichtenmodell mit eingebetteten Luftströmungen [3].

Literatur:

- [1] B. Magnus und J. Hill, «Thermal Analysis, Human Comfort, Indoor Environments», National Bureau of Standards (U.S.), Washington, D. C., 1977.
- [2] P. Riederer, D. Marchio, J. Visier, A. Husaunndee und R. Lahrech, «Room thermal modelling adapted to the test of HVAC control systems,» Elsevier, Building and Environment, ISSN: 0360-1323, 2002.
- [3] L. Eriksson, G. Grozmann, P. Grozmann, P. Sahlin, M. Vorre and L. Årenius, «CFD-free, Efficient, Micro Indoor Climate Prediction in Buildings, IBPSA Proceedings, UK, 2012.

5 Startup-Kultur am ICP

Am ICP sind über die Jahre einige Spin-off-Firmen entstanden. Das neu geschaffene ZHAW-Spin-off-Logo tragen sie noch nicht, aber wie die Rückfrage bei der ZHAW-Transfer-Stelle im Rektorat ergeben hat, wird eine nachträgliche Vergabe des Labels von der Hochschule durchaus unterstützt. Damit beschreiben wir bereits eine erste Eigenheit der ICP-Spin-offs: Sie sind nicht durch eine «top-down» orchestrierte Initiative entstanden, sondern «bottom-up» als Nebenprodukt erfolgreicher und anwendungsnaher Forschungsprojekte. Wir glauben, dass es kein Zufall ist, dass unser Institut potenzielle Firmengründer anzieht und unterstützt und wir erkennen eine positive Rückwirkung auf die Forschungsprojekte: Spin-off-Firmen sind oft gute Forschungspartner und manchmal wirksame Türöffner für EU-Projekte.



Die ZHAW hat das Potenzial von Spin-off-Firmen ebenfalls erkannt. An der School of Engineering wurde der diesjährige Departementstag diesem Thema gewidmet: In Impulsreferaten [1,2] wurden Erfahrungen aus anderen Hochschulen präsentiert und in Kleingruppen das Gehörte weiter vertieft. Bestimmt ist es gelungen, die Führungspersonen für dieses wichtige Thema zu sensibilisieren. Persönlich bin ich dem Thema verbunden, da ich selbst vor 15 Jahren den Schritt gewagt und meine sichere Anstellung in einem Forschungsinstitut aufgegeben habe, um in einem kleinen Team mit viel Dynamik und Unsicherheiten die Resultate eines Forschungsprojekts im Markt als Produkt zu platzieren.

Zusätzlich zur technischen Umsetzung muss bei der Überführung der Ideen in eine Startup-Firma die Finanzierung und die Einführung der Produkte auf dem Markt erfolgreich gemeistert werden. Wir haben aber am ICP keine ausgeprägten Kenntnisse in Finanzen oder Marketing. Diese Skills bringen die Kandidaten jeweils mit oder holen sie sich in Veranstaltungen, die sich direkt an Gründer wenden. Was wir am ICP bieten können, entspricht dem, was Eliav Haskal in einem Referat mit folgenden Stichworten zusammengefasst hat [1]:

Kreativität + Innovation + Risikokultur + Empowerment

Kreativität und Innovation

Dies sind die natürlichen Stärken einer Ingenieurschule. Die Projekte beginnen mit kreativen Ideen, und echte Innovation entsteht dann, wenn Projekte daraus werden und die Forschenden dranbleiben, bis in der Umsetzung für jemanden ein Nutzen entsteht. Auch in der Lehre sind Kreativität und Innovation gut vertreten, insbesondere in der Projektschiene, in manchen Praktika und natürlich in den Projekt- und Bachelorarbeiten.

Risikokultur und Empowerment

Zusätzlich unterstützend für die Förderung von unternehmerischem Denken ist ein bewusster Umgang mit Chancen und Risiken. Es darf auch einmal etwas schiefgehen. Schon während einer Projekt- oder Bachelorarbeit ist das Aus-Fehlern-Lernen wichtiger als die Reproduktion einer verborgenen Musterlösung. Empowerment geht noch etwas weiter und charakterisiert die Entscheidungsstrukturen, die Unternehmergeist fördern. Wer mitentscheiden darf und merkt, dass seine Meinung etwas wert ist, der trainiert sein unabhängiges Denken. Dies ist nicht immer nur Spass, denn man wird auch zur Verantwortung gezogen. Aber unternehmerisch denkende Forschende können sich am besten entfalten, wenn ihr Mitdenken honoriert wird.

Die Unterstützung im Gründungsprozess ist wichtig, vor allem bei jungen Gründern. Dabei geht es nicht nur um Wissenstransfer, sondern auch darum, dass innovative Forschende ihre Entfaltungsmöglichkeiten und ihr Potenzial erkennen. Dazu braucht es Vorbilder und eine entspannte Atmosphäre, bestimmt hilft auch eine Kultur der kreativen Kaffeepausen.

Es ist erstaunlich, wie viele Fördermittel für Startup-Förderung bereitstehen. Meist haben Firmengründer deshalb eine umfangreiche Auswahl an Beratern und müssen in manchen Situationen aufpassen, dass die verschiedenen Coaching-Prozesse nicht als Zeitverlust negative Auswirkungen haben.

Niemand ist gegen Spin-offs, aber es gibt Organisationsformen, die Unternehmergeist schwächen und andere Strukturen, die ihn stärken. In einer Umgebung, in der sich jeder lieber mehrfach absichert als selbst Verantwortung zu übernehmen, entstehen selten Startup-Firmen. Übertriebene administrative Prozesse hemmen den Unternehmergeist (aber motivieren vielleicht den Schritt in die Unabhängigkeit). Wer die Sicherheit von gut beschriebenen Abläufen schätzt, bleibt möglicherweise lieber auf der Seite der Fachhochschulforschung.

Nicht jede erfolgreiche Innovation findet ihre Umsetzung über den Weg einer Startup-Firma. Gerade in klassischen Fachhochschul-Projekten setzt der Industriepartner die Forschungsergebnisse um. Sowohl inkrementelle Verbesserung wie auch eine bahnbrechende Innovation können in einem funktionierenden Geschäft oft einfacher umgesetzt werden. Gelingt es, bestehende Kunden anzusprechen, sind die Eintrittshürden für ein neues Produkt um ein Vielfaches tiefer als beim Markteintritt eines Newcomers.

Ein interessantes Resultat aus den Diskussionen der School of Engineering: Die Inspiration, die von der Spin-off-Idee ausgeht, kann als motivierendes und aktivierendes Element in der Lehre genutzt werden. Wenn es gelingt, die Lernziele in das Narrativ einer Firmengründung zu packen, wirkt sich dies auf die Zusammenarbeit der Studierenden und letztlich auf den Lernerfolg positiv aus. Dabei müssen die Erwartungen realistisch gesetzt werden: Aus dem Übungsbetrieb eines Moduls im Bachelorstudium wird in den seltensten Fällen eine Spin-off-Idee geboren. Aber zur Unterstützung des innovativen Denkens ist der Spin-off-Leitgedanke wertvoll.

Auf den folgenden Seiten sind die Firmen beschrieben, die am ICP entstanden sind. Nicht alle haben überlebt, aber alle haben es versucht und mit allen haben wir gemeinsame Projekte gemacht. Natürlich ist es eine Enttäuschung, wenn es eine Firma nicht schafft. Es ist wichtig, dass Investoren und Gründer auch mit dieser Möglichkeit rechnen. Und als Hochschulpartner ist es genauso wichtig, diese Eventualität mitzudenken. In gut aufgesetzten Partnerschaften kann in dieser Situation oft das Kern-Knowhow weiterleben und in weiterer Forschungstätigkeit genutzt werden.

Einige unserer aktuellen Forschungsthemen haben das Potenzial für eine kommerzielle Nutzung. Zusätzlich braucht es dann ein gutes Gründerteam, denn manchmal sind Innovationskraft und Umsetzungsstärke im freien Markt nicht in einer Person vereint, so dass ein Startup erst mit einer guten Team-Konstellation zum Fliegen kommt. ZHAW-intern gibt es mehrere weitere Anlaufstellen [3] und gerne lassen wir auch unsere persönlichen Netzwerke spielen. Es freut uns, wenn dies in Zukunft auch immer wieder passiert und wir innovative Studierende oder Mitarbeitende weiterhin dabei unterstützen können, den Schritt in die Unabhängigkeit zu wagen.

Andreas Witzig, Institutsleiter ICP

Referenzen:

- [1] Eliav Haskal, *Wie kann man eine Innovations- und Entrepreneurship-Kultur innerhalb einer Forschungsorganisation entwickeln?* Vortrag am Departementstag der School of Engineering, 17.1.2020, Winterthur
- [2] Patrick Link, *Smart-up – Ideen erfolgreich umsetzen*. Vortrag am Departementstag der School of Engineering, 17. Januar 2020, Winterthur
- [3] [Entrepreneurship@ZHAW](#), [Runway Incubator](#), [Startup Challenge](#)

ICP-Spin-off-Firmen



www.nmtec.ch

Die Numerical Modelling GmbH arbeitet auf dem Gebiet des Computer Aided Engineering (CAE) und bietet Dienstleistungen und Simulationstools kleinen und mittleren Unternehmen an. Unsere Kernkompetenz ist der Wissenstransfer, indem wir die Lücke zwischen wissenschaftlichem Know-how und seiner Anwendung in der Industrie schliessen. Mit unserem Wissen aus Physik, Chemie und den Ingenieurwissenschaften sind wir in der Lage, Ihren Produktentwicklungszyklus zu unterstützen und uns Ihrem Zeit- und Kostenrahmen anzupassen. Wir schaffen häufig sogenannte kundenspezifische CAE-Tools, in die die wissenschaftlichen Kenntnisse, die für Ihr Produkt nötig sind, eingebettet sind. In dieser Form kann es leicht innerhalb Ihrer F&E-Abteilung eingesetzt werden, aktuelle Projekte unterstützen sowie die Fähigkeiten Ihrer Mitarbeiter verbessern. Fragen Sie uns nach unserem unverbindlichen Beratungsangebot, das alle Gebiete des wissenschaftlichen Wissenstransfers umfasst.



www.fluxim.com

Fluxim ist ein Anbieter von Simulationssoftware und Messhardware für die Display-, Beleuchtungs- und Photovoltaik-Industrie weltweit. Die Hauptaktivität von Fluxim ist die Entwicklung der Simulationssoftware Setfos und Laoss, ebenso wie der Messsysteme Paios, Phelos und Litos. Die Kombination der Simulationssoftware mit Messdaten erlaubt die Bestimmung von Material- und Bauteilparametern. Die F&E-Tools werden weltweit in industriellen und akademischen Forschungslabors eingesetzt, um neue Bauelemente und Halbleitermaterialien mit verbesserter Leistung zu entwickeln und um die Physik der Bauelemente zu untersuchen.



www.coatmaster.ch

Die coatmaster AG entwickelt Messsysteme für schnelle berührungslose und zerstörungsfreie Prüfung industrieller Beschichtungen. Mit diesen Messsystemen können Beschichtungsdicken und Materialparameter bestimmt werden, etwa die Porosität und die Kontaktqualität, um beispielsweise Delamination zu entdecken. Das System basiert auf optisch-thermischen Messverfahren und lässt sich auf alle Arten von Beschichtungs- und Substratmaterialien anwenden. Unsere Messsysteme bieten die einzigartige Möglichkeit der berührungslosen und zerstörungsfreien Prüfung von beliebigen Beschichtungen auf Substraten.



Die Dermolockin GmbH hat ein Verfahren entwickelt, wie man basierend auf aktiver Thermographie dermatologische Untersuchungen unterstützen kann. Ein wichtiges Anwendungsfeld war dabei die Diagnose von Hautkrebs. Leider musste das Unternehmen im Jahr 2019 seine Geschäftstätigkeit aufgeben. Durch die enge Zusammenarbeit zwischen dem ICP und der Spinoff-Firma können wesentliche Teile des Knowhows für die Forschung weiterhin genutzt werden.



www.nanolockin.com

NanoLockin entwickelt eine neue Benchmark-Technologie für den Nachweis und die Analyse von Nanopartikeln in allen Arten von Produkten. Das Unternehmen hat den Fribourg Innovation Award 2018 gewonnen.



www.skinobi.com

Opus Néoi ist ein im Jahr 2019 gegründetes Spin-off-Unternehmen, das Skinobi entwickelt, den ersten zuverlässigen Hautsensor für Endverbraucher. Skinobi ermöglicht es dem Kunden, den Hautzustand zu Hause zu überwachen und empfiehlt ihm die ideale, massgeschneiderte Hautpfegelösung. Analyse und Extraktion der Parameter geschehen mithilfe ausgeklügelter Algorithmen in einem IoT-Netzwerk. Das innovative, optische Messverfahren misst gezielt die Wärmetransporteigenschaft der Haut. Wärmeleitfähigkeit, Wärmekapazität oder Dichte sind sehr gute Indikatoren für den Zustand der Haut und korrelieren mit physiologischen Parametern wie Hydratation oder epidermaler Dicke.



ZARAWIND *More than green power*

www.zarawind.com

Zarawind ist ein ZHAW-Spin-off mit Sitz in Winterthur, das an der Entwicklung einer in der Luft schwebenden Windenergeturbine beteiligt ist. Das Ziel der Firma ist es, heute noch ungenutzte erneuerbare Energiequellen zu erschliessen. Die Technologie von Zarawind strebt an, erneuerbare und kostengünstige Elektrizität aus der in grosser Höhe und starken und konsistenten Windkraft zu produzieren. Das kann durch einen Rotor erreicht werden, der durch einen Aerostaten auf mehrere hundert Meter über Grund angehoben wird. Die Windkraft ist eine starke, ständig verfügbare Energiequelle. Das Zarawind-Konzept stellt dauerhaften Betrieb sicher und verhindert Lärmprobleme, flackernde Lichtreflektionen und Vogelkollisionen. Es ist auch für netzferne Regionen geeignet und produziert Strom zu geringen Kosten.



www.reorbis.com

Die Reorbis GmbH mit Sitz in Winterthur hat das Ziel, Dienstleistungen für die verarbeitende Industrie in der Form von Lebenszyklusanalysen (LCA) anzubieten. In der Aluminiumindustrie besteht aufgrund einer neuen Norm (Aluminium Stewardship Initiative, ASI) grosses Interesse für LCA. Das Angebot richtet sich in erster Linie auf die Erreichung der Zertifizierung ASI-Norm. Die Kreislaufwirtschaft wird neben Aluminium auf weitere Rohstoffe angewandt.

Anhang

A.1 Studierendenprojekte

J. ALBERT, K. SADRIU, *Digitalisierung der Lehre mittels Gamification-App*. Betreuer: K. P. Pernstich, W. Eich.

A. BACHMANN, *A wireless measurement collection system for LymphMeter*. Betreuer: M. Bonmarin, D. Fehr, Partner: ETH Zürich - Institut für Pharmazeutische Wissenschaften, Vertiefungsarbeit 1.

D. P. BAUMANN, L. H. BALZ, *Auslegung und Bau einer automatischen Holzschnitzelzuführung für ein Holzvergasungssystem*. Betreuer: G. Boiger, A. Fassbind, M. Boldrini, Firmenpartner: Aberta Nova S.A.

D. P. BEE, J. GIGER, *Development of an active thermal imaging-based hand held device for dermatological applications*. Betreuer: M. Bonmarin, L. Holzer, Firmenpartner: Fotofinder GmbH, Bachelorarbeit Systemtechnik.

J. BLUNSCHI, R. SASSENBURG, *Creating Cell-free Artificial Skin in the Laboratory*. Betreuer: M. Bonmarin, F. Spano, D. Fehr, Firmenpartner: none, Projektarbeit Systemtechnik.

J. BLUNSCHI, R. SASSENBURG, *Artificial Tactile Skin: Flexible Pressure Sensitive Skin models*. Betreuer: F. Spano, D. Fehr, M. Bonmarin, Bachelorarbeit Systemtechnik.

E. COMI, *Large-area AC characterization of PV cells*. Betreuer: E. Knapp, B. Ruhstaller, Firmenpartner: Fluxim AG.

E. COMI, *Large-area solar cell model validation*. Betreuer: E. Knapp, B. Ruhstaller, Firmenpartner: Fluxim AG.

I. ERNI, O. LENGWEILER, *Konstruktion und Realisierung einer Schmelzfront-Messeinrichtung für IR-Schweissen von Kunststoffrohren*, Betreuer: T. Hocker, S. Koll, Projektpartner: Georg Fischer Piping Systems, Projektarbeit Maschinentechnik.

D. B. FELDER, F. R. HÖRNLIMANN, *Steuerung und Regelung einer automatischen Holzschnitzelzuführung für ein Holzvergasungssystem*. Betreuer: G. Boiger, A. Fassbind, M. Boldrini Firmenpartner: Aberta Nova S.A.

R. HAGEN, D. WYDER, *Thermal Imaging Microscopy of Brown-Fat Cells*. Betreuer: M. Bonmarin, Firmenpartner: none, Projektarbeit Systemtechnik.

R. HAGEN, *Development of a multi-wavelengths hand-held fluorescence measurement device*, Betreuer: D. Fehr, M. Bonmarin, F. Spano, Bachelorarbeit Systemtechnik.

C. HALDNER, A. WIDMER, *Weiterentwicklung und Implementierung einer Pumpensteuerung zur Levelstabilisierung des Haupttanks einer experimentellen Kupferelektrolyseanlage*. Betreuer: G. Boiger, M. Boldrini, Firmenpartner: intern.

N. JENAL, *Entwicklung eines Prüfstands für das kontaktlose Schweissen von Kunststoffproben*, Betreuer: C. Brändli, T. Hocker, Projektpartner: Georg Fischer Piping Systems, Vertiefungsarbeit Masterstudiengang.

N. JENAL, *CFD-Simulationen und Prüfstandschweissungen zur Entwicklung einer Heizung für GFPS-Schweissmaschinen*, Betreuer: C. Brändli, T. Hocker, Projektpartner: Georg Fischer Piping Systems, Vertiefungsarbeit Masterstudiengang.

M. KAUFMANN, C. BLÄTTLER, *Physik spielend lernen mittels Gamification-App*. Betreuer: K. P. Pernstich, W. Eich.

K. KÜNZLI, *Development of Innovative Sweat Sensors*, M. Bonmarin, F. Spano, D. Fehr, Bachelorarbeit Systemtechnik.

- C. MALNATI, *Real-time simulation of mechanical resonator*. Betreuer: M. Bonmarin, D. Fehr, Firmenpartner: Rheonics GmbH, Vertiefungsarbeit 1.
- C. MALNATI, *3D Reconstruction of thermal images*, Betreuer: M. Bonmarin, Vertiefungsarbeit MSE.
- V. MICHEL, *Development of a broadband pump-probe terahertz spectrometer*. Betreuer: U. Puc, M. Jazbinsek, Firmenpartner: Rainbow Photonics AG, Vertiefungsarbeit Masterstudiengang.
- V. MICHEL, *Hardware-software integration and validation of a compact, time-resolved, optical-pump terahertz-probe spectroscopy system*. Betreuer: U. Puc, M. Jazbinsek, Firmenpartner: Rainbow Photonics AG, Masterarbeit Masterstudiengang.
- A. MORANDI, *Development of a PCB board for signal acquisition and system control*. Betreuer: U. Puc, M. Jazbinsek, Firmenpartner: Rainbow Photonics AG, Projektarbeit Elektrotechnik.
- A. MORANDI, *Low noise detection and acquisition electronics for a terahertz spectrometer*. Betreuer: U. Puc, M. Jazbinsek, Firmenpartner: Rainbow Photonics AG, Bachelorarbeit Elektrotechnik.
- L. RUCKSTUHL, *Optimizing the thermal behavior of the Medyria flow sensor using experimental methods and CFD-simulations*, Betreuer: T. Hocker, Projektpartner: Medyria AG, Masterarbeit Masterstudiengang.
- D. SCHOCH, M. WERNLI, *Automatisierte Interpolation von Strömungssimulationen*. Betreuer: G. Boiger, A. Zubiaga, Firmenpartner: intern.
- J. SCHOLER, R. M. ORTIZ, *Aerodynamische Optimierung eines Rennfahrzeuges mittels CFD-Simulation und Anwendung automatisierter Simulationen*. Betreuer: G. Boiger, M. Boldrini, B. Siyahhan, Firmenpartner: Sauber AG.
- S. SPIRIG, *Thermisch-fluidische Simulation des Aufwärmprozesses von Kunststoffrohren mit der Infrarotschweißmaschine IR-315 A*, Betreuer: T. Hocker, Projektpartner: Georg Fischer Piping Systems, Masterarbeit Masterstudiengang.
- J. STOLL, *Experimentelle und theoretische Charakterisierung der Bewegung von Heissluftballons*, Betreuer: T. Hocker, Projektpartner: Air Ballonteam Stefan Zeberli GmbH, Vertiefungsarbeit Masterstudiengang.
- T. STUDER, M. TANNER, *Klimakammer*. Betreuer: G. Boiger, M. Boldrini, Firmenpartner: intern.
- N. WEGMANN, *Konzeptentwicklung einer Klimakammer*. Betreuer: G. Boiger, M. Boldrini, Firmenpartner: intern.
- S. WEIDMANN, *Frequency Domain 2D + 1D FEM Simulation of Solar Cells*. Masterarbeit ETHZ, September 2019. Betreuer: B. Ruhstaller, R. Hiptmair, C. Kirsch, R. Hiestand, Firmenpartner: Fluxim AG.
- S. WIESER, T. GASSER, *Integration eines geeigneten Heizelementes in den formgebenden Bereich des Verpackungsmaterials einer horizontalen Schlauchbeutelmaschine als Vorheizung*. Betreuer: G. Boiger, D. Brunner, Firmenpartner: Syntegon Packaging Systems AG.
- S. WIESER, T. GASSER, *Prototyp eines Schwingungsisolators für Schweizer Pharmaindustrie*. Betreuer: G. Boiger, D. Brunner, Firmenpartner: intern.
- D. WYSS, *Modeling the separation of solid-liquid dispersion in decanter centrifuges*, Betreuer: T. Hocker, T. Hühn, Projektpartner: Oro De Cacao, Vertiefungsarbeit Masterstudiengang.
- S. ZEDER, *Hybrid Master Equation Model for Exciton Dynamics in OLEDs*. Masterarbeit ETHZ, April 2019. Betreuer: B. Ruhstaller, C. Kirsch, R. Hiptmair, Firmenpartner: Fluxim AG.

A.2 Wissenschaftliche Publikationen

U. AEBERHARD, S. ALTAZIN, L. STEPANOVA, A. STOUS, B. BLÜLLE, C. KIRSCH, E. KNAPP, B. RUHSTALLER, *Numerical Optimization of Organic and Hybrid Multijunction Solar Cells*. Proc. IEEE 46th Photovoltaic Specialists Conference (PVSC), 2019; pp. 0105–0111. DOI: 10.1109/PVSC40753.2019.8980824.

U. AEBERHARD, M. NEUKOM, A. SCHILLER, S. ZÜFLE, S. JENATSCH, B. BLÜLLE, S. ALTAZIN, L. STEPANOVA, E. KNAPP, C. KIRSCH, B. RUHSTALLER, *Computational device optimization and parameter extraction for perovskite-based solar cells*. Proc. SPIE 11275, Physics, Simulation, and Photonic Engineering of Photovoltaic Devices, IX, 2020; 112750B. DOI: 10.1117/12.2545507.

Z. ANDLEEB, C. STRAND, S. MALIK, G. HUSSEIN, H. KHAWAJA; G. BOIGER, M. MOATAMED, *Multiphysics Analysis of CFRP Charpy Tests by varying Temperatures*. Int.Journal of Multiphysics. 14(2), pp. 143-160, 2020. DOI: 10.21152/1750-9548.14.2.143.

D. BERNHARDSGRÜTTER, M. SCHMID, *Modeling of Intensity-Modulated Photocurrent/Photovoltage Spectroscopy: Effect of Mobile Ions on the Dynamic Response of Perovskite Solar Cells*. J. Phys. Chem. C 123 (50), 30077-30087, 2019.

G. BOIGER, M. BOLDRINI, V. LIENHARD, B. SIYAHAN, H. KHAWAJA, M. MOATAMED, *Multiphysics Eulerian-Lagrangian Electrostatic Particle Spray- And Deposition Model for OpenFoam® and KaleidoSim® Cloud-Platform* (2020). Int.Journal of Multiphysics. 14(1), pp. 1-15, 2019. DOI: 10.21152/1750-9548.14.1.1

G. BOIGER, V. BUFF, A. ZUBIAGA, A. FASSBIND, P. CAELS, 2019. *Investigating tar formation at low pressures in wood gasification systems, applying a novel thermo-chemical simulation model*. In: Proceedings of the 5thInt.Conference of Polygeneration Strategies 2019. 5thInt.Conference of Polygeneration Strategies 2019 (ICPS19), Vienna, Austria, 18-20 November 2019.

D. BRAGA, S. JENATSCH, L. PENNINGCK, R. HIESTAND, M. DIETHELM, S. ALTAZIN, C. KIRSCH, B. RUHSTALLER, *Modeling Electrical and Optical Cross-Talk between Adjacent Pixels in Organic Light-Emitting Diode Displays*. SID Symposium Digest of Technical Papers 50 (1), 2019; pp. 953–956. DOI: 10.1002/sdtp.13083.

D. BRUNNER, J. GOODBREAD, K. HÄUSLER, S. KUMAR, G. K. BOIGER, H. A. KHAWAJA, *Analysis of a tubular torsionally resonating viscosity–density sensor*. Sensors. 20(11), pp. 3036, 2020. DOI: 10.21256/zhaw-20176.

T. O. BUCHMANN, E. J. R. KELLEHER, K. J. KALTENECKER, B. B. ZHOU, S. H. LEE, O. P. KWON, M. JAZBINSEK, F. ROTERMUND, P. U. JEPSEN, *MHz-repetition-rate, sub-mW, multi-octave THz wave generation in HMQ-TMS*. Opt. Express 28, 9631, 2020.

M. DIETHELM, A. SCHILLER, M. KAWECKI, A. DEVIŽIS, B. BLÜLLE, S. JENATSCH, E. KNAPP, Q. GROSSMANN, B. RUHSTALLER, F. NÜESCH, R. HANY, *The Dynamic Emission Zone in Sandwich Polymer Light-Emitting Electrochemical Cells*. Adv. Func. Mat., 2019.

M. DIETHELM, Q. GROSSMANN, A. SCHILLER, E. KNAPP, S. JENATSCH, M. KAWECKI, F. NÜESCH, R. HANY, *Optimized Electrolyte Loading and Active Film Thickness for Sandwich Polymer Light-Emitting Electrochemical Cells*. Advanced Optical Materials 7 (3), 1801278, 2019.

B. EIDEL, A. GOTE, M. RUBY, L. HOLZER, L. KELLER, X. JIANG, *Estimating the effective elasticity properties of a diamond/β-SiC composite thin film by 3D reconstruction and numerical homogenization*. Diamond and Related Materials, 97, 107406, 2019. (ISSN 0925-9635, <https://doi.org/10.1016/j.diamond.2019.04.029>)

G. FACCIO, A. CONTI, E. MAILAND, E. ZARE-EALANJEGH, R. INNOCENTI MALINI, K. MANIURA-WEBER; R. M. ROSSI, F. SPANO. *Complete inclusion of bioactive molecules and particles in polydimethylsiloxane: a straightforward process under mild conditions*. Scientific Reports 9:17575, 2019.

F. GIORGIANNI, U. PUC, M. JAZBINSEK, T. CEA, M. J. KOO, J. H. HAN, O. P. KWON, C. VICARIO, *Supercontinuum generation in OHQ-N2S organic crystal driven by intense terahertz fields*. Opt. Lett. 44, 4881, 2019.

- A. J. L. HOFMANN, S. ZÜFLE, K. SHIMIZU, M. SCHMID, V. WESSELS, L. JÄGER, S. ALTAZIN, K. IKAGAMI, M. R. KHAN, D. NEHER, H. ISHII, B. RUHSTALLER, W. BRÜTTING, *Dipolar doping of organic semiconductors to enhance carrier injection*. Phys. Rev. Appl. 12 6, 2019.
- Y. JABBARI, E. TSOTSAS, C. KIRSCH, A. KHARAGHANI, *Determination of the moisture transport coefficient from pore network simulations of spontaneous imbibition in capillary porous media*. Chem. Eng. Sci. 207, pp. 600–610, 2019, DOI: 10.1016/j.ces.2019.07.002.
- J. JAGIELSKI, S. F. SOLARI, L. JORDAN, D. SCULLION, B. BLÜLLE, Y. T. LI, F. KRUMEICH, Y. C. CHIU, B. RUHSTALLER, E. J. G. SANTOS, C. J. SHIH, *Scalable photonic sources using two-dimensional lead halide perovskite superlattices*. Nature Communications 11 1 1, 2020.
- M. JAZBINSEK, U. PUC, A. ABINA, A. ZIDANSEK, *Organic crystals for THz photonics*. Appl. Sci. 9, 882, 2019.
- S. JENATSCH, S. ZÜFLE, B. BLÜLLE, B. RUHSTALLER, *Combining steady-state with frequency and time domain data to quantitatively analyze charge transport in organic light-emitting diodes*. J. Appl. Phys. 127 (3), 031102, 2020.
- D. KIM, W. T. KIM, J. H. HAN, J. A. LEE, S. H. LEE, B. J. KANG, M. JAZBINSEK, W. YOON, H. YUN, D. KIM, S. VAN BEZOUW, J. CAMPO, W. WENSELEERS, F. ROTERMUND, O.P. KWON, *Wide-Bandgap Organic Crystals: Enhanced Optical-to-Terahertz Nonlinear Frequency Conversion at Near-Infrared Pumping*. Appl. Optical Mater. 8, 1902099, 2020.
- S. I. KIM, B. J. KANG, C. U. JEONG, M. H. SHIN, W. T. KIM, M. JAZBINSEK, W. YOON, H. YUN, D. KIM, F. ROTERMUND, O. P. KWON, *Fluorinated organic electro-optic quinolinium crystals for THz wave generation*. Adv. Optical Mater. 7, 1801495, 2019.
- S. I. KIM, W. T. KIM, J. H. SEOK, M. JAZBINSEK, W. YOON, I. C. YU, H. YUN, D. KIM, F. ROTERMUND, O. P. KWON, *Organic σ -Hole containing crystals with enhanced nonlinear optical response and efficient optical-to-THz frequency conversion*. Appl. Optical Mater. 8, 1901840, 2020.
- J. A. LEE, W. T. KIM, M. JAZBINSEK, D. KIM, S. H. LEE, I. C. YU, W. YOON, H. YUN, F. ROTERMUND, O. P. KWON, *X-Shaped Alignment of Chromophores: Potential Alternative for Efficient Organic Terahertz Generators*. Appl. Optical Mater. 8, 1901921, 2020.
- M. T. NEUKOM, A. SCHILLER, S. ZÜFLE, E. KNAPP, J. ÁVILA, D. PÉREZ-DEL-REY, C. DREESSEN, K. ZANONI, M. SESOLO, H. J. BOLINK, B. RUHSTALLER, *Consistent Device Simulation Model Describing Perovskite Solar Cells in Steady-State, Transient and Frequency Domain*. ACS Appl. Mater. Interfaces, 11, 26, 2019.
- M. NEUMANN, B. ABDALLAH, L. HOLZER, F. WILLOT, V. SCHMIDT, *Stochastic 3D modeling of three-phase microstructures for predicting transport properties: a case study*. Transport in Porous Media 128, 179, 2019. <https://doi.org/10.1007/s11242-019-01240-y>.
- A. K. POLOMSKA, S. T. PROULX, D. BRAMBILLA, D. FEHR, M. BONMARIN, S. BRÄNDLI, M. MEBOLDT, C. STEUER, T. VASILEVA, N. REINKE, J.-C. LEROUX, M. Detmar, *Minimally-invasive method for the point-of-care quantification of lymphatic vessel function*. JCI Insight 4, 126515, 2019.
- M. REGNAT, K. P. PERNSTICH, K.-H. KIM, J.-J. KIM, F. NÜESCH, B. RUHSTALLER, *Routes for Efficiency Enhancement in Fluorescent TADF Exciplex Host OLEDs Gained from an Electro-Optical Device Model*. Advanced Electronic Materials, 6, 1900804, 2019.
- M. REGNAT, K. P. PERNSTICH, B. RUHSTALLER, *Influence of the Bias-dependent Emission Zone on Exciton Quenching and OLED Efficiency*. Organic Electronics, 70, 219-226, 2019.
- M. H. SHIN, W. T. KIM, S. I. KIM, S. H. LEE, I. C. YU, M. JAZBINSEK, W. YOON, H. YUN, D. KIM, F. ROTERMUND, O. P. KWON, *Efficient gap-free broadband terahertz generators based on new organic quinolinium single crystals*. Adv. Optical Mater. 7, 1900953, 2019.

J. SOARES COSTA, M. PRESTAT, B. LESCOP, S. RIOUAL, B. TRIBOLLET, L. HOLZER, K. PÉLISSIER, D THIERRY, *Oxygen reduction investigation on sputtered ZnO layers with nano-granular structure*. ChemElectroChem, 6 (20) 5321-5330, 2019. <https://doi.org/10.1002/celc.201901298>.

P. STEIGER, D. BURNAT, M. HOSSEIN, A. MAI, L. HOLZER, J. VAN HERLE, O. KRÖCHER, A. HEEL, D. FERRI, *Sulfur poisoning recovery on a SOFC anode material through reversible segregation of nickel*. Chemistry of Materials, 31 (3), 748-758, 2019. <https://doi.org/10.1021/acs.chemmater.8b03669>.

L. STEINMETZ, P. TALADRIZ-BLANCO, C. GEERS, M. SPUCH-CALVAR, M. BONMARIN, S. BALOG, B. ROTHEN-RUTISHAUSER, A. PETRI-FINK. *Lock-in thermography to analyze plasmonic nanoparticle dispersions*. Particle & Particle Systems Characterization 36, 1900224, 2019.

R. VETTER, J. O. SCHUMACHER, *Experimental parameter uncertainty in proton exchange membrane fuel cell modeling - part II : sensitivity analysis and importance ranking*. Journal of Power Sources, 439, pp. 126529, 2019. Available from: <https://doi.org/10.21256/zhaw-17089>.

R. VETTER, J. O. SCHUMACHER, *Experimental parameter uncertainty in proton exchange membrane fuel cell modeling - part I : scatter in material parameterization*. Journal of Power Sources. 438, pp. 227018, 2019. Available from: <https://doi.org/10.21256/zhaw-18294>

R. VETTER, J. O. SCHUMACHER, *Free open reference implementation of a two-phase PEM fuel cell model*. Computer Physics Communications, 234, pp. 223-234, 2019. Available from: <https://doi.org/10.21256/zhaw-2728>

S. ZEDER, C. KIRSCH, U. AEBERHARD, B. BLÜLLE, S. JENATSCH, B. RUHSTALLER, *Coupled 3D master equation and 1D drift-diffusion approach for advanced OLED modeling*. J. Soc. Inf. Disp. 28 (5), pp. 440–449, 2020. DOI: 10.1002/jsid.903.

F. J. ZHAO, M. BONMARIN, Z. C. CHEN, M. LARSON, D. FAY, D. RUNNOE, J. HEIKENFELD, *Ultra-simple wearable local sweat volume monitoring patch based on swellable hydrogels*. Lab on a chip 20 (1), 168-174, 2020.

A.3 Buchkapitel

G. BOIGER, H. KHAWAJA, M. MOATAMED, *Introduction: Large, (non-)spherical particle modelling in the context of fluid filtration applications*. Multiphysics Modelling of Fluid-Particulate Systems, Elsevier Academic Press London, 2020.

G. BOIGER, H. KHAWAJA, M. MOATAMED, *Methodology: Large (non-)spherical particle modeling in the context of fluid filtration applications*. Multiphysics Modelling of Fluid-Particulate Systems, Elsevier Academic Press London, 2020.

G. BOIGER, H. KHAWAJA, M. MOATAMED, *Validation: Experimental and semi-analytical validation (in the context of Large (non-)spherical particle modelling for fluid filtration applications)*. Multiphysics Modelling of Fluid-Particulate Systems, Elsevier Academic Press London, 2020.

G. BOIGER, H. KHAWAJA, M. MOATAMED, *Application and results: Filter fibre engineering (in the context of Large (non-)spherical particle modelling for fluid filtration applications)*. Multiphysics Modelling of Fluid-Particulate Systems, Elsevier Academic Press London, 2020.

G. BOIGER, H. KHAWAJA, M. MOATAMED, *Conclusion and Vision (in the context of Large (non-)spherical particle modelling for fluid filtration applications)*. Multiphysics Modelling of Fluid-Particulate Systems, Elsevier Academic Press London, 2020.

A.4 Konferenzen und Workshops

U. AEBERHARD, S. ALTAZIN, L. STEPANOVA, A. STOUS, B. BLÜLLE, C. KIRSCH, E. KNAPP, B. RUHSTALLER, *Numerical optimization of organic and hybrid multijunction solar cells*. 2019 IEEE 46th Photovoltaic Specialists Conference (PVSC), 0105-0111, Phoenix, USA (2019).

T. BACH, U. PUC, V. MICHEL, C. MEDRANO, P. GUNTER, M. JAZBINSEK, *Terahertz time-domain spectroscopy up to 20 THz based on organic electro-optic crystals*. 44th International Conference on Infrared, Millimeter, and Terahertz Waves (IRMMW-THz). Paris, France, 01-06 September 2019.

T. BACH, U. PUC, V. MICHEL, M. JAZBINSEK, P. GÜNTER, C. MEDRANO, *Ultra-broadband terahertz time-domain spectroscopy in a compact system with DSTMS organic crystals*. SPIE Photonics West - Conference 11279 «Terahertz, RF, Millimeter, and Submillimeter-Wave Technology and Applications XIII», San Francisco, USA, 1-6 February 2020.

B. BLÜLLE, S. ALTAZIN, B. FROUIN, L. STEPANOVA, S. JENATSCH, B. RUHSTALLER, *Light conversion and scattering properties of QD films for display applications: Angle-resolved optical spectroscopy and numerical simulation*. SID Symposium Digest of Technical Papers 50, 407-410, San Jose, USA (2019).

G. BOIGER, 2019. *Invited talk on Modeling particle clouds in coating applications: The long road from qualitative modeling to fully validated industrial applicability*. Invited talk, AlGhurair University, Dubai, UAE, September 12th, 2019. <https://www.facebook.com/AguDubai/>; <https://agu.ac.ae>

G. BOIGER, V. BUFF, A. ZUBIAGA, A. FASSBIND, P. CAELS, 2019. *Investigating tar formation at low pressures in wood gasification systems, applying a novel thermo-chemical simulation model*. ICPS19. 5th International Conference on Polygeneration Strategies, Vienna, Austria, 18-20 November 2019.

G. BOIGER, 2019. *On the equivalence of a system dynamic method for modelling Multiphysics systems and the Tetrahedron-of-State-Concept within the Bond graph modelling approach*. Multiphysics 2019. 14th International Conference of Multiphysics, Dubai, UAE, 14-15 December 2019. International Society of Multiphysics. ISSN (online) 2409-1669.

G. BOIGER, V. LIENHARD, V. BUFF, B. SIYAHHAN, 2020. *On establishing and applying a system dynamic modeling method in the context of investigating tar formation within wood gasification systems*. Invited talk, NIC National Institute of Chemistry, Ljubljana, Slovenja, January 16th, 2020.

G. BOIGER, V. LIENHARD, V. BUFF, B. SIYAHHAN, 2020. *Development and Validation of a Eulerian-Lagrangian model to predict particle motion and deposition in electrostatic fields*. Invited talk, NIC National Institute of Chemistry, Ljubljana, Slovenja, January 16th, 2020.

G. BOIGER, 2020. *FEA/FV workshop 2020: Using OpenFoam in finite volume analysis*. Invited talk, AlGhurair University, Dubai, UAE, February 9th-13th, 2020. <https://agu.ac.ae/news-events/fea-workshop-2020/>; <https://agu.ac.ae>

D. BRAGA, S. JENATSCH, L. PENNINGCK, R. HIESTAND, M. DIETHELM, S. ALTAZIN, C. KIRSCH, B. RUHSTALLER, *Modeling Electrical and Optical Cross-Talk between Adjacent Pixels in Organic Light-Emitting Diode Displays*. SID Symposium Digest of Technical Papers 50, 31-34, San Jose, USA (2019).

D. BRUNNER, J. GOODBEARD, S. KUMAR, H. KHAWAJA, G. BOIGER, 2019. *Investigation of modal distortion and temporal effects in torsional resonators*. Multiphysics 2019. 14th International Conference of Multiphysics, Dubai, UAE, 14-15 December 2019. International Society of Multiphysics. ISSN (online) 2409-1669.

R. HERRENDÖRFER, J. O. SCHUMACHER, *Advanced characterization of polymer electrolyte fuel cells using a two-phase time-dependent model*. 16th symposium on modeling and experimental validation of electrochemical energy technologies (ModVal 2019), Braunschweig, Germany. Available from: <https://doi.org/10.21256/zhaw-2790>.

M. JAZBINSEK, U. PUC, M. ZGONIK, T. BACH, C. MEDRANO, O. P. KWON, *High-bandwidth terahertz-wave generation and detection in various organic electro-optic crystals*. PR'19 Photorefractive Photonics and Beyond, Gérardmer, France, 18-21 June 2019.

S. JENATSCH, S. ZÜFLE, P.-A. WILL, B. BLÜLLE, M. NEUKOM, D. BRAGA, S. LENK, S. REINEKE, B. RUHSTALLER, *Quantitative Analysis of Charge Transport in Single-Carrier Devices and OLEDs Combining DC and AC Data*. San Jose, USA (2019).

B. J. KANG, W. T. KIM, S. H. LEE, M. JAZBINSEK, O. P. KWON, F. ROTERMUND, *Recent progress on highly non-linear organic crystals for efficient broadband THz wave generation*. SPIE Photonics West - Conference 11264 «Nonlinear Frequency Generation and Conversion: Materials and Devices XIX», San Francisco, USA, 1-6 February 2020.

W. T. KIM, M. H. SHIN, S. I. KIM, S. H. LEE, I. C. YU, M. JAZBINSEK, W. YOON, H. YUN, D. KIM, O. P. KWON, F. ROTERMUND, *New design strategy of organic nonlinear crystals via suppression of phonon vibrational modes for gap-free broadband THz generation*. SPIE Photonics West - Conference 11264 «Nonlinear Frequency Generation and Conversion: Materials and Devices XIX», San Francisco, USA, 1-6 February 2020.

C. KIRSCH, –. AI for Engineering Summer School 2019, Toronto, Canada.

V. LIENHARD, M. BOLDRINI, G. BOIGER, 2020. *Simulation based investigation of an electrostatic method for deflecting charged particle clouds*. Invited talk, NIC National Institute of Chemistry, Ljubljana, Slovenia, January 16th, 2020.

S. MADSEN, A. ZUBIAGA, H. KHAWAJA, G. BOIGER, 2019. *CFD Modelling of Pollutant Transport from a Docked Marine Vessel* [Poster]. In: Proceedings of 14th Int. Conference of Multiphysics 2019, 14th International Conference of Multiphysics (Multiphysics 2019), Dubai, UAE, 14-15 December 2019. International Society of Multiphysics. ISSN (online) 2409-1669.

G. MOURUGA, C. SANSONE, F. ALLOIN, C. IOJOIU, J. O. SCHUMACHER, *A multicomponent diffusion model for organic redox flow battery membranes*. 16th symposium on modeling and experimental validation of electrochemical energy technologies (ModVal 2019), Braunschweig, Germany. Available from: <https://doi.org/10.21256/zhaw-2792>.

G. MOURUGA, C. SANSONE, F. ALLOIN, C. IOJOIU, J. O. SCHUMACHER, *A multicomponent diffusion model for organic redox flow battery membranes*. International Flow Battery Forum (IFBF 2019), Lyon, France.

K. P. PERNSTICH, *Game-based Learning für MINT-Fächer mit e-Exercises*. E-Learning Café, ZHAW Wädenswil, Schweiz, Mai 2019.

K. P. PERNSTICH, *Gamification der Physikübungen mit tguishiny/e-Exercise*. Digital Learning Day, ZHAW-IDP Retreat, Winterthur, Schweiz, Juni 2019.

K. P. PERNSTICH, *Eine App zur Gamification der Übungen in MINT-Fächern*. Bürgenstock-Konferenz der Schweizer Fachhochschulen und Pädagogischen Hochschulen, Luzern, Schweiz, 10. - 11. Januar 2020.

U. PUC, T. BACH, C. MEDRANO, M. ZGONIK, M. JAZBINSEK, *Compact and ultra-broadband terahertz spectrometer based on organic DSTMS crystals*. SPIE Photonics West - Conference 10917 «Terahertz, RF, Millimeter, and Submillimeter-Wave Technology and Applications XII», San Francisco, USA, 2-7 February 2019.

U. PUC, T. BACH, V. MICHEL, M. ZGONIK, C. MEDRANO, M. JAZBINSEK, *DSTMS-based ultrabroadband terahertz time-domain spectroscopy*. Conference on Lasers and Electro-Optics Europe & European Quantum Electronics Conference (CLEO/Europe-EQEC). Munich, Germany, 23-27 June 2019.

J. O. SCHUMACHER, R. VETTER, *Experimental parameter uncertainty in PEM fuel cell modeling*. 8th International Conference on Fundamentals and Development of Fuel Cells (2019), Nantes, France. doi: <https://digitalcollection.zhaw.ch/handle/11475/15710>.

J. WŁODARCZYK, B. CANTU, P. FISCHER, M. KÜTTINGER, J. O. SCHUMACHER, *An enhanced 1-D model of a hydrogen-bromine flow battery*. 16th symposium on modeling and experimental validation of electrochemical energy technologies (ModVal 2019), Braunschweig, Germany. Available from: <https://doi.org/10.21256/zhaw-2791>

J. WŁODARCZYK, M. KÜTTINGER, P. FISCHER, J. O. SCHUMACHER, *Open-circuit potential prediction and its applications in modeling and simulation of hydrogen-bromine redox flow batteries*. International Flow Battery Forum (IFBF 2019), Lyon, France.

A. ZUBIAGA, D. BRUNNER, F. SAGER, M. CLEMENS, E. KOEPF, G. BOIGER, 2019. *Evaluation of Faraday instabilities in small vessels*. 7th ESI OpenFoam Conference 2019, Berlin, Germany, 16-17 October 2019

A. ZUBIAGA, H. KHAWAJA, G. BOIGER, 2019. *Simulation of contamination by exhaust emissions from docked marine vessels*. Multiphysics 2019. 14th International Conference of Multiphysics, Dubai, UAE, 14-15 December 2019. International Society of Multiphysics. ISSN (online) 2409-1669.

A.5 Vorlesungen

T. BERGMANN, T. HOCKER, *Thermische Energiesysteme, FS19*, Bachelor of Science.

D. BERNHARDSGRÜTTER, *Lineare Algebra 1, HS19*, Bachelor of Science.

D. BERNHARDSGRÜTTER, *Analysis 1, HS19*, Bachelor of Science.

D. BERNHARDSGRÜTTER, *Lineare Algebra 2, FS20*, Bachelor of Science.

D. BERNHARDSGRÜTTER, *Analysis 2, FS20*, Bachelor of Science.

G. BOIGER, *Numerische Mathematik für IT 1, V+P, FS19*, Bachelor of Science.

G. BOIGER, *Numerische Mathematik für IT 1, V+P, FS20*, Bachelor of Science.

G. BOIGER, *Numerische Mathematik für IT 2, V+P, HS19*, Bachelor of Science.

G. BOIGER, *Fluid und Thermodynamik 1, V+P, FS19*, Bachelor of Science.

G. BOIGER, *Fluid und Thermodynamik 1, V+P, FS20*, Bachelor of Science.

G. BOIGER, *TSM Advanced Thermodynamics, V+P, HS19*, Master of Science in Engineering.

G. BOIGER, *TSM Two Phase Flow, V+P, FS19*, Master of Science in Engineering.

G. BOIGER, *TSM Two Phase Flow, V+P, FS20*, Master of Science in Engineering.

G. BOIGER, *EVA Thermofluidodynamik Modellentwicklung mittels OpenFoam® 1, V+P, HS19*, Master of Science in Engineering.

G. BOIGER, *EVA Thermofluidodynamik Modellentwicklung mittels OpenFoam® 2, V+P, FS19*, Master of Science in Engineering.

M. BONMARIN, *Physik I, HS19*, Bachelor of Science.

M. BONMARIN, *Physik II, FS20*, Bachelor of Science.

M. BONMARIN, *ATMT, FS20*, Bachelor of Science.

D. FEHR, *Mathematik: Analysis 2 für IT, FS19*, Bachelor of Science.

D. FEHR, *Analysis 1, HS19*, Bachelor of Science.

D. FEHR, *Analysis 2, FS20*, Bachelor of Science.

T. HOCKER, *Systemphysik für Aviatik 1 – Praktikum, HS19*, Bachelor of Science.

- T. HOCKER, *Systemphysik für Aviatik 2 – Plenum und Praktikum*, FS19, Bachelor of Science.
- T. HOCKER, *Fluid- und Thermodynamik 3 – Vorlesung*, HS19, Bachelor of Science.
- M. JAZBINSEK, *Physik für Energie und Umwelttechnik 1 – Vorlesung und Praktikum*, FS19, Bachelor of Science.
- M. JAZBINSEK, *Physik für Energie und Umwelttechnik 2 – Vorlesung und Praktikum*, HS19, Bachelor of Science.
- M. JAZBINSEK, *Physik 2 für MT und EU – Vorlesung und Praktikum*, FS20, Bachelor of Science.
- C. KIRSCH, *MANIT2 – Mathematik: Analysis 2*, FS19, Bachelor of Science.
- C. KIRSCH, *MAE3 – Mathematik: Analysis für Ingenieure 3*, HS19, Bachelor of Science.
- C. KIRSCH, *MND1 – Mathematik: Numerik und Differenzialgleichungen 1*, HS19, Bachelor of Science.
- C. KIRSCH, *MAE4 – Mathematik: Analysis für Ingenieure 4*, FS20, Bachelor of Science.
- C. KIRSCH, *MND2 – Mathematik: Numerik und Differenzialgleichungen 2*, FS20, Bachelor of Science.
- E. KNAPP, *Numerik für Energie- und Umwelttechnik*, HS19, Bachelor of Science.
- K. P. PERNSTICH, *Physik- und Systemwissenschaften für Verkehrssysteme 2*, FS19, Bachelor of Science.
- K. P. PERNSTICH, *Physik 1*, HS19, Bachelor of Science.
- K. P. PERNSTICH, *Physik 1 Praktikum*, HS19, Bachelor of Science.
- K. P. PERNSTICH, *Physik 2*, FS20, Bachelor of Science.
- K. P. PERNSTICH, *Physik 2 Praktikum*, FS20, Bachelor of Science.
- K. P. PERNSTICH, *Grundlagenprojekt 1*, HS19, Bachelor of Science.
- K. P. PERNSTICH, *Grundlagenprojekt 2*, FS20, Bachelor of Science.
- B. RUHSTALLER, *Physik- und Systemwissenschaften für Verkehrssysteme 2*, FS 2019, Bachelor of Science.
- J. O. SCHUMACHER, *Numerische Mathematik: NMIT1 und NMIT2*, FS19, HS19, FS20, Bachelor of Science.
- J. O. SCHUMACHER, *Numerical Simulation of Solar Cells*, FS19, FS20, Master Studiengang Solar Energy Engineering, Universität Freiburg im Breisgau.
- J. O. SCHUMACHER, *Multiphysics Modeling and Simulation*, HS19, Swiss course of studies: Master of Science in Engineering.

A.6 ICP-Mitarbeitende

Name	Funktion	Email
Andreas Bachmann	Wissenschaftlicher Mitarbeiter	bacr@zhaw.ch
David Bernhardsgrütter	Wissenschaftlicher Mitarbeiter	bens@zhaw.ch
Prof. Dr. Gernot Boiger	Dozent	boig@zhaw.ch
Marlon Boldrini	Wissenschaftlicher Mitarbeiter	bolm@zhaw.ch
Prof. Dr. Mathias Bonmarin	Dozent	bmam@zhaw.ch
Daniel Brunner	Wissenschaftlicher Assistent	brni@zhaw.ch
Vincent Buff	Wissenschaftlicher Assistent	buff@zhaw.ch
Alejandro Cabrera	Praktikant	cabr@zhaw.ch
Ennio Comi	Wissenschaftlicher Assistent	comi@zhaw.ch
Sandro Ehrat	Wissenschaftlicher Assistent	ehrd@zhaw.ch
Daniel Fehr	Wissenschaftlicher Mitarbeiter	fehd@zhaw.ch
Dr. Robert Herrendörfer	Wissenschaftlicher Mitarbeiter	herf@zhaw.ch
Prof. Dr. Thomas Hocker	Dozent	hoto@zhaw.ch
Dr. Lorenz Holzer	Wissenschaftlicher Mitarbeiter	holz@zhaw.ch
Marco Hostettler	Wissenschaftlicher Mitarbeiter	hose@zhaw.ch
Dr. Mojca Jazbinsek	Dozentin	jazb@zhaw.ch
Alec Jeffery	Praktikant	jeff@zhaw.ch
Dr. Lukas Keller	Wissenschaftlicher Mitarbeiter	kelu@zhaw.ch
David Kempf	Wissenschaftlicher Assistent	kemf@zhaw.ch
Dr. Christoph Kirsch	Dozent	kirs@zhaw.ch
Dr. Gabriela Kissling	Wissenschaftliche Mitarbeiterin	kisi@zhaw.ch
Dr. Evelyne Knapp	Wissenschaftliche Mitarbeiterin	hube@zhaw.ch
Viktor Lienhard	Wissenschaftlicher Mitarbeiter	lied@zhaw.ch
Philip Marmet	Wissenschaftlicher Assistent	mame@zhaw.ch
Alexandra Meier	Institutsassistentin	bral@zhaw.ch
Valery Metry	Wissenschaftliche Assistentin	metry@zhaw.ch
Gaël Mourouga	Wissenschaftlicher Assistent	mouo@zhaw.ch
Dr. Kurt Pernstich	Dozent	pern@zhaw.ch
Dr. Uros Puc	Wissenschaftlicher Mitarbeiter	pucu@zhaw.ch
Dr. Markus Regnat	Wissenschaftlicher Mitarbeiter	rega@zhaw.ch
Prof. Dr. Markus Roos	Lehrbeauftragter	roor@zhaw.ch
Prof. Dr. Beat Ruhstaller	Dozent	ruhb@zhaw.ch
Dr. Yasser Safa	Wissenschaftlicher Mitarbeiter	safa@zhaw.ch
Dr. Guido Sartoris	Wissenschaftlicher Mitarbeiter	srts@zhaw.ch
David Schaltegger	Wissenschaftlicher Assistent	sctg@zhaw.ch
Dr. Roman Schärer	Wissenschaftlicher Mitarbeiter	scsl@zhaw.ch
Andreas Schiller	Wissenschaftlicher Assistent	scdr@zhaw.ch
Dr. Matthias Schmid	Dozent	scmi@zhaw.ch
Prof. Dr. Jürgen Schumacher	Dozent	schm@zhaw.ch
Darren Sharman	Wissenschaftlicher Mitarbeiter	shaa@zhaw.ch
Bercan Siyahhan	Wissenschaftlicher Assistent	siya@zhaw.ch
Dr. Fabrizio Spano	Wissenschaftlicher Mitarbeiter	span@zhaw.ch
Sebastian Spirig	Wissenschaftlicher Mitarbeiter	spii@zhaw.ch
Dr. Wolfgang Tress	Dozent	trew@zhaw.ch
Stephan Weber	Wissenschaftlicher Assistent	weet@zhaw.ch
Prof. Dr. Andreas Witzig	Dozent, Institutsleiter	wita@zhaw.ch
Jakub Wlodarczyk	Wissenschaftlicher Assistent	wlod@zhaw.ch
Dr. Asier Zubiaga	Wissenschaftlicher Mitarbeiter	zuba@zhaw.ch
Dr. Simon Züfle	Wissenschaftlicher Mitarbeiter	zufe@zhaw.ch

A.7 Standort

ICP Institute of Computational Physics

Technikumstrasse 9
Postfach
CH-8401 Winterthur

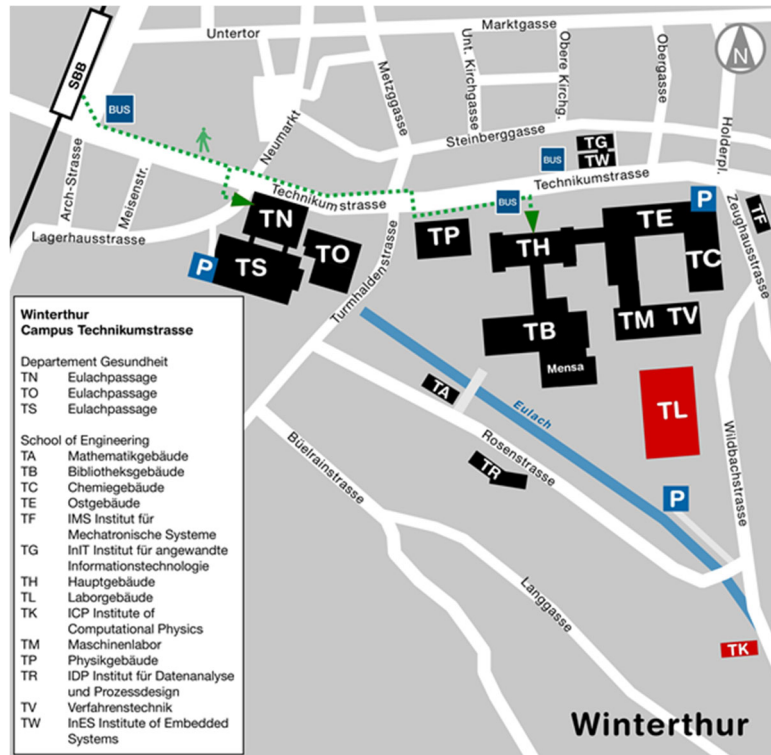
www.zhaw.ch/icp

Kontakt

Andreas Witzig
Fon +41 58 934 45 73
andreas.witzig@zhaw.ch

Administration

Alexandra Meier
Fon +41 58 934 76 82
alexandra.meier@zhaw.ch



TK-Gebäude



TL-Gebäude

Zürcher Hochschule
für Angewandte Wissenschaften

School of Engineering

ICP Institute of
Computational Physics

Technikumstrasse 9
Postfach
CH-8401 Winterthur

Telefon +41 58 934 71 71
info.engineering@zhaw.ch
www.zhaw.ch/icp