Zurich University of Applied Sciences

ZindSchool of
EngineeringICP Institute of
Computational Phys

Computational Physics

Research Report 2014



Contact shape optimization of a Coulometric generator cell with help of current streamlines.

Optimierung der Kontaktgeometrie einer Coulometer-Generatorzelle mit Hilfe von Stromlinien.

Contents

Preface 3		
Vorwor	t	4
1 Multi	physics Modeling and More	5
1.1	Modellierung von Menschenmassen mit hoher Dichte	6
1.2	pi-Vision	7
1.3	Optimierung von porösen Diaphragmen (Teil 1):	
	Modellgestützte Materialentwicklung	8
1.4	Optimization of porous Diaphragms (Part 2):	
	3D Microstructures	9
1.5	Entwicklung einer systemdynamischen Methode zur	
	Beschreibung von Holzvergasungsprozessen	10
1.6	Simulation des Nano-Dosierverhaltens von Flüssigkeiten	11
1.7	Active Thermography for Dermatological Applications	12
1.8	Highly Sensitive Thermal Characterisation of Responsive Nanoparticles	13
1.9	Verbesserte Kühlprozesse für die Schokolade-Produktion	14
1.10	Linking Microstructure to Effective Transport Properties: a Predictive Model	16
1.11	Effects of pore morphology and drainage on elastic properties of Opalinus Clay	17
1.12	Zeit sparen und Ausschuss reduzieren	18
1.13	Pulverlacke mikrometergenau applizieren	19
1.14	Enthalpy model of melt-crystals phase-changing kinetics	20
1.15	Coulometric system with generator cell	21
2 Fuel	Cells and Energy Systems	23
2.1	The development of a thermo-neutral fuel cell	24
2.2	Simulation von Wärmetransport in Brennstoffzellen	25
2.3	Reduzierung der Ohm'schen Verluste in neuer Generation von Hexis Brennstoffzellen	26
2.4	Thermisch-Fluidische Simulation eines SOFC-Moduls	28
2.5	Quantification of SOFC stack degradation and fuel distribution based on current	
	voltage data	29
2.6	Multi-phase modelling of a hydrogen generator	30
2.7	Microstructure effects in Ni-YSZ anodes: Optimizing performance and redox stability	31
2.8	Designing multifunctional materials for PEMFC	32

2.9	Transmission-Line-Modell zur Analyse von Impedanzspektren von Hochtemperatur-	
	Brennstoffzellen	33
3 Solar	Cells and Organic Electronics	34
3.1	F&E-Tools für die OLED Industrie	35
3.2	Charge transport in multilayer semiconductor devices	36
3.3	Light Scattering Measurements	37
3.4	Optoelectronic Modeling of Hematite Photoelectrodes	38
3.5	Dotierung von organischen Solarzellen	39
3.6	Numerical Simulation of Stacked OLEDs and Solar Cells	40
3.7	Verbesserte Farbstoffsolarzellen für Hausfassaden	41
3.8	Degradation Analysis of Organic Solar Cells	42
3.9	Modellbasierter Reglerentwurf für die Temperaturregelung eines Kryostaten	43
3.10	Berechnung des Lichtstreuverhaltens von rauen Schichten in OLEDs	44
3.11	Verstärkerschaltung für transiente Messung an Solarzellen	45
Append	lix	47
A.1	Student Projects	47
A.2	Scientific Publications	48
A.3	News Articles	49
A.4	Conferences and Workshops	49
A.5	Public Events	52
A.6	Patents	52
A.7	Prizes and Awards	53
A.8	Teaching	53
A.9	ICP-Team	55
A.10	Location	56

Preface

The art of maintaining one's creativity while being flooded with emails

My days as ICP head are counted. I associate it with many wonderful experiences for which I am very grateful. But now I am looking forward to be back soon immersed in my own research and teaching and spending time with my direct colleagues.

I want to use this editorial to share a few thoughts about a non-technical topic, i. e., the curse and blessing of efficiency and digital communication. It surely makes our daily work more predictable and reliable and we also benefit from it in our private lives. Nobody likes to wait on a train running behind schedule, without being at least adequately informed about the reasons for the delay. Without question, efficient processes and good communication are important. But if treated as foremost maxim, we risk losing our creativity and passion for our real tasks.

For example, I am unhappy if answering emails becomes the main employment of the day. This is different when I can devote myself to my duties as a lecturer and researcher: in preparing lectures or inspiring the students for our research. Or in developing computer models to make complex physical processes understandable – and of course exchanging thoughts and ideas with other researchers and partners from industry. To me, the work of engineers and scientists is as creative as the work of an artist or craftsman. This requires freedom. How can we help to create such an inspiring environment ? The responsible use of our time is crucial. But this is only possible if we show understanding for each other's work and give each other confidence. Each person has his own rhythm of work. It may seem efficient when research partners exchange as many results in the shortest possible. But often only brainstorming in a small group brings up really new ideas. Passion and creativity needs freedom – spiritually and temporally. I'm not alone with this perception. See, for example, the articles of the business magazine *brandeins* dealing with the importance of passion, creativity and confidence in our professional lives [1].

I encourage you to shape your own professional life actively to unfold your talents and needs. Think also of little things. A chat during a coffee or lunch break might lead to better solutions than pages of emails.

Thomas Hocker, head ICP

[1] Articles in business magazine *brandeins* about the importance of passion, creativity and confidence in our professional lives (in German):

- www.brandeins.de/archiv/2003/wachstum/leidenschaft
- www.brandeins.de/archiv/2007/ideenwirtschaft/wer-hat-angst-vor-kreativen
- www.brandeins.de/archiv/2008/liebe
- www.brandeins.de/archiv/2014/vertrauen

Vorwort

Die Kunst, trotz Emailflut kreativ zu sein

Meine Tage als ICP-Leiter sind gezählt. Ich verbinde damit viele schöne Erlebnisse, für die ich sehr dankbar bin. Doch nun freue ich mich darauf, bald wieder voll in die eigene Forschung und Lehre einzutauchen und Zeit mit meinen direkten Kolleginnen und Kollegen zu verbringen. Ich möchte das Editorial des ICP-Forschungsberichts 2014 dazu nutzen, ein paar Gedanken zu Fluch und Segen von Effizienz und digitaler Kommunikation zu teilen. Unser Berufsalltag wird dadurch planbarer und zuverlässiger und wir profitieren auch im Privaten davon. Niemand wartet gerne im Zug, der längst losfahren sollte, ohne zumindest angemessen über die Verspätung informiert zu werden. Die Bedeutung effizienter Prozesse und guter Kommunikation steht also ausser Frage. Erheben wir sie jedoch zur obersten Maxime, laufen wir Gefahr, unsere Kreativität und Leidenschaft dabei zu verlieren.

Wenn beispielsweise die digitale Kommunikation zur Hauptbeschäftigung des Tages wird, werde ich unzufrieden. Ganz anders ist das, wenn ich mich meinen Aufgaben als Dozent und Forscher widmen kann: dem Vorbereiten von Vorlesungen, die Studenten zum Nachdenken anregen und für unser Metier begeistern. Oder dem Entwickeln von Computermodellen, um komplexe physikalische Prozesse verständlicher zu machen – und natürlich dem Austausch mit anderen Forschenden und Kooperationspartnern aus der Industrie. Die Arbeit von Ingenieuren und Naturwissenschaftlern ist für mich ebenso kreativ wie die Arbeit eines Künstlers oder Handwerkers. Dazu braucht es Freiräume. Wie können wir dazu beitragen, solch ein inspirierendes Umfeld zu schaffen ?

Der verantwortungsvolle Umgang mit unserer Zeit steht für mich dabei ganz oben. Dies ist aber nur möglich, wenn wir Verständnis für die Arbeit des anderen aufbringen und ihm Vertrauen schenken. Jeder Mensch hat seinen eigenen Arbeitsrhythmus und benötigt andere Freiräume, um sich voll zu entfalten. Es mag effizient erscheinen, wenn Forschungspartner in möglichst kurzer Zeit möglichst viele Forschungsergebnisse austauschen. Doch erst im kleinen Kreis beim Brainstorming entstehen oft wirklich neue Ideen. Leidenschaft und Kreativität braucht Freiräume – geistig und zeitlich. Dass ich mit dieser Wahrnehmung nicht alleine bin, veranschaulichen Artikel des Wirtschaftsmagazins *brandeins*, die sich mit der Bedeutung von Leidenschaft, Kreativität und Vertrauen im Berufsalltag beschäftigen [1].

Ich möchte Sie dazu ermutigen, Ihren eigenen Berufsalltag aktiv mitzugestalten, um sich entsprechend Ihrer Talente und Bedürfnisse zu entfalten. Denken Sie dabei auch an die kleinen Dinge. Ein persönliches Gespräch in der Kaffee- oder Mittagspause klärt offene Fragen vielleicht schneller als seitenlange Emails.

Thomas Hocker, Institutsleiter ICP

[1] Wirtschaftsmagazin *brandeins* zu den Themen Leidenschaft, Kreativität und Vertrauen im Berufsalltag:

- www.brandeins.de/archiv/2003/wachstum/leidenschaft
- www.brandeins.de/archiv/2007/ideenwirtschaft/wer-hat-angst-vor-kreativen
- www.brandeins.de/archiv/2008/liebe
- www.brandeins.de/archiv/2014/vertrauen

1 Multiphysics Modeling and More

The enduring miniaturization of technical devices and processes often requires the development of multifunctional components where a multitude of coupled phenomena take place. Examples include integrated multifunctional environmental sensors and multifunctional materials such as fuel cell electrodes. Due to their inherent complexity, detailed physical-chemical models combined with robust numerical solution methods is almost a necessity for the design and optimization of such devices. Multiphysics modeling is a powerful tool for exploring a wide range of phenomena and the past decades have been a period of rapid progress in this area. In fact, a *Google* search of this neologism returns more than 600'000 results. The possible range of applications has been widely expanded and numerical methods have become increasingly sophisticated and adapted to exploit available computational resources.

At ICP we perform research and co-develop the finite element (FE) software NM-SESES for multiphysics modeling tailored to the needs of our partners. Our extensive experience in numerical analysis, modeling and simulation covers nearly all types of micro-macro devices and a wide range of governing equations of classical physics. We also develop single-purpose numerical tools specifically tailored to the needs of our partners or use commercial software if better suited.



1.1 Modellierung von Menschenmassen mit hoher Dichte

Gefahren bei Großveranstaltungen sollen künftig durch verbesserte Simulationen früh erkannt werden. Ein Interesse, dass Jedermann im öffentlichen Raum, insbesondere die Verantwortlichen wie Polizei, Veranstalter und Raumplaner haben. Zusammen mit der Zürcher ASE GmbH entwickelt das ICP präzise Modellrechnungen für Menschenströme.

R. Axthelm
ASE GmbH
KTI
2013–2015

Chaos beim Crowd-Management (TAZ), Tödliche Massenpanik in Schanghai (ka-news), Als ein Fußballstadion zur Todesfalle wurde (Die Welt) Solche und ähnliche Schlagzeilen erfahren wir fast täglich aus den Nachrichten. Und selbst kennt jeder das unbehagliche Gefühl, wenn man dichtgedrängt vor der Konzerttribüne steht (s. Abb. 1) oder in einer Großstadt-U-Bahn in der rush-hour unterwegs ist und kaum Platz zum Atmen hat.



Abb. 1: Dicht gedrängtes Warten auf die Band, Quelle: privat.

Dies motivierte uns, zusammen mit der Firma ASE GmbH, eine entsprechende Simulationssoftware zu entwickeln. Die Software basiert auf einem neuen Modellansatz altbekannter Gleichungen, die dann aber noch für die speziell anvisierten Anwendungsfelder erweitert und angepasst wurden. Physikalisch fordern wir Masseerhaltung der Menschenmenge und das Streben eines jeden, den Raum unter Vermeidung hoher Dichten schnellstmöglichst zum nächstgelegenen Ausgang zu verlassen. Zusammenfassend lässt sich die Situation durch die Kontinuitäts- und Eikonal-Gleichung beschreiben:

$$\varrho_t - \nabla \cdot \left(\varrho f(\varrho) \frac{\nabla \Phi}{|\nabla \Phi|} \right) = 0, \ |\nabla \Phi| = \frac{1}{f(\varrho)}$$

Bis Mitte 2014 wurde in einem ersten Ansatz das Modell auf eine Raumdimension reduziert. Damit ließen sich bereits erste Rechnungen für schmale Bahnsteige, auf denen Passanten eine gemeinsame Richtung haben, durchführen. Die numerischen Ergebnisse wurden durch reale Situationen auf Bahnsteigen verglichen. Diese Validierungen zeigten bereits sehr gute und vielversprechende Ergebnisse.

Anschließend erweiterten wir das Modell und die zugehörige Software auf zwei Raumdimensionen. Die Validierung der neuen Algorithmen ist noch nicht abgeschlossen aber es können bereits erste qualitative Eindrücke bewertet werden. So zeigt Abb. 2 beispielhaft die Bewegungsrichtungen der Festteilnehmer, wenn sie den Münsterhof in Zürich am Ende der Veranstaltung verlassen wollen. Die Berücksichtigung von Hindernissen, wie es bei diesem Beispiel erforderlich ist, ist von besonderer Relevanz, da jedes nichtkonvexe Gebiet durch seine spezielle Form Hindernisse enthalten kann auch wenn keine Hindernisse explizit platziert wurden. Beim aktuellen Stand können wir schon von gualitativ guten Ergebnissen und, vom Eindruck her, von realitätsnahen Abbildungen sprechen.



Abb. 2: Evakuierungsszene auf dem Münsterhof in Zürich.

Im kommenden Jahr wird das Modell auf mehrere, aneinander angelegte Räume erweitert werden. Damit können dann Fußgängersimulationen in Räumlichkeiten auf mehreren Etagen, die beispielsweise mit Treppenaufgängen verbunden sind, durchgeführt werden.

1.2 pi-Vision

Die Kombination aus Mikrocomputern und effizienter Bildverarbeitung ist ein spannendes und rasant wachsendes Querschnittsthema, das nahezu unerschöpfliches Potential in Industrie und Hochschule besitzt. Im Projekt soll die Expertise des ICP, in Zusammenarbeit mit anderen Instituten und Zentren an der ZHAW, im Bereich Bildverarbeitung ausgebaut und vernetzt werden.

Contributors:	R. Axthelm
Partners:	IAMP, IDP, IMS, InIT, ZSN
Funding:	Sonderfinanzierung
Duration:	2014

Guten Tag. Ich kenne Sie nicht, aber Sie sehen aus wie Brad Pitt, könnte Ihre Begrüßung des fertiggestellten Demonstrators des π Vision Projekts sein.



Abb. 1: Raspberry Pi, Qielle: privat.

Im Rahmen dieses Projektes wurde ein mobiles System zur rechnergestützten Gesichtserkennung entwickelt. Das System beinhaltet eine Kamera und wird über einen Raspberry Pi (Abb. 1), einen vollwertigen Mikrocomputer von der Größe einer Kreditkarte, gesteuert. Es ist in der Lage, sowohl Standbilder als auch Videos aufzunehmen und die Gesichter der aufgenommenen Personen zu identifizieren. Im Projekt wurde untersucht wie sich verschiedene Algorithmen zur Bilderkennung auf solchen eher leistungsschwachen Architekturen einsetzen lassen. Die Entwicklung des Kamerasystems mit Gesichtserkennung diente dabei primär als proof-of-principle und illustriert den Kompetenzaufbau und die interne Vernetzung von SoE-Expertinnen und Experten. Im Bereich der Bildverarbeitung zielte π Vision einerseits darauf ab. bestehende Algorithmen hinsichtlich Rechenaufwand, Zuverlässigkeit und Genauigkeit zu untersuchen. Daneben war das Beschreiten neuer Wege, etwa die Entwicklung und Bewertung neuer Algorithmen zur Bilderkennung und Bildanalvse, oder deren effiziente Implementierung auf Mikrocomputern, ein wesentliches Projektziel. Das im Projekt gemeinsam neu generierte Wissen über Bildverarbeitung fließt dabei direkt in aktuelle Forschungsprojekte - beispielsweise im Gebiet Medizintechnik – der beteiligten Institute und Zentren ein. So kann es als Basis für neue Innovationen und interdisziplinäre Projekte dienen. Im Verlaufe des Projektes ist es gelungen, durch Untersuchung verschiedener Methoden zur Bilderfassung und Gesichtserkennung, Algorithmen zu entwickeln, die nicht nur deutlich schneller, sondern auch erheblich genauer arbeiten als die Standardmethoden, die in frei verfügbaren Softwarepaketen wie etwa OpenCV implementiert sind. Dazu gehören nicht nur traditionelle Ansätze wie beispielsweise Eigenfaces, sondern auch Local Binary Pattern histograms in Kombination mit Support Vector Machines, oder hochmoderne Deep Learning Algorithmen, die auf neuronalen Netzen basieren und in aller Regel eine sehr hohe Rechenleistung benötigen. Im Dezember 2014 wurde ein Prototyp in Betrieb genommen, der in der Lage ist, die Mitglieder des Projektteams mit einer Trefferquote von mehr als 95% zu identifizieren. Das Erlernen der Gesichter im Trainingsset (Abb. 2) wurde auf einem rechenstarken PC durchgeführt, die Gesichtserkennung selbst findet auf dem Raspberry Pi statt.



Abb. 2: Training- (oben) und Testsets (unten), Quelle: Projektteam.

Ein Demonstrationsvideo, das die wichtigsten Resultate, einschliesslich einer Echtzeit-Demonstration, zusammenfasst ist online verfügbar unter http://youtu.be/ol1eJa-UWNU.

Literatur:

[1] O. Dürr, R. Axthelm, M. Loeser et al., *Deep Learning Algorithms for Efficient Face Recognition on a Raspberry Pi*, Eurographics Conference, 2015, submitted.

Zürcher Fachhochschule

1.3 Optimierung von porösen Diaphragmen (Teil 1): Modellgestützte Materialentwicklung

Für eine pH-Messelektrode soll ein leistungsoptimiertes, keramisches Diaphragma entwickelt werden. Um die Zusammenhänge der physikalischen Einflüsse auf die Diaphragmaleistung besser zu verstehen und somit gezielt bestimmte Eigenschaften des Materials optimieren zu können, wird die vom IMPE durchgeführte Materialentwicklung durch Modellrechnungen von der Seite des ICP unterstützt.

Contributors:	G. Boiger, T. Ott
Partners:	Mettler-Toledo AG, IMPE
Funding:	KTI
Duration:	2014–2015

Bei der pH-Messung mithilfe von elektrochemischen Sensoren, den sogenannten pH-Messelektroden (s. Abb. 1), kann es in den Bereichen mit sehr grossen oder sehr niedrigen pH-Werten zu markanten Messfehlern kommen.



Abb. 1: schematischer Aufbau einer Referenzelektrode und deren Diaphragma.

Von folgenden Eigenschaften ist bekannt, dass sie erheblichen Einfluss auf die Performance des Diaphragmas haben: elektrische Leitfähigkeit sowie Ausflussgeschwindigkeit und –rate des Elektrolyten. Um die Messfehler zu verringern, muss einerseits der elektrische Widerstand des Diaphragmas verringert, bzw. andererseits die Ausflussgeschwindigkeit des Elektrolyten erhöht werden. Da es sich bei der Messelektrode um ein wartungsfreies Modell handelt, beschränkt die Ausflussrate des Elektrolyten die Lebensdauer der Elektrode. Doch muss mit einer hohen Ausflussgeschwindigkeit das Eintreten von Fremd-Ionen in die Elektrode verhindert werden, da ein solches die Zerstörung der Elektrode zur Folge hätte. Die relevanten Phänomene, nämlich Diaphragmaströmung und Leitfähigkeit wurden in einem semianalytischen Modell beschrieben. Somit können die Einflüsse der einzelnen Parameter auf die Optimierungskriterien untersucht werden.



Abb. 2: Abhängigkeitsdiagramm der physikalischen Eigenschaften und Optimierungskriterien.

In Abb. 2 sind die Proportionalitäten zwischen Prozess- und Materialparametern einerseits sowie der Optimierungskriterien andererseits dargestellt. Entlang der positiven Pfeilrichtung findet durch die jeweiligen Variablen, eine Verschiebung der Eigenschaften des Gesamtsystems vom Ausgangskriterium zum Zielkriterium statt. Das neue Modell wird in Zukunft entscheidend dazu beitragen, die Materialentwicklung gezielt in Richtung gewünschter Optimierungskriterien zu leiten und Vorschläge hinsichtlich optimierter Strukturen zu formulieren.

1.4 Optimization of porous Diaphragms (Part 2): 3D Microstructures

The aim of this study is to optimize effective transport properties i.e. conductivity, diffusivity and permeability of porous Diaphragms for pH-sensors. These properties strongly depend on the pore structure. In our research we investigate quantitative relationships between pore topology (percolating pore volume fraction ϵ , tortuosity τ and constrictivity β) with effective transport properties. In collaboration with our experimental research partners in industry and university, we use these relationships to establish new approaches for knowledge based materials optimization.

Contributors:	L. Holzer, O. Pecho, O. Stenzel
Partners:	Mettler-Toledo AG, IMPE, ScopEM-ETHZ
Funding:	CTI
Duration:	2014–2015

Porous YSZ diaphragms are produced by our partner institute (IMPE) using powder processing, extrusion and sintering. The microstructures can be influenced in many ways: e.g. by varying the sinter-temperatures and -times, by using ceramic powders with different grain sizes, or by adding variable amounts of pore formers with different sizes and shapes. In order to control the final transport properties it is also crucial to understand, how the mentioned processing parameters correlate with the relevant microstructure parameters. For this purpose we investigate the materials with focused ion beam (FIB) tomography, 3D image analysis and transport simulations.



Fig. 1: 3D Pore structure of extruded YSZ, sintered at 1250, 1300 and 1350 $^\circ\text{C}.$

Fig. 1 illustrates the 3D-pore structures for a series of samples. Increasing the sintering temperature from 1250 °C to 1350 °C leads to significant variations in the pore structures and has a crucial impact on the corresponding transport properties. The effective conductivity decreases drastically from $1.1 \, \text{Sm}^{-1}$ at 1250 °C to less than

0.006 S m⁻¹ at 1350 °C. This drop in conductivity can be attributed to decreasing bottleneck dimensions β , loss of connectivity ϵ and increasing length of transport pathways τ , see Fig. 2. Materials with suitable effective properties (high enough conductivity and low enough permeability) are obtained at 1300 °C.



Fig. 2: Pore topology (ϵ , β , τ) in extruded YSZ, as a function of sinter-temp. (1250, 1300, 1350 °C), and the corresponding effective conductivities.

The current investigations focus on the influences of sinter-time $(1-5h \text{ at } 1300 \degree \text{C})$ and of pore formers (volume and shape). With these parameters the effective properties can be fine-tuned in a controlled way.

Literature:

[1] G. Gaiselmann et al., AIChE J., 60, 2014.

[2] L. Holzer et al., J. Mat. Science, 48, 2013.

1.5 Entwicklung einer systemdynamischen Methode zur Beschreibung von Holzvergasungsprozessen

Der Schlüssel zum Verständnis der Holzvergasung liegt in thermochemischen Reaktionen, deren Gleichgewichten, sowie den beteiligten, molekularen Spezies. Das ICP entwickelt ein neues Modell das anschauliche Methoden der Systemdynamik zur Untersuchung dieser hochdynamischen Vergasungsvorgänge nutzbar macht.

Contributors:	G. Boiger
Partners:	
Funding:	ICP
Duration:	2014

Wer einen derart instabilen Prozess, wie jenen der Vergasung von Holzabfällen grosstechnisch nutzen will, muss diesen auch durchdringend verstehen. Leider existiert noch keine Messtechnologie, die es erlaubt lokale Temperaturen, Gaszusammensetzungen oder Reaktionsgeschwindigkeiten im Inneren eines thermochemischen Reaktors belastbar zu verfolgen. Hier kommt das ICP ins Spiel. Wir haben eine Modellierungsmethode entwickelt, die der Thermochemie der Holzvergasung auf anschauliche Art und Weise auf den Grund geht.



Abb. 1: Ausschnitt aus dem Systemdynamischen Holzvergasungsmodell. Stoffbilanzen.

Im Zuge des vergangenen Jahres ist es uns gelungen systemdynamische Methoden derart einzusetzen, dass ein hochtransienter Simulator des komplexen, reagierenden Systems der wichtigsten Holzgaskomponenten (CO2, CO, CH4, H2O, H2 und O2) entwickelt werden konnte. Abb. 1 zeigt einen Ausschnitt des Modelles. Dabei wird deutlich, dass die wichtigsten Elemente der Software grafisch dargestellt werden können. Dies ermöglicht u.A. ein besseres Erkennen der wesentlichen Zusammenhänge. Durch gezielte Vergleiche zwischen einem traditionellen Lagrange Multiplier Modell und dem neuen Systemdynamikmodell ist es uns bereits gelungen beide Löser wechselseitig zu verifizieren.



Abb. 2: Gaszusammensetzung des Holzgasgemisches (T=800 K, O/C Verhältnis: 1.5, H/C Verhältnis: 2.88) und mittlere freie molare Gibbs Energie gegen Reaktionszeit.

Das Systemdynamikmodell erlaubt es nun, sowohl die jeweiligen Gleichgewichtszustände, als auch den dynamischen Verlauf der lokalen Gaszusammensetzungen auf dem Weg zu diesen Gleichgewichten zu simulieren (s. Abb. 2). Dies ermöglicht letztlich auch die Kopplung rein thermo-dynamischer Aspekte mit transport- oder reaktions-kinetischen Gesichtspunkten des Prozesses. Dadurch kann ein vielseitigeres und realitätsnäheres Abbild vom Inneren einer reagierenden Holzschüttung gewonnen werden, als dies bisher möglich war. Ein weiterer Schritt zum Verständnis der Holzvergasung ist uns somit gelungen.

Literatur:

[1] G. Boiger, *A thermo fluid dynamic model of wood particle gasification and combustion processes*, The International Journal of Multiphysics, Vol. 8, No. 2, 203–230, 2014.

1.6 Simulation des Nano-Dosierverhaltens von Flüssigkeiten

In der Pharmaindustrie ist es häufig notwendig, Wirkstoffe im Nanoliterbereich zu dosieren. Da sich das Studium des Dosierverhaltens solch geringer Mengen experimentell extrem schwierig gestaltet, wird ein Modell erstellt, welches den Dosiervorgang nachbildet. Dadurch soll eine Vorhersage der Dosiermenge und des Ausströmverhaltens in Abhängigkeit der Fluideigenschaften und des Vordrucks möglich werden.

Contributors:M. Boldrini, S. Zangerl, G. BoigerPartners:NovartisFunding:ICPDuration:2013–2014

Bei der Dosierung von pharmazeutischen Fluiden kommen piezo-elektrisch betriebene Mikroventile zum Einsatz. Neben der Öffnungszeit und dem Ventilhub ist die Dosiermenge von verschiedenen Faktoren abhängig. Dazu gehören der Vordruck, der Ventildurchmesser, Oberflächeneffekte und reine Fluideigenschaften wie Dichte, Viskosität sowie Parameter zur Beschreibung eines komplexeren nicht-newtonschen Fliessverhaltens. Durch all diese Faktoren ist es bis anhin nur schwer möglich jeweils vorab abzuschätzen, wie sich ein neues Fluid in der bekannten Anlage verhalten wird. Da sich entsprechende Justierungsversuche jedoch als aufwendig und kostenintensiv darstellen, entwickelt das ICP nun ein Modell, welches Aufschluss über das Verhalten beliebiger Fluide liefern soll. Somit soll künftiger Experimentalaufwand minimiert werden.



Abb. 1: Dreidimensionale Geometrie.

Für die Entwicklung des Modells hat man sich dafür entschieden von einem zweiphasigen, turbulenten, inkompressiblen Strömungsszenario auszugehen, welches sowohl stationär als auf transient zu betrachten ist. Anhand der, in OpenFoam durchgeführten, numerischen Simulationen sollen sowohl die quantitative Dosiermenge als auch das qualitative Ausströmverhalten des Mediums untersucht werden.

Zu Beginn wurde mit einem zweidimensionalen geometrischen Modell gearbeitet, welches sich lediglich für eine grobe Abschätzung der entscheidenden Effekte eignete. Die Entwicklung eines komplexeren, dreidimensionalen Modells (s. Abb. 1) wurde aber bald notwendig.

Über verschiedene Entwicklungsschritte wurde zuletzt eine dreidimensionale Nachbildung der Geometrie erstellt, welche durch den gezielten Einsatz angepasster Wandfunktionen des sst-k-omega Turbulenzmodelles eine drastische Verringerung der Abweichung zwischen Simulationsergebnissen und Experimenten erzielen konnte (siehe Fig 2).



Abb. 2: Ausströmgeschwindigkeit in gegen Vordruck. Beispiel: Wasser. Vergleich 2D Modell (schwarz), 3D Modell (blau), Experiment (rot).

In weiteren Schritten wird der Einfluss von Wandreibungseffekten genauer studiert, um die Vorhersagegenauigkeit der Simulationen weiter verbessern zu können.

1.7 Active Thermography for Dermatological Applications

In collaboration with Dermolockin GmbH, we are trying to develop a new thermographybased system for the detection of skin cancer.

Contributors:M. Bonmarin, R. Ritzmann, B. SchmidPartners:ZPP, Dermolockin GmbHFunding:Gebert Rüf FoundationDuration:2014–2015

Dermolockin GmbH has recently developed a first prototype based on active thermography to detect skin cancer. The aim of the device is to image with high accuracy, the margins and the penetration depth of non-melanoma skin lesions. The first version of the diagnostic tool suffered from several limitations, see Fig. 1. Thanks to the support of the Gebert Rüf Foundation, a second version of the device with improved capabilities is under construction. In this new prototype, particular attention has been paid to the device usability so as to the respect of current medical device regulations.





Fig. 1: Picture of the current Dermolockin prototype.

Fig. 2: Sketch of the new device head (ZPP).



Fig. 3: Sketch of the new cooling unit (ZPP).

1.8 Highly Sensitive Thermal Characterisation of Responsive Nanoparticles

We developed an innovative imaging setup for the thermal characterisation of responsive nanoparticles.

M. Bonmarin
Adolphe Merkle Institute - UniFr, Dermolockin GmbH
UniFr, ZHAW
2014–2015

Stimuli-responsive particles such as superparamagnetic nanoparticles or gold nanorods have huge potential in nanomedicine. They are used to kill cancerous cells or to stimulate drug release from containers. Although some applications have found their way into clinics, a lot are still in the research phase. As a result, many public and private laboratories worldwide are working to develop these novel nanoparticles, whose most important feature is their ability to generate heat.

Together with the Adolphe Merkle Institute (AMI), the ICP has recently developed an innovative technology for the thermal screening of potential medical nanoparticles. Thanks to outstanding imaging capabilities, the device allows to quickly and accurately investigate the heat generated by multiple nanoparticle samples, drastically reducing the measurement time.



Fig. 1: TEM image of magnetic nanoparticles.



Fig. 2: Schematic description of the setup developed at ICP for the thermal characterisation of thermal responsive particles.

1.9 Verbesserte Kühlprozesse für die Schokolade-Produktion

Die Schweizer Industrie stellt jährlich etwa 175'000 Tonnen Schokoladeprodukte her. Durch optimierte Kühlprozesse liesse sich deren Qualität weiter steigern und dabei noch Energie einsparen. Zusammen mit seinen Forschungspartnern fokusierte sich das ICP im zweiten Projektjahr auf die Entwicklung und Anwendung von Methoden zur detaillierten Charakterisierung der während der Erstarrung von Schokolade auftretenden Wärmeabfuhrmechanismen.

Contributors:T. Hocker, P. FahrniPartners:IDP-ZHAW, ZSN-ZHAW, IFNH-ETHZ, Max Felchlin AGFunding:KTIDuration:2013–2015

Die Wärmeabfuhr während der Verfestigung von flüssigen Schokoladeprodukten ist komplex. Sie wird durch die Lufttemperatur und Strömungsverhältnisse im Kühlkanal, aber auch durch die Geometrie und die thermischen Eigenschaften der verwendeten Giessformen beeinflusst. Zur Ermittlung des Einflusses verschiedener Giessform- und Kühlkanalparameter auf den Abkühlprozess wurde ein Ansatz gewählt, der "Modellexperimente" mit thermischen Computersimulationen kombiniert. Als Modellsubstanz wurde Gallium gewählt, das bei ähnlichen Temperaturen wie Schokolade erstarrt. Gallium neigt zwar zu einer starken Unterkühlung (engl. supercooling), kristallisiert aber im Gegensatz zu Schokolade bei einer fixen Temperatur von 30 °C – unabhängig von der verwendeten Abkühlrate [1]. Schokolade bzw. die darin enthaltene Kakaobutter zeigt hingegen ein viel komplexeres Kristallisationsverhalten, das zu bis zu fünf verschiedenen Kristallformen führt, deren Bildung stark von der verwendeten Abkühlrate abhängt.

Abbildung 1 zeigt typische Temperaturverteilungen und Wärmeflüsse, wie sie das am ICP entwickelte *SESES* FE-Modell während des Abkühlprozesses von Gallium vorhersagt.



Abb. 1: SESES Modellvorhersagen der Temperaturen und Wärmeflüsse während der Erstarrung von Gallium.

Der entsprechende Vergleich mit Temperaturmessungen im ETH-Kühlkanal ist in Abbildung 2 dargestellt. Das FE-Modell verwendet als Input den zeitabhängigen Verlauf der Lufttemperatur sowie den Wärmeübergangskoeffizienten $\alpha (W/(m^2 K))$ an der Oberseite der Giessform. Aus den Messungen war jedoch nicht bekannt, mit welcher Rate auch Wärme von der Unterseite der Giessform abfliesst. Durch fitten des entsprechenden Wärmeübergangskoeffizienten an die gemessene Giessformtemperatur konnte gezeigt werden, dass über die Unterseite der Giessform etwa gleich viel Wärme wie über die Oberseite abfliesst. So konnte die Erstarrung von Gallium (bis auf das Unterkühlen) genau reproduziert werden.



Abb. 2: Gemessene und simulierte Temperaturverläufe während der Abkühlung von Gallium im ETH-Kühlkanal.



Abb. 3: Simulierte Wärmeströme während der Abkühlung von Gallium im ETH-Kühlkanal.

Das mithilfe der Temperaturmessungen kalibrierte FE-Modell wurde anschliessend verwendet, um die zeitlich veränderlichen Wärmeströme zwischen Probe und Form bzw. Probe und Luf vorherzusagen. Die entsprechenden Ergebnisse sind in Abbildung 3 dargestellt. Sie zeigen, dass die Wärmeabfuhr vom Gallium direkt an die Luft in Kühlphasen 1–3 praktisch konstant ist. Hingegen fliesst in Kühlphase 1 noch keine Wärme vom Gallium an die Giessform. Dies liegt daran, dass die Giessform zunächst von der Luft abgekühlt werden muss, bevor sie thermische Energie vom Gallium aufnehmen kann. In Kühlphasen 2 und 3 übersteigt jedoch die Wärmeabfuhr über die Giessform diejenige über die Luft. Dies liegt daran, dass die Oberfläche zwischen Probe und Form grösser ist

als zwischen Probe und Luft.

Im letzten Projektjahr wird der Fokus am ICP auf der Entwicklung eines orts- und zeitaufgelösten Kristallisationsmodells liegen. Mit dessen Hilfe lässt sich die Bildung verschiedener Kristallstrukturen während des Abkühlprozesses von Schokolade unter Produktionsbedingungen vorhersagen.

Literatur:

[1] Y. Miyazawa, G. M. Pound, *Homogeneous nucleation of crystalline gallium from liquid galli-um*, J. of Crystal Growth, **23**, pp. 45–57, 1974.

[2] L. Rejman, P. Braun, E. J. Windhab, ETH Laboratory of Food Process Engineering, www.ifnh.ethz.ch/vt.

1.10 Linking Microstructure to Effective Transport Properties: a Predictive Model

The microstructure of a material has a large influence on transport processes, e.g. in solar cells, fuel cells and batteries. To produce better materials, we need to understand the relationship between microstructure and effective transport properties in a quantitative way. In cooperation with Ulm University, the ICP has developed a model predicting effective transport properties on the basis of geometric microstucture parameters.

Contributors:L. Holzer, O. Stenzel, G. Gaiselmann, M. Neumann, O. Pecho, V. SchmidtPartners:(IfB, ScopEM)-ETHZ, Ulm UniversityFunding:SNSFDuration:2012–2014

How does the complex geometry of a microstructure influence conductive transport processes? Several formulas in the literature exist, suggesting that volume fraction, windedness of transport paths (tortuosity) and bottlenecks (constrictivity) play a major role. However, these formulas are extremely difficult to validate with experimental data since this requires the costly acquisition and analysis of several 3D images from microstructures. In cooperation with Ulm University, a stochastic model has been developed that can simulate a large variety of random, virtual microstructures with very low computational effort, see Fig. 1.



Fig. 1: Examples of random, virtual microstructures

This enabled us to analyze enough microstructures to quantitatively relate morphological characteristics (volume fraction, geodesic tortuosity and constrictivity) to the effective conductivity. More precisely, we simulated the effective conductivities of 43 microstructures. The effect of the microstructure is captured by the so-called M-factor, where an M-factor of 1 indicates a perfect microstructure with no constraints with respect to transport and an M-factor of zero means that no transport occurs at all. Several formulas predicting the M-factor on the basis of volume fraction ε , geodesic tortuosity τ and constrictivity β have been tested and their relative prediction errors (MAPEs) have been computed, see Fig. 2.



Fig. 2: Relative (prediction) errors for different formulas. The exponents are determined to minimize (training) error.

Using the formula $M = \varepsilon \beta^c / \tau^d = \varepsilon \beta^{0.35} / \tau^{5.19}$, it is now possible to predict the effective conductivity on the basis of morphological characteristics with an relative prediction error of less than 18%. In the future, we put our efforts towards further formulas for other types of transport processes (diffusivity, permeability) while using an extended data base to enhance the statistical accuracy of the results.

Literature:

[1] G. Gaiselmann et al., AIChE J., 60, 2014.

1.11 Effects of pore morphology and drainage on elastic properties of Opalinus Clay

Opalinus Clay is a low-permeability clay rock formation, which is considered as potential host rock for a radioactive waste depository. The impact of pore morphology on the elastic behavior of Opalinus Clay was investigated by using voxel based FEM simulations in combination with pore microstructures, which were reconstructed on the base of tomographic image data. The mutual dependency between porosity and elastic moduli was established and the impact of water drainage from the pores on elastic moduli was determined.

Contributors: L. Keller Partners: Funding: Nagra Duration: 2014–2015

Opalinus clay is a low-permeability clay rock formation, which is considered as potential host rock for radioactive waste. In order to study effects of pore morphology on the elastic behavior of Opalinus Clay, voxel based FEM simulations were applied to pore microstructures, which were reconstructed from FIB-nt tomographic image data, see Fig. 1a. The solid phase (i. e. clay matrix) was considered isotropic in order to reveal the effects of pore morphology. By analyzing a large number of sub-samples the mutual dependency between porosity and elastic moduli was established and the impact of water drainage from the pores on elastic moduli was determined, see Fig. 1b, c.

For a typical sample from the shaley facies, it turned out that the relationship between porosity and Young's/shear moduli is a well-known powerlaw relationship, see Fig. 1b. In addition, a polar anisotropy in elastic properties was revealed, which is related to a preferred orientation of pore objects parallel to bedding. Elastic properties are near isotropic within planes parallel to bedding but are substantially different perpendicular to bedding. In particular, with increasing porosity, the Young's modulus that accounts for stiffness perpendicular to bedding decreases much more when compared to the ones that account for stiffness within the bedding plane. Drainage of water from the pores enhances this effect as this substantially reduces stiffness perpendicular to bedding, see Fig. 1c.

Regarding the application of a shear strain, the material exhibits also a different response when shear stress is applied in different directions. The shear modulus is higher in case shear strain occurs due to forces, which act on a plane perpendicular to bedding but is lower in case the shear plane is parallel to bedding. The effect of drainage on shear moduli is minor and does not increase much the anisotropic response to shear strain. Drainage of water substantially reduces the two Possion's ratios, which measure the ratio between strain parallel and perpendicular to bedding.



Fig. 1: Effects of porosity and drainage of water on Young's moduli. a) Example of reconstructed pore microstructures of an analyzed sample. b) Ratio between effective E and solid Es (Young's moduli of the clay matrix) vs. porosity. c) Ratio between drained and undrained Young's moduli. Note, that drainage of water substantially affects stiffness perpendicular to bedding (E_{33}).

1.12 Zeit sparen und Ausschuss reduzieren

Bei der Kunststoffbeschichtung führen Prozessschwankungen dazu, dass der Kunststoff oft nicht homogen aufgetragen wird. Durch eine Inline-Messung mit dem CoatMaster, der in Zusammenarbeit mit der ZHAW entwickelt wurde, erkennt der Beschichter Prozessabweichungen frühzeitig und kann sie durch eine Nachregelung der Prozessparameter korrigieren.

Contributors:B. Rutz, B. Schmid, S. Hauri, N. ReinkePartners:IDPFunding:Winterthur Instruments AGDuration:2014

Kunststoff auf Gleitlagern, Dichtungen und anderen Metallkomponenten sind aus der Automobilindustrie nicht mehr wegzudenken. Ohne diese Beschichtung wäre ein reibungsloser Ablauf nicht möglich, allerdings sind die Oberflächen auch besonderen Belastungen ausgesetzt. So sind zum Beispiel die Gleiteigenschaften und somit auch die Passgenauigkeit von Gleitlagern und Kolben von höchster Wichtigkeit für die Funktion. Ist eine Beschichtung zu dick, passt die Komponente nicht mehr in die für sie vorgesehene Position, ist die Beschichtung zu dünn, reibt sie sich unter Belastung ab. Die Anforderungen an den Herstellungs prozess von Gleitlagern und Kolben sind dementsprechend sehr hoch.

Mit dem CoatMaster lassen sich Prozessabweichungen frühzeitig erkennen und korrigieren. Dies führt zu einem kontrollierten Prozess, bei dem enge Beschichtungstoleranzen eingehalten werden. Auch im Bereich der Messung von Kunststoffbeschichtungen in der Prozesskette wird das Gerät bereits erfolgreich eingesetzt. Ein Hersteller von Gleitlagern möchte die Kunststoffbeschichtung auf Halbschalen, aus denen später Gleitlager gefertigt werden, in nassem Zustand messen. Fehleinstellungen, Alterung und Verschleiß können dazu führen, dass die Beschichtung außerhalb des Toleranzbereichs aufgetragen wird. Die bisher verwendete Messmethode zur Qualitätssicherung ist allerdings magnetinduktiv, das heißt, kontaktierend und kann erst nach dem Trocknen der beschichteten Halbschalen durchgeführt werden. Dadurch geht mindestens eine halbe Stunde verloren. Das heißt, wenn die Referenzmessung erfolgt, die Aufschluss über eventuelle Prozessabweichungen gibt, haben in der Zwischen-

zeit bei einer Taktrate von 40 Halbschalen pro Minute wieder circa 1200 Halbschalen den Beschichtungsprozess durchlaufen. Der CoatMaster wird dazu eingesetzt, Prozessabweichungen direkt nach dem Beschichtungsvorgang zu detektieren, indem die Schichtdicke auf den noch nassen Halbschalen gemessen wird. Zunächst wird mit dem CoatMaster die Schichtdicke der getrockneten Kunststoff beschichtungen ermittelt. Die Ergebnisse werden mit denen einer magnetinduktiven Messung an denselben Positionen verglichen. Die Resultate beider Methoden stimmen mit einem R^2 von 0.98 sehr gut überein. Die Standardabweichung wird über fünf Messwiederholungen bestimmt. Beim CoatMaster beträgt sie 0.2 µm, bei der magnetinduktiven Methode 0.5 μm . Mit der magnetinduktiven Methode ist somit eine Mittelung über sechs Messungen erforderlich, um eine vergleichbare Genauigkeit wie mit dem CoatMaster zu erreichen. Eine prozessintegrierte Ermittlung der Schichtdicke mit magnetinduktiven Methoden kann damit zum Flaschenhals in der Produktion werden.



Abb 1: Lagerschalen für den modernen Motorenbau.

1.13 Pulverlacke mikrometergenau applizieren

Die Zürcher Hochschule hat mit den Industriepartnern Winterthur Instruments AG und J. Wagner GmbH eine neue Technologie entwickelt, welche die Pulverbeschichtung revolutioniert und eine automatische µm-genaue Lackapplikation ermöglicht.

Contributors:B. Rutz, B. Schmid, S. Hauri, N. ReinkePartners:IDPFunding:KTIDuration:2013-2014

Wagner Beschichtungslinien verfügen über eine hochgenaue Dosierungsautomatik, welche die Luftmenge zur Pulverförderung zu den Pulverpistolen permanent misst und regelt. Dadurch lassen sich dauerhaft konstante Werte sicherstellen. Aber wie überprüft man verlässlich, dass diese Werte auch zur gewünschten Schichtdicke führen? Die Winterthur Instruments AG kennt schon lange das Bedürfnis ihrer Kunden, dauerhaft eine konstante Sollschichtdicke in möglichst engen Toleranzgrenzen realisieren zu können. Denn bisher war eine konstante Schichtdicke, bei der weder zu viel noch zu wenig Beschichtungsmaterial aufgetragen wurde, mehr oder weniger ein Zufallstreffer.

Die Qualitätsziele für eine gute Beschichtung sind klar, wenn es auch aufgrund mangelnder Prüfmethoden schwierig ist, sie zu spezifizieren:

- Es soll kein Ausschuss produziert werden
- Die Schichtdicke soll sich im unteren Bereich eines definierten Toleranzfensters befinden
- Die erreichte Schichtdicke soll zur Dokumentation und Qualitätssicherung nachgemessen werden. Allerdings ist oft nicht spezifiziert, wo und wie oft auf einer Probe gemessen werden soll. Aufgrund fehlender Messschablonen kann außerdem nicht sichergestellt werden, dass immer an den gleichen Stellen auf einem Werkstück gemessen wird.

Über die Anlagensteuerung werden die Sollschichtdicke und die dazugehörigen Toleranzgrenzen definiert und die Pulverpistolen in der Anlage entsprechend eingestellt. Die Probe wird nun in der Lackierkabine beschichtet. Direkt am Kabinenausgang ist der Messkopf des CoatMasters montiert. Er misst die applizierte Schichtdicke direkt nach dem Auftragen berührungslos und zerstörungsfrei. Sobald der vom CoatMaster gemessene Istwert der Schichtdicke vom vordefinierten Sollwert abweicht, werden die Prozessparameter über die Anlagensteuerung nachgeregelt. So wird

z.B. die Pulvermenge über die Förderluft in den Pulverpistolen korrigiert, und die fehlerhaften Bauteile können automatisch für eine Nacharbeit kodiert werden. Danach wird ein erneuter Beschichtungsprozess gefahren, und die Schichtdicke wird wieder direkt nach dem Auftragen mit dem Coat-Master gemessen. Die vordefinierte Sollschichtdicke wird jetzt exakt bis auf den *um* eingehalten. Die Messergebnisse sind jederzeit auf dem Bildschirm der Anlagensteuerung ersichtlich, können aber auch überall auf dem Werksgelände mit einem PC, einem Tablet oder einem Smartphone abgerufen werden. Damit sind die zentralen Herausforderungen an die Pulverbeschichtungsanlagen von heute gemeistert:

- Materialeinsparung durch Vermeiden von Überbeschichtung (nach dem Motto: Material brauchen, nicht verbrauchen)
- Verbesserte Oberflächen Qualität
- Vermeiden von Ausschuss
- Kompromisslose Qualitätskontrolle und Prozessstabilität durch Nachregelung und Überwachung
- Lückenlose Kontrolle aller Werkstücke anstelle von sporadischen Kontrollen
- Sofortiges Erkennen von Anlagenstörungen
- Prozessnachweis durch lückenlose Teiledokumentation



Abb. 1: Closed-Loop Pulver-Beschichtungsanlage.

1.14 Enthalpy model of melt-crystals phase-changing kinetics

A phase changing model describing the heat transfer and the interconversion between melt and crystal polymorphism is implemented. The enthalpies of crystals and melt phases are used to formulate a consistent coupling between the mass balance and the Stefan problem. A stable numerical solving is achieved with a new implementation of the Chernoff scheme.

Y. Safa
IFNH-ETHZ
CTI
2013–2015

In the industrial production of solids, it is highly required to characterize the material in the process not only by identifying its nature, but also by knowing its stability with the time, the changes of its chemical and physical properties as a function of the crystal. Although possessing the same chemical identity of the parent processed solid, different crystal forms may display a range of different thermophysical properties, which may affect application and utilization of the product.

Moreover, material processing undergoes often a thermal history (like cooling from a high temperature). It is therefore important to understand how microstructure, and thus properties can be controlled by the processing history.

The thermodynamic principles state that transition, under specified conditions, to a stable system results in only one polymorph constitution. However, due to kinetic effects like, for example, the diffusion between adjacent phases, some metastable forms can exist or coexist in the presence of more stable forms. The instability of certain crystals, the possibility of interconversion between crystal phases and the transition between crystals and melt phase can affect the quality and the endurance of the desired properties of the product that is designed for some specific applications.

In the framework of collaboration with IFNH institute at ETH Zurich, a computational model describing energy transfer coupled with mass transformation between crystal phases in chocolate is developed. The model allows to predict the temperature and crystal evolutions (Fig. 1) and the corresponding changes in the properties of the chocolate produced through process like cold moulding, tempering and seeding, and further, this allows to derive relationships that can aid in process design. Unlike other formulations, the latent heat is not considered as source/sink term of thermal problem, but it is represented through an enthalpytemperature formulation of the Stefan problem. The time discretization of the problem is achieved through an advanced implementation of the stable Chernoff scheme allowing a consistent dependency of enthalpy and phase fraction. In Fig. 2, the variation of the total solid fat content SFC obtained from numerical simulation is plotted with respect to the values from NMR (Nuclear Magnetic Resonance) measurements. The model would be informed, for input data, from DSC (Differential Scanning Calorimetry) tests that characterize the kinetic of crystal polymorphism. This approach is not limited to the chocolate industry, it can be also applied in polymer processing, cement manufacture and pharmaceutical industries.



Fig. 1: Crystal fraction (left) and temperature (right) at 14^{\it th} minutes of a initially melt sample cooled down from T =30 °C with a rate of 1 °C/min .



Fig. 2: Evolution of total solid fat content SFC upon cooling. Results are compared to NMR measurements provided by L. Rejman and L. Caiata from IFNH-ETHZ.

1.15 Coulometric system with generator cell

An automatic Coulometric measurement system for general titration is developed. The system is based on a compact and closed cell generator with a jelly-like electrolyte. The physical and chemical processes are summarized in a simulation model allowing the geometry and composition of the generator cell to be optimized.

Contributors:G. Sartoris, L. HolzerPartners:Mettler-Toledo AG, ZPP, IMPE, ICBCFunding:KTIDuration:2014–2015

This project is concerned with the developement of an automatic, compact and easy-to-use measurement system for general titration based on a catridge system delivering the reagent and controlled by hardware. At ICP, we are concerned with the modeling and optimization of the generator cell.

Modeling the Coulometric titration system is a multi-physics simulation problem and the in-house and at ICP developed software NM-Seses is best suited for this purpose. NM-Seses is an advanced multi-physics modeling tool and is presently capable of modeling the whole cell system, although one has to provide the material laws for all physical processes involved. Ions transport in the hydrogel is mainly due to diffusion and migration (drift), hence one needs here diffusion constants and mobilities. Due to the thinness of the membrane. one can avoid to develop a bulk model for the membrane and a 0-dimensional point-to-point analytic model connecting locally the hydrogel and the aqueous domains is a valid alternative. Analytic 0dimensional models of Butler-Volmer type are also used at working- and counter-electrodes to characterize overpotentials and contact losses. Much more demanding is the modeling of the aqueous domain due to forced convection. Here a stirrer is mixing up the aqueous solution and a thin diffusion layer is building-up at the working electrode, but otherwise the concentrations can be considered as constant. It is notorious a very challenging task to try a direct numerical simulation of the mixing process, since the fluid is highly turbulent and turbulent models are inappropriate here. In order to study the influence of the electric field on the pH-measurement or to obtain IV-characteristics, however, the full titration system consisting of the membrane, hydrogel and aqueous domains need to be modeled. With the computational resources at our disposal, we cannot afford a direct numerical simulation of the mixing process and a valid alternative to model the aqueous domain is required. Our solution approach is based on the assumption that the diffusion layer is generally thin with respect to the cell geometry. Hence in a first order approximation, we can apply a point-to-point 0dimensional analytical model between the working electrode and the aqueous domain in the form of a Nernst diffusion layer model. Within this model, we neglect transverse transport processes in the diffusion layer, but we are able to correctly map all Ohmic losses and therefore to compute the electric field on the whole cell system and to evaluate IV-characteristics. At our disposal, we therefore have the software and a first coarse grain model to simulate the titration cell and one is left with the realization and validation.



Fig. 1: Computed current streamlines for optimizing the contact's geometry.

2 Fuel Cells and Energy Systems

Fuel cells convert fuels such as hydrogen, natural gas or methanol into electrical energy and heat. They can be used as a battery replacement in portable electronic devices, for production of heat and electricity in households and as an energy source in electric cars. Due to their flat design, fuel cells are easily scalable by connecting them in series to form stacks. Electrical efficiencies over 60% are feasible which is much higher compared to other decentralized electricity generation technologies. Although the working principle among all fuel cells is the same, they can greatly differ in the choice of used materials and operating conditions.

To allow for the market introduction of proton exchange membrane fuel cells in the automotive sector, major advancements are being achieved by several companies and research institutions. These advancements include new designs of the gas distribution flow-fields, improved water transport properties of the gas diffusion layers, novel membrane materials, the use of alloy materials to lower the platinum loading of the catalyst layers etc.

The ICP supports the progress in fuel cell research by developing multiphysics computer models. Modeling helps to better understand the large number of chemical, thermal, electrical, mechanical and fluidic processes with the goal to detect weaknesses of the system and provide design improvements. In addition to fuel cells, we also model hydrogen production techniqes. For example, we model photo-electro-chemical cells (PECs) which use solar energy to split water and produce hydrogen as a solar fuel, and hydrogen production reactors by use of formic acid. Most research projects are conducted in collaboration with our strategic partners Hexis AG in Winterthur (SOFC), Paul Scherrer Institut in Villigen (PEFC) and EPFL (hydrogen generation) in Lausanne.



Modeling of proton exchange membrane fuel cells. Left: Top view of the pore structure of a gas distribution layer (GDL) reconstructed from X-ray image data. Right: Current density obtained by a 2+1D simulation of a single cell with effective transport parameters computed by numerical simulations on the pore-scale of the GDL.

2.1 The development of a thermo-neutral fuel cell

The Swiss Competence Center for Energy Research (SCCER) Efficient Technologies and Systems for Mobility is a research program initiated in January 2014. It brings together research groups from all the major Swiss research institutions. It is one of the strongest research centers in this field worldwide, cooperating with industry partners domestically and worldwide, with the aim to find new mobility solutions and products with a measurable impact on energy efficiency and CO2 reduction.

Contributors:J. Dujc, J. Schumacher, L. CaponePartners:Paul Scherrer InstitutFunding:CTIDuration:2014–2017

The SCCER Mobility aims at developing the knowledge and technologies essential for the transition of the current fossil fuel based transportation system to a sustainable one, featuring minimal CO2output and virtually zero-pollutant emissions. The focus of the SCCER Mobility project is on the following Capacity Areas (CA): A1 - new battery technologies, A2 - optimal use of renewable chemical energy carriers for fuel cells and combustion engines, A3 - minimization of vehicular energy demand, B1 - infrastructure, logistics and ICTsystems and B2 - assessment of the transportation system. The ICP is with its partner, the Paul Scherrer Institut, integrated into the Capacity Area A2.



Fig. 1: The cross-section of the differential cell on the left and the simulated distribution of the effective porosity of the cathode's GDL due to 20% mechanical compression on the right.

The fuel cell research conducted in the CA-A2 deals with hydrogen fed proton exchange membrane (PEM) fuel cells. PEM fuel cells generate electrical power from hydrogen gas with pure water being the only byproduct. Further technological innovation is needed for the commercial breakthrough of the PEM fuel cell technology in individual mobility. In this program we aim to develop a novel concept of a thermo-neutral fuel cell operation. This will allow a simplification of the overall system and thus push towards the marketability of

fuel cell vehicles.

The thermal management of a thermo-neutral fuel cell is completely passive. That is, the water produced during fuel cell operation also serves as a thermal management agent and no additional cooling device is needed. In this setting it is essential that we thoroughly understand the transport of the liquid and the gaseous water, as well as the phase change processes in the fuel cell's porous materials and on the cell level. In the year 2014 the team at the ICP focused on the 2D simulation of the cathode's gas diffusion layer, see Fig. 1 left. The numerical model consists of the mechanical part, see Fig. 1 right, the two phase flow, the transport of gas species and the electrochemical part. Simulation results of the model are compared with images obtained by PSI from neutron radiography, see Fig. 2. Both neutron radiography data and the numerical simulations are essential to analyze and predict the conditions for the thermo-neutral operation of the PEMFCs. A prototype of the system will be developed within the duration of the project.



Fig. 2: The quantity of the liquid water present in the cathode's GDL is expressed as the water thickness. Here we compare experimental results obtained by high-resolution in plane neutron imaging (left) with simulation results (right).

Literature:

[1] http://www.sccer-mobility.ch.

2.2 Simulation von Wärmetransport in Brennstoffzellen

Zur energetischen Optimierung eines SOFC-Brennstoffzellensystems ist die Kenntnis lokaler Betriebstemperaturen wichtig. Da Messungen im Inneren derartiger Systeme schnell an ihre praktischen Grenzen stossen, entwickelt das ICP ein thermo- fluiddynamisches Simulationsmodell auf Basis OpenFoam, welches Aufschluss über lokale Temperaturen in einem Brennstoffzellensystem geben soll.

Contributors:J. Fuchs, G. Boiger, C. MeierPartners:Hexis AGFunding:Hexis AGDuration:2014–2015

Frühere Simulationen von Brennstoffzellensystemen wurden mittels der Software Ansys CFX durchgeführt. Dieses, in der Praxis bewährte Modell, erreichte jedoch die Grenzen der Anwendbarkeit, da die Nutzung der kommerziellen Software zu Limitierungen bei der Implementierung der Strahlungsmodellierung führte. Da Strahlung aber ein wesentlicher Wärmeübertragungsprozess in der Brennstoffzelle ist, wurde das bestehende Modell nun in die open Source Software OpenFoam überführt. Für den Entwickler besteht hier die Möglichkeit den Programmcode selbsttätig an die Problemstellung anzupassen.

Um den Aufbau des Modells zu verstehen, ist Kenntnis um die Struktur des SOFC Stacks, also des eigentlichen Brennstoffzellenmoduls, entscheidend. Dieser besteht abwechselnd aus keramischen Zellen und metallischen Stromsammlern. Ungefähr 60 Zellen, die jeweils an einer Seite mit Luft und an der anderen Seite mit Brenngas überströmt werden, finden in einem Stack Platz. Diese Schichtstruktur führt jedoch zu einer Anisotropie der Wärmeleitfähigkeit. Auch dieser Sachverhalt kann mittels des neuen OpenFoam-Modells berücksichtigt werden.

Energetisch ist der Stack mit dem Luft- bzw. Brenngasgemisch nur über eine volumetrische Wärmequelle bzw. Senke gekoppelt, da sich diese zwei Simulationsregionen überlappen. Dies führt dazu, dass interfacebasierte Strahlungsmodelle, wie sie in kommerzieller Software verwendet werden, nicht angewandt werden können. Mittels Modifikation des OpenFoam-Programmcodes ist es nun gelungen eine separate Simulationsregion zur Strahlungs-berechnung einzufügen und auch Strahlungsaustausch zwischen dem Stack und umliegenden Festkörpern zu berücksichtigen. Damit kann nun eine realistischere Berechnung (s. Abb. 1) der Temperatur-verhältnisse im Brennstoffzellenmodul erreicht werden.



Abb. 1: Seitenansicht der Simulationsresultate des Temperaturfeldes des neuen SOFC OpenFoam Modells.

2.3 Reduzierung der Ohm'schen Verluste in neuer Generation von Hexis Brennstoffzellen

Das Brennstoffzellenheizgerät Galileo der Hexis AG wandelt Erdgas kontinuierlich in elektrische Energie und Wärme um und deckt so den Bedarf eines Einfamilienhaushalts. Die elektrochemische Umsetzung des aus Erdgas gewonnenen Wasserstoffs findet an den Anoden der Festoxidbrennstoffzellen vom Typ SOFC statt. Um deren Effizienz und Alterungsbeständigkeit weiter zu verbessern, wurde ein Impedanzmodell entwickelt, mit dessen Hilfe die Anodenperformance zuverlässiger als bisher interpretiert werden kann.

thur
•

In Festoxidbrennstoffzellen vom Typ SOFC werden zur elektrochemischen Umwandlung des Brennstoffs immer häufiger mischleitende Anodenmaterialien (MIECs - Mixed Ionic-Electronic Conductors) verwendet. Das sind keramische Halbleiter wie beispielsweise Gadolinium-dotiertes Cerdioxid (CGO), die in Abhängigkeit von Temperatur und Gaszusammensetzung sowohl Sauerstoffionen, als auch Elektronen leiten. Die in CGO-Anoden ablaufende Elektrochemie gilt als noch wenig erforscht. In einer Serie von Publikationen von S.M. Haile et al. konnte jedoch kürzlich gezeigt werden, dass die Elektrochemie ohne Zutun metallischer Stromsammler praktisch vollständig an der Oberfläche des MIEC-Materials abläuft [1]. Aufgrund dieser Erkenntnis wurde ein Transmission-Line (TL) Impedanzmodell entwickelt, das die Elektrochemie und den Ladungstransport in einer porösen Mischleiteranode beschreibt. Je nach Temperatur, Brenngaszusammensetzung und Mikrostruktur der Anode kann entweder der Transport der Sauerstoffionen, oder der Transport von Elektronen, oder die Elektrochemie den Anodenwiderstand dominieren.



Abb. 1: Alterung der Mikrostruktur von CGO-Anode nach 1, 267 und 2935 Stunden unter typischen SOFC-Betriebsbedingungen.

Die Mikrostruktur der porösen Mischleiteranoden spielt hierbei eine wichtige Rolle. Abb. 1 zeigt das Alterungsverhalten von Gadoliniumdotiertem Cerdioxid unter typischen SOFC-Betriebsbedingungen. Man sieht deutlich, dass sich die CGO-Mikrostruktur im Laufe der Zeit vergröbert. Um den Einfluss von solchen Mikrostruktureffekten auf die Brennstoffzellenperformance besser zu verstehen, wurde ein Impedanzmodell entwickelt, das Ladungstransportpfade ("Transmission Lines" TL) als unendliche Reihenschaltung von einfachen elektrischen Komponenten wie ohm'schen Widerständen, Kondensatoren und Spulen approximiert. Das TL-Modell basiert jedoch im Gegensatz zu rein empirischen elektrischen Ersatzschaltbildern immer auf einer mikroskopischen Vorstellung der örtlich ausgedehnten, in den Elektroden ablaufenden Transport- und Umwandlungsprozessen.



Abb. 2: *Transmission Line* Modell zur Vorhersage des Impedanzverhaltens der Anodenperformance von Hexis-Brennstoffzellen.

Abb. 2 zeigt das am ICP entwickelte *Transmissi*on Line Modell zur Beschreibung des Impedanzverhaltens von mischleitenden Anoden. Im Modell können sowohl der Transport von Sauerstoffionen und Elektronen, als auch der Ladungstransfer bei der elektrochemischen Umsetzung des Brennstoffs limitierend wirken. Wie in der Abbildung rechts unten gezeigt, resultieren daraus unterschiedliche Impedanzbögen. Entscheidend für die Nutzbarkeit dieses Modellansatzes ist Identifikation der im Modell enthaltenen Parameter mit physikalischen Grössen. Das hier gezeigte Modell enthält fünf Parameter $R_{\rm io,anod}$, $R_{\rm el,anod}$, $R_{\rm pol,anod}$, $\omega_{\rm L,anod}$ sowie $\omega_{\rm pol,anod}$, die auf verschiedene physikalische Grössen zurückführt werden können. Letztere lassen sich entweder aus der Elektrodenmikrostruktur ermitteln ($\sigma_{\rm eff,io,anod}$, $\sigma_{\rm eff,el,anod}$, $A_{\rm tpb,anod}$), oder durch Vergleiche des Modells mit experimentellen Impedanzdaten ($i_{0,anod}$, $C_{\rm anod}$) fitten. Das gezeigte Modell wurden im Rahmen der Masterarbeit von Michael Dold in *Mathematica* implementiert und soll zukünftig bei unserem Forschungspartner Hexis AG zur Interpretation von experimentellen Impedanzdaten genutzt werden.

$$\begin{aligned} R_{\rm io,anod} &= \frac{L_{\rm anod}}{A \sigma_{\rm eff,io,anod}} \qquad R_{\rm el,anod} &= \frac{L_{\rm anod}}{A \sigma_{\rm eff,el,anod}} \\ R_{\rm pol,anod} &= \frac{1}{A L_{\rm anod} A_{\rm tpb,anod}} \frac{RT}{i_{0,\rm anod} F} \\ \omega_{L,\rm anod} &= \frac{A \sigma_{\rm eff,io,anod}}{L_{\rm anod} C_{\rm anod}} \\ \omega_{\rm pol,anod} &= \frac{A L_{\rm anod} A_{\rm tpb,anod} i_{0,\rm anod} F}{RT C_{\rm anod}} \end{aligned}$$

Literatur:

[1] W. C. Chueh, S. M. Haile, *High electrochemical activity of the oxide phase in model ceria–Pt and ceria–Ni composite anodes*, Nature Materials, Vol. 11, 155–161, 2011.

2.4 Thermisch-Fluidische Simulation eines SOFC-Moduls

Die Firma Hexis AG konzipiert ihr Brennstoffzellenmodul (BZM) neu. In der Peripherie des Brennstoffzellenmoduls befinden sich kritische Bauteile, an welchen zulässige Maximaltemperaturen auf keinen Fall überschritten werden dürfen. Mittels einer Simulation galt es, diesen Bereich zu analysieren und gegebenenfalls Lösungen zur Temperatursenkung vorzuschlagen.

Contributors:	V. Lam, J. Fuchs, G. Boiger, C. Meier
Partners:	Hexis AG, Viessmann Werke GmbH
Funding:	Hexis AG, Förderprojekt Leonardo
Duration:	2013–2015

Seit über zehn Jahren pflegt das ICP eine enge Forschungs- und Entwicklungszusammenarbeit mit der Firma Hexis AG, aktuell im Förderprojekt *Leonardo*. Im Jahr 2014 richtete sich das Augenmerk unter anderem auf den Bodenbe-reich ihres Brennstoffzellenmoduls. Dieser Be-reich stellt die Verbindung vom BZM zum Abgaswärmetauscher dar, in welchem die heissen Abgase aus dem Prozess zur Gewinnung von Heizwärme abgekühlt werden.

Zur Analyse des Bodenbereiches wurde eine Simulation mit der Open-Source-Software OpenFO-AM [2] durchgeführt. Hierbei handelt es sich um eine Finite-Volumen-Methode-Software, welche die Anpassung des Solvers für individuelle Anwendungen erlaubt.

In der folgenden Abbildung ist der simulierter Bodenbereich mit der entsprechenden Temperaturverteilung dargestellt. Im Zentrum ist der heisse Abgasstrom von ca. 800 °C zu erkennen, dessen Wärmeströme sich radial nach Aussen hin ausbreiten.



Abb. 1: Bodenbereich des Brennstoffzellenmoduls der Hexis AG. Aus Symmetriegründen ist nur ein Viertel der realen Geometrie dargestellt. Mit Hilfe der Simulation konnte festgestellt werden, dass sich die kritischen Bauteile in der Periphe-rie vor allem durch die Strahlung erhitzen. Mit gezielten Geometrieanpassungen sowie einem verbesserten Strömungsverlauf können die Temperaturen an diesen Stellen deutlich reduziert werden. Die Verwendung von geeigneten Materialien haben vor allem auf die Wärmeverluste einen nicht zu vernachlässigenden Einfluss.

In der folgenden Grafik sind berechnete Temperaturverteilungen an der metallischen Aussenhülle des Bodenbereiches dargestellt. Untersucht worden sind verschiedene Dämmmaterial-Kombinationen.



Abb. 2: Temperaturverteilung an der metallischen Aussenhülle.

Für das Jahr 2015 ist vorgesehen, nicht nur den Bodenbereich, sondern das komplette BZM zu simulieren. Dies ermöglicht ganzheitliche Analysen, um beispielsweise die Auswirkungen von Leckagen auf die Temperaturverteilung und Wärmeströme zu untersuchen.

Literatur: [1] http://www.hexis.com. [2] http://www.openfoam.org.

2.5 Quantification of SOFC stack degradation and fuel distribution based on current voltage data

An authentic interpretation of the performance of solid oxide fuel cell (SOFC) systems operated in the field is important for specific improvements of the stack components and the operation strategies. In this context, electrochemical impedance spectroscopy enables to distinguish and quantify the various sources of voltage loss and resistance. However this method is not available for systems operated in the field. As an alternative approach, a model for an enhanced interpretation of current voltage data from field measurements was developed at ICP.

Contributors:	M. Linder, C. Meier, T. Hocker, L. Holzer
Partners:	Hexis AG
Funding:	Swisselectric Research, Swiss Federal Office of Energy
Duration:	2012–2014

Reliable guantification and interpretation of the degradation of SOFC stacks under real conditions is important for future improvements. For SOFC systems running in the field one usually has to rely on current-voltage (V.I) data since more comprehensive methods such as electrochemical impedance spectroscopy (EIS) are primarily available in the lab. The degradation behavior is then analyzed based on the slopes of time-dependent (VI)-curves representing the overall resistance of one or several stack repeat units (RUs) [1]. However, these overall resistances often contain unavoidable fluctuations in the fuel gas amount and composition and hence are difficult to interpret. Instead, internal RU resistances are a more appropriate measure to assess stack degradation. They follow from EIS-data through subtraction of gas depletion effects from the overall impedance in the low-frequency limit [2]. However, extracting internal RU resistances from (V,I)-data is not obvious. Here, we propose a model-based approach where a cascade of continuously stirred tank reactors is used for spatial discretization of a fuel cell stack RU running on hydrocarbon mixtures such as natural gas. For each cascade element thermodynamic equilibrium is assumed to calculate the local fuel composition. Since under real operation conditions, fuel leakages, uneven fuel distribution over the various stack repeat units [3] and varying natural gas compositions from the grid [4] can influence the performance, they are taken into account by the model. Fig. 1 shows the agreement between area specific resistance (ASR) values, which follow a) from EIS and b) from the proposed repeat unit model. By subtracting

fuel gas effects from the measured overall resistance the model provides the internal resistance for each RU. The internal resistances (extracted at different time steps) can be directly compared with the sum of the time-dependent resistances of the electrolyte, the electrodes, the interconnect and their mutual interfaces. Since the latter are usually obtained under idealized laboratory conditions the presented method allows one to make direct links between laboratory degradation experiments and the respective behavior of SOFC stacks under real operation conditions.



Fig. 1: Comparison of Hexis SOFC-stack ASR values obtained a) by EIS (symbols) and b) by a repeat unit model (lines), plotted against the corresponding current densities. The dashed curve represents the ASR behavior as directly extracted from the slope of Hexis SOFC-stack IV-data [5].

Literature:

[1] R. S. Gemmen, et al., J. Power Sources, 184, 2008.

[2] C. Comminges, et al., Electrochim Acta, 59, 2012.

- [3] M. Lang, et al., Electrochim Acta, 53, 2008.
- [4] M. Linder, et al., Fuel Cells, 11, 2011.
- [5] M. Linder, et al., J. Power Sources , 188, 2015.

2.6 Multi-phase modelling of a hydrogen generator

One of the biggest difficulties of using hydrogen in PEM fuel cells and, generally, as an energy source is its safe and effective storage. We investigate modelling and simulation of a unique multi-phase concept of a fluidized bed reactor generating ready-to-use hydrogen as a product of heterogeneous catalysis of liquid formic acid.

Contributors:	V. Orava, P. Cendula, O. Souček, J. Schumacher
Partners:	EPFL, Granit SA, Charles University (CZ), PSI
Funding:	Swisselectric Reasearch, CCEM
Duration:	2014–2015

Formic acid is a non-hazardous liquid with the highest content of hydrogen from all the carboxyl acids. This determines it as an ideal source of hydrogen, which can be effectively produced by heterogeneous catalysts (decarboxylation) on microscopic pellets covered by certain noble metal (e.g. Ruthenium) in a device called fluidized bed reactor. In this reactor the gaseous mixture of hydrogen and carbon dioxide is produced in form of bubbles which escape on the top of the reactor and it can be directly used in PEM fuel cells, see Fig. 1.



Fig. 1: Scheme of the hydrogen generator concept.

From the modelling point of view, we need to treat the reactor as a multiphase system of highly non-newtonian liquid with solid compounds coupled with bubbly flow and heat transfer due to the endothermal reactions and evaporation. Performance of such a device, i.e. power and efficiency, is strongly dependent on the initial physical setting and physical phenomena inside the reactor. Therefore, the directions on optimal/maximal performance are of utmost importance, see Fig. 2.



Fig. 2: Dependence of the predicted total efficiency of the reactor η on the pressure, temperature gradient efficiency

 η_T , evaporation rate eff. η_{ev} and gas production eff. η_{ϕ} at constant wall temp. $T_{wall}=120\,{\rm °C}.$

In the first year of the project, some of the important parameters of the catalyst and reactor setting were not yet available, thus, we performed efficiency analysis, see Fig. 2 and numerical simulations of the model with parameter values which are available in literature, see Fig. 3.



Fig. 3: Flow regime, heat transfer and volume fraction of the produced gas in a reactor concept at $T_{wall} = 140$ °C and P = 5 atm for estimated parameter values. Quasi-steady solution calculated by Comsol Multiphysics.

Depending on the first reliable measurements on the reactor, model modifications will be needed in order to qualitatively verify the model with measurements. After the verification, optimal reactor configuration will be achieved by several iterations between measurements (EPFL, PSI) and multiphysics modelling (ICP ZHAW).

The development of the hydrogen generators along with PEM fuel cell is very attractive for many industrial applications, e.g. in mobile (automotive) or decentralised power sources, along with fixedsite installations for power grid backup generation.

Literature:

V. Orava, O. Souček, P. Cendula, *Multi-phase modeling of non-isothermal reactive flow in flu-idized bed reactors*, J. Comput. Appl. Math., 2015.
H. A. Jakobsen, Chemical Reactor Modeling: Multiphase Reactive Flows, Springer, 2008.

[3] Yang, W.C.; Handbook of Fluidization and Fluid-Particle Systems, Chem. Indust., 2003.

2.7 Microstructure effects in Ni-YSZ anodes: Optimizing performance and redox stability

Understanding the relationship between microstructure and effective properties is a key to purposeful design of electrodes for solid oxide fuel cells. Optimization of various electrode properties (i.e. high electrochemical activity, low charge transport resistances and high durability/long service lifetimes) is a challenging task for materials processing. In this study we focus on the optimization of performance and redox stability of Ni-YSZ anodes.

Contributors:O. Pecho, O. Stenzel, B. Iwanschitz, M. Prestat, R. J. Flatt, T. Hocker, L. HolzerPartners:(IfB, NonMet, ScopEM)-ETHZ, Ulm University, Hexis SAFunding:SNSFDuration:2012–2014

Various electrochemical processes and transport phenomena that depend on the microstructure and on intrinsic material properties affect the electrode performance, see Fig. 1. Quantification of the relevant microstructure parameters such as particle size, size distributions, triple phase boundaries (TPB), interfaces, surfaces, tortuosity τ and constrictivity β are important to describe microstructure-property relationships. These microstructure parameters are incorporated into models that simulate the complex electrode reaction mechanism, which is necessary to distinguish different components (ionic and electronic transport, electrochemistry and charge transfer) of area specific resistances (ASR) and associated degradation phenomena.



Fig. 1: Schematic representation of Ni-YSZ composite anode.

In this work, the influence of microstructure on the effective ionic and electronic conductivities is described with the following empirical equation: $M = \phi_{\rm eff} \beta^{0.35} / \tau^{5.2}$. Thereby, the input microstructure parameters (volume fraction ϕ , constrictivity β , tortuosity τ , TPB) are obtained from FIB-tomography, see Fig. 2. From the detailed study a complex phenomenological pattern of microstructure-performance relationships upon redox degradation is obtained. Performance and degradation vary

strongly, depending on the initial microstructure. For example, finer anode microstructures lead to more severe degradation of the nickel network, including stronger Ni-coarsening and increase of tortuosity. In contrast, for the YSZ phase the degradation is more severe in coarser anode microstructures. Obviously the lower sinter activity of coarse YSZ leads to weak sinter necks. Upon redox cycling the exerted mechanical stresses impose a loss of percolation in the rigid YSZ network. Consequently, our investigations show that optimized anode microstructures result from a combination of fine and coarse powders in well-defined proportions and compositions. Hence new fabrication guidelines for improved redox stability of Ni-YSZ anodes can be proposed based on the finding of this study.



Fig. 2: FIB-Tomography of Ni-YSZ anodes before (top) and after (bottom) redox cycling.

Literature:

[1] G. Gaiselmann et al., AIChE J., 60, 2014.

[2] P. Costamagna et al., Electrochimica Acta, 43, 1998.

2.8 Designing multifunctional materials for PEMFC

For a successful commercialization of proton exchange fuel cells (PEMFC), a high specific power output must be achieved. Therefore, several porous cell components must be improved. In this a project funded by the Swiss National Science Foundation and the Swiss Federal Office of Energy, we aim at developing a multi-scale model for a PEMFC to increase the understanding and the performance of fuel cells through improved materials design.

Contributors:J. Schumacher, L. Capone, L. Holzer, J. Dujc, O. StenzelPartners:Paul Scherrer InstituteFunding:SNSF, Swiss Federal Office of EnergyDuration:2014–2017

At the high specific power and current densities, needed for a successful commercialization of the PEMFCs, losses due to the transport of charge, mass and heat contribute significantly to the overall energy conversion losses. These transport losses occur in the porous layers of the cell, namely the macroporous gas diffusion layer (GDL), the microporous layer (MPL) and the catalyst layer (CL). Macrohomogeneous models enable study of the complex interplay between operating conditions, materials response and cell performance but input parameters are needed to include the micro-scale properties of the components and interfaces. Moreover, models including liquid water transport, originated by the electrochemical processes occurring in the porous layers, lack of a significant length scale separation between the pore-scale and the GDL thickness.



Fig. 1: Tomographic view of a GDL (left) and its virtual voxelbased material representation (right).

Transport properties in the pore-space are analyzed by 3D imaging (tomography, FIB-SEM microscopy) and spatial statistics are calculated both under dry and wet conditions. Subsequently, a model for the water distribution within experimental and/or virtual geometries is simulated by Monte Carlo techniques at the voxel level, trying to capture also phase-transition phenomena, i.e. condensation and evaporation occurring in the porous media. Parametrizations of the transport parameters for charge, heat and the gas components are obtained from pore-scale simulations both for dry and wet porous media. These parameterizations are incorporated in a multi-scale model of a PEMFC connecting the calculations at the pore-level with macro-homogeneous models of the fuel cell.



Fig. 2: Effective permeability of a GDL is calculated from the velocity field flowing in its porous structure.



Fig. 3: Virtual porous structure (red) with binder (green) and percolation paths (blue).

Literature:

[1] M. Rebai, M. Prat., J. Power Sources, 192, 534–543, 2009.

- [2] K. Steinkamp, et al., J. Fuel Cell Sci. and Tech., 5, 11007–11022, 2008.
- [3] K. Seidenberger, et al., J. Power Sources, 239, 628–641, 2013.

2.9 Transmission-Line-Modell zur Analyse von Impedanzspektren von Hochtemperatur-Brennstoffzellen

Eine weitverbreitete Methode zur Analyse von Brennstoffzellen ist die elektrochemische Impedanzspektroskopie (EIS). Zur Interpretation von EI-Spektren werden Modelle verwendet, die den Messdaten verschiedene physikalisch-chemische Phänomene zuordnen. Im Rahmen dieser Arbeit wurde ein sogenanntes Transmission-Line (TL) Modell in unsere in Mathematica entwickelte Software zur Analyse von EI-Spektren integriert. Mithilfe dises Tools wurden Impedanzspektren von Hexiszellen mit Ni/YSZ-Anoden unter Berücksichtigung der Anoden-Mikrostruktur analysiert.

Students: M. Dold

Category: Swiss Master of Science in Engineering Mentoring: T. Hocker, M. Linder Handed In: Oktober 2014

Zur Charakterisierung von Brennstoffzellen ist die Impedanzspektroskopie eine sehr leistungsfähige Messmethode, da sich daraus zerstörungsfrei und in situ das Leistungs- und Degradationsverhalten der Zelle aus einer frequenzabhängigen Spannungs-Stromanalyse ermitteln lässt.

Um die gemessenen Spektren zu interpretieren, werden verschiedene Modelle benutzt. Sie reichen von empirischen elektrischen Ersatzschaltbildern bis hin zu sehr detaillierten physikalischchemischen Modellen. In dieser Arbeit wurden eine Transmission-Line (TL) verwendet, die die Vorzüge beider Modellarten vereint. Die TL bildet die wesentlichen in den Elektroden ablaufenden Ladungstransport- und Ladungstransferprozesse ab, ist jedoch so einfach, das sie auf eine analytische Lösung für die Impedanz Z führt [1].



Abb. 1: 2-Kanal-TL-Modell, bei dem die elektronische Leitfähigkeit (channel 2) als ideal angenommen wird.

Des Weiteren wurde ein Tool entwickelt, mit dessen Hilfe gemessene EI-Spektren komfortabel eingelesen und verglichen werden können. So lassen sich die Daten bereits ohne Verwendung von Modellen genau analysieren. Dazu zählt beispielsweise die Quantifizierung der Elektrolytverluste oder das übereinanderlegen der Prozessbögen.

Zur erweiterten EIS-Analyse kommt wie zuvor beschrieben ein TL-Modell zum Einsatz. Das Prinzip ist in Abb. 1 dargestellt. Dabei wird in den Elektroden zwischen dem ionischen (Kanal 1) und dem elektronischen (Kanal 2) Transport unterschieden. Letzterer wir als ideal angesehen und erhält somit keinen resistiven Anteil



Abb. 2: EI-Messdaten aus SOFC-Knopfzellversuch mit TL-Modell gefitteten Anoden- (TL 1) und Kathoden- (TL 2) Prozessen.

Das Modell erhält durch effektive ionische Leitfähigkeiten und aktive Oberflächen für Ladungstransferprozesse, die aus einer Mikrostrukturanalyse der verwendeten Elektroden stammen, den erwähnten physikalischen Bezug [2]. Weitere Parameter, wie die kapazitiven Anteile des Ladungstransfers und die Austauschstromdichte werden gefittet. Ein typischer Fit ist in Abb. 2 dargestellt. Er zeigt bei nicht degradierten Zellen eine gute Übereinstimmung zwischen Fitkurve und Messdaten. Insofern bietet der TL-Ansatz einen guten Ausgangspunkt für weitere Modellierungen. Dabei wird versucht, die Mikrostrukturparameter ebenfalls zu fitten, um so unabhängig von aufwändigen Mikrostrukturanalysen zu werden.

Literatur:

[1] J. Bisquert et al., Electrochem. Commun., 1, 1999.

[2] L. Holzer et al., 11th EFCF, B1104, 2014.

3 Solar Cells and Organic Electronics

Organic polymers are used in electronics due to their insulating, semiconducting or metallic properties. Today they are found in many commercial products such as displays and light sources based on organic light-emitting diodes (OLEDs), power generators such as organic photovoltaic cells (OPVs) and electronic components such as transistors. The particular advantages of OLEDs is their thin construction, large viewing angle and high achievable energy conversion efficiencies. OLEDs consist of a sequence of several thin layers placed in-between two metallic electrodes. In modern OLEDs one can find up to ten or more functional layers. The rapidly increasing commercialization of OLEDs has pushed research on organic solar cells as well. Here the strong absorbance of OPV materials allows for layer thicknesses of up to three orders of magnitude smaller than for inorganic solar cells and the highest efficiencies achieved in laboratories are currently about 12%. The ICP supports this development by employing multi-physics computer models for optimizing e. g. the layer structure of organic electronic devices in terms of its electrical and optical characteristics. Here our main tool is SETFOS, an OLED and OPV simulation software originally developed at the ICP. Meanwhile, SETFOS is commercialized by our spinoff company Fluxim AG. More recently, the software package PECSIM was released to perform simulations of dye solar cells. Both SETFOS and PECSIM are developed further within research projects funded by CTI, SNF, EU and SFOE, as well as by direct funding from industry partners in Switzerland and other European countries.



3.1 F&E-Tools für die OLED Industrie

Organische Leuchtdioden sind eine zukunftsweisende Technologie im Bereich Displays und Beleuchtung. Zur weiteren Effizienzsteigerung werden Lichtmanagement-Schichten (LMS) in die OLEDs eingebaut, und für die Auslegung dieser LMS kommen Software-Tools zum Einsatz. In diesem Projekt wurde die Software der Firma Fluxim weiterentwickelt, und sie ist nun in der Lage, gewisse Typen solcher Schichten zu simulieren. Dadurch lassen sich die optimalen Prozessparameter für die Herstellung der LMS ohne langwieriges Experimentieren vorhersagen.

Contributors: S. Altazin, M. Bieri, W. Haag, M. Jazbinsek, C. Kirsch, T. Lanz, K. Lapagna,

R. Knaack, S. Neuhaus, U. Mayer, K. Pernstich, M. Regnat, B. Ruhstaller, A. Romanyuk

Partners:	Fluxim AG, Glas Trösch AG
Funding:	KTI
Duration:	2012–2014

In einer OLED wird Licht in einer Schicht mit hohem Brechungsindex erzeugt und in alle Richtungen ausgestrahlt. Beim Übertritt des Lichtes vom Glas-Substrat – das als Träger für die OLEDs fungiert - wird ein Teil des flach abgestrahlten Lichtes durch Totalreflexion an der Glasoberfläche reflektiert und bleibt dadurch im Glas gefangen. Es trägt also nicht zur Lichterzeugung bei. In Zusammenarbeit mit Glas Trösch und Fluxim wurden am ICP Modelle und Verfahren entwickelt, um die Effizienzsteigerung zu simulieren, die mit Hilfe von Lichtmanagement-Schichten (LMS) erreicht werden können. Eine OLED besteht aus mehreren Schichten von (Halb-)leitern auf Kohlenstoffbasis. Diese Schichtabfolge muss optimiert werden, um effiziente OLEDs zu erlangen. Will man noch zusätzlich Lichtmanagement-Schichten einsetzen, ist es vorteilhaft, die Parameter der LMS gleichzeitig mit den Parametern der OLED zu optimieren, da sich OLED und LMS gegenseitig beeinflussen. Abb. 1 zeigt einen schematischen Querschnitt durch eine OLED mit den Lichtmanagement-Schichten LM1 und LM2. Diese können an der Aussen- und/oder an der Innenseite des Glassubstrates angebracht werden, und bestehen z. B. aus Schichten mit Streupartikeln oder aus mikrotexturierten Oberflächen.



Abb. 1: Schematischer Querschnitt durch eine OLED mit Lichtmanagement-Schichten LM1 und LM2. Die LM-Schichten können aus einer mikrotexturierten Oberfläche oder aus Streupartikeln bestehen.

Die am ICP entwickelten Methoden und Verfah-

ren wurden in die Simulationssoftware (Setfos) der Firma Fluxim integriert. Damit lässt sich nun der gesamte Schichtaufbau (OLED+LMS) simulieren und optimieren. Dies erleichtert die Suche nach den idealen Prozessparametern zur Herstellung der LM-Schichten, da nicht alle möglichen LMS hergestellt und evaluiert werden müssen.



Abb. 2: Ausgekoppelte Lichtleistung mit zunehmender Trübung der LMS. Dieses Simulationsresultat zeigt die Effizienzsteigerung durch den Einsatz einer LMS.

Erst durch diesen vereinfachten Ablauf wurde es praktikabel, die Auswirkungen aller Kombinationen der zu Verfügung stehenden LMS für eine vorgegebene OLED zu berechnen. Abb. 2 zeigt ein exemplarisches Simulationsresultat das verdeutlicht, wie sich die ausgekoppelte Lichtleistung mit zunehmender Trübung der LMS steigern lässt. Anhand solcher Berechnungen konnte die vorteilhafteste LMS identifiziert werden. Diese optimierte LM-Schicht wurde von Glas Trösch hergestellt, und ihr Einsatz in OLEDs wird derzeit geprüft. Erste Versuche im hauseigenen Labor belegten eine Effizienzsteigerung in OLEDs. Im Rahmen dieses Projekts wurden am ICP auch die Infrastruktur zur Vermessung von winkelabhängigen Lichtstreueigenschaften der LMS, sowie die guantitative Lichtauskopplung von OLEDs erweitert.

Zürcher Fachhochschule

3.2 Charge transport in multilayer semiconductor devices

A multilayer impedance solver was introduced in the latest version 4.1 of the OLED and organic solar cell simulation software Setfos by Fluxim AG. This new solver is based on mathematical models and numerical methods developed by ICP researchers; it was implemented by Fluxim software engineers.

Contributors:	S. Altazin, C. Kirsch, F. Müller, B. Ruhstaller, A. Stous
Partners:	Fluxim AG
Funding:	CTI
Duration:	2013–2015

Impedance spectroscopy has become an important tool for the characterization of semiconductor devices such as light-emitting diodes and solar cells. Nowadays, these devices contain multiple layers of various materials, which emit or absorb light in different spectral ranges. Such multilayer configurations are used in white OLEDs and in multijunction solar cells, for example. The new multilayer impedance solver in Setfos allows for the calculation of impedance spectra from material parameters and layer thicknesses provided by the user. We were able to generalize this solver (which was formerly limited to single layer devices) to multilayer devices within this CTI project. The modeling and prototyping work was carried out at the ICP, whereas the implementation and testing was done at Fluxim AG.



Fig. 1: Illustration of the Scharfetter-Gummel discretization scheme [2] for a single-layer electron-only device.

The classical van Roosbroeck equations for charge transport in semiconductor devices [1] are typically solved by using the Scharfetter-Gummel discretization [2]. For common devices with a single flat active layer a one-dimensional model is used, where the coordinate axis is placed orthogonal to the material interfaces. The region between the layer boundaries is divided into uniform cells, and a finite difference scheme is used to discretize the semiconductor equations. In this scheme the values of the electric potential ψ and of the charge

carrier number densitites n, p are computed at the cell centers, whereas the values of the electric displacement field $-\epsilon\psi'$ and of the charge carrier fluxes J_n , J_p are computed at the cell faces – see Fig. 1 for an illustration in the case of an electrononly device. While the Scharfetter-Gummel discretization provides an optimal approximation of the charge carrier fluxes at the cell faces, it does not allow for jumps across the cell faces, which are required for the simulation of multilayer devices.



Fig. 2: Numerical solutions of the electron number density n near the layer interface of a bilayer electron-only device.

For a multilayer device, the cell division is done in such a way that the layer interfaces coincide with cell faces, where we need to drop the continuity assumption for all quantities. Jump conditions need to be imposed at these cell faces instead, which describe interfacial charges and generation or recombination of charge carriers at the layer interface, for example. Our multilayer discretization leads to a nonlinear system of equations with tridiagonal matrices, like in the single layer case; it is thus a natural generalization. Fig. 2 illustrates the capability of our multilayer solver to handle jump conditions imposed on the electron number density n at a layer interface.

Literature:

[1] W. van Roosbroeck, Bell System Tech. J. 29 (4), 560–607, 1950.

[2] D. L. Scharfetter, H. K. Gummel, IEEE Trans. Electron Dev. 16 (1), 64–77, 1969.

3.3 Light Scattering Measurements

One of the main challenges in the OLED development today is to increase the light outcoupling, which is limited by the total internal reflection. An effective way to increase the efficiency is to insert a scatter layer inside the OLED stack. We have built a setup to measure the angular dependence of scattered light through rough surfaces. The measured bidirectional scattering distribution functions (BSDFs) can be imported in the commercial modeling software of our industrial partner to predict the increase of the outcoupling of the OLEDs including a scattering layer at various layer interfaces.

Contributors: M. Brumm, M. Jazbinsek, K. Pernstich, B. Ruhstaller

Partners:	Fluxim AG
Funding:	CTI
Duration:	2012–2014

The light-outcoupling efficiency of conventional OLEDs with flat interfaces between various layers is significantly limited due to the total internal reflection (TIR). TIR prevents the emitted light within the OLED device to escape from the high-refractive-index device materials to the low-index surrounding through waveguiding affects and absorption. For glass, the TIR angle is about 40°, which means that no light emitted at an angle higher than this can escape the device.



Fig. 1: Scattering of light by periodically structured layers.

To increase the outcoupling efficiency, scattering layers or scattering interfaces can be introduced into OLED stacks. These can be, for example, layers containing nanoparticles or surface nanostructures. Light emitted in directions above the TIR will be scattered at these interfaces and can eventually leave the device. To evaluate the enhancement of the outcoupling efficiency, it is essential to determine the bidirectional scattering distribution functions (BSDFs) of differently prepared scattering layers.

With our light-scattering setup we can measure the angular dependence of the transmission and reflection from the samples at various incidence angles. Both the detector and the sample can be arbitrarily rotated around the vertical axis using rotational stages. The dynamic range for the detection is up to six orders of magnitude without using a lock-in amplifier. The overall angular resolution is about 0.5° . To measure the transmission from the substrate-air scattering interfaces above the TIR angle, we can attach a hemispherical lens on one or both sides of the sample. As shown in Fig. 2, we can clearly observe light transmission above the TIR for plates with a rough surface, which overcomes the limit of the Snell's law of refraction.



Fig. 2: (a) Angular transmission distribution of light passing a rough glass-air interface for different internal angles of incidence when using a hemispherical lens. (b) The peak transmission angle (solid squares) versus the internal angle of incidence for the measurements shown in (a). The solid line is according to the Snell's law for a flat glass sample and the dotted line presents the TIR limit, which also limits the measurements without the hemispherical lens (open circles).

Together with our partner Fluxim AG we are developing different theoretical models to be able to describe the measured scattering distributions and further optimize the scattering structures. This approach also allows us to predict the outcoupling efficiency of OLED stacks modified by scattering layers/interfaces for further advances in OLED technology.

Zürcher Fachhochschule

3.4 Optoelectronic Modeling of Hematite Photoelectrodes

Hydrogen is one of the main candidates for renewable energy storage, because it is an excellent and clean fuel. A promising method for hydrogen production is a photoelectrochemical (PEC) solar cell. ICP developed a physical model for the model-based characterization of optical and electrical losses of PEC cells.

P. Cendula, L. Steier, S. David Tilley, M. Schmid, M. Graetzel, J. Schumacher
Laboratory of Photonics and Interfaces (EPFL)
SNSF, Swiss Federal Office of Energy
2012–2014

A PEC solar cell absorbs light and produces hydrogen and oxygen instead of electricity. In the last year of the project, we focused on optical modeling of the light propagation in typical PEC cells and quantified the optical losses in the individual layers, which are not directly measurable in experiments.

Light propagation and absorption in the coherent layers is treated with the transfer-matrix method and in the incoherent layers by ray-tracing geometrical optics. The energy conservation is fulfilled during optical modeling and it holds $R_{tot}(\lambda) + \sum_{l} A_{l}(\lambda) + T_{tot}(\lambda) = 1$, where R_{tot} is the total reflectance, A_{l} denotes absorptance of layer l and T_{tot} is the total transmittance. The optical constants of the individual layers of the photoelectrode were determined by a combination of literature values and parameter extraction from spectroscopic ellipsometry and UV-Vis spectroscopy.

We validated our optical model with UV-Vis measurements on a test PEC layer stack (Quartz, Water, Hematite, TiO₂, Quartz) at EPFL, Figure 1. The transmittance of this test stack is \approx 0.4 for 300 nm < λ < 400 nm wavelengths and it increases to \approx 0.9 at λ =700 nm as a consequence of light absorption in the hematite in this wavelength range.



Fig. 1: Comparison of measured (black) and fitted (red) reflectance and transmittance of 12 nm ALD hematite in the test stack, front illumination.

The reflectance of the test stack is \approx 0.2 for 300 nm < λ < 600 nm and then decreases to \approx 0.1 at λ =800 nm due to the large mismatch of refractive indices at the water/hematite interface.

Having validated our optical model with measurements, we investigated the optical propagation in the PEC cell as used for photocurrent measurements at LPI EPFL. Valuable insight into the optical losses in the individual layers is presented in Figure 2. The absorptance in hematite is \approx 0.4-0.5 for 300 nm < λ < 400 nm, afterwards decreasing to zero near λ =600 nm (absorption edge). Nearly constant absorption loss of \approx 0.1 can be seen for FTO over the whole wavelength range and the glass absorption is largest for λ < 350 nm (up to \approx 0.2) and for λ > 600 nm. The absorption in water and quartz is negligible in the presented data.



Fig. 2: Detailed optical loss analysis of a PEC cell for front illumination. The calculated total reflectance, the absorptance in each layer and the total transmittance are stacked and colored in the graphs.

The wavelength-dependent quantification of optical losses in PEC cells allows for detailed optimization of optical absorption in multilayered PEC cells. In the follow-up work, the charge carrier generation rate calculated by the optical model is used in the electrical model and enables an accurate description of the photoelectrode performance.

3.5 Dotierung von organischen Solarzellen

Das Verständnis der physikalischen Prozesse in organischen Solarzellen ist für deren Weiterentwicklung fundamental. Im Rahmen eines SNF-Projekts untersuchte das ICP deshalb gemeinsam mit der EMPA die Auswirkungen von Dotierung auf die Effizienz sowie die Stabilität in diesen Zellen.

Contributors:S. Jenatsch, C. Kirsch, B. RuhstallerPartners:ICBC, EMPA, Fluxim AGFunding:SNSFDuration:2013–2015

Die Synthese von Materialen und deren Anwendung bei Solarzellen ist ein zentrales Forschungsthema der Gruppe Funktionale Polymere an der EMPA. Diese Solarzellen bestehen typischerweise aus einem Schichtsystem mit Elektronakzeptor und -donor, die beide jeweils zwischen 10 und 100 nm dick sind. Die schlechten elektrischen Transporteigenschaften der organischen Schichten limitieren die Schichtdicken häufig drastisch. Dies kann problematisch werden wenn grössere Flächen benötigt oder raue Substrate, z. B. Metalldrähte in Plastikfolien, verwendet werden, da die Wahrscheinlichkeit für Löcher und Kurzschlüsse höher wird. Aus diesen Gründen untersuchten wir den Effekt von Dotierung auf die organischen Schichten sowie auf die Leistung der Solarzelle.

Durch die Variation der aktiven Schicht zwischen 10 und 70 nm konnten wir zeigen dass die Reproduzierbarkeit für dicke Filme zunimmt. Wie erwartet sinkt dabei aber der Füllfaktor, ein Wert zur Eruierung des Ladungstransports, drastisch mit Zunahme der Schichtdicke, was sich negativ auf die Effizienz auswirkt. Hier konnten wir mit der Dotierung der photoaktiven Schicht gute Ergebnisse er-

zielen. Der Füllfaktor bleibt für die gedopten Zellen auch für Filmdicken bis 70 nm sehr hoch. Allerdings hat die Dotierung einen negativen Effekt auf den Strom, was sich durch eine erhöhte Rekombination von Ladungsträgern erklären lässt. Gesamthaft gesehen ist die Dotierung somit nur effektiv, wenn dicke Filme >50 nm benötigt werden. Diese Untersuchungen wurden unterstützt und bestätigt durch ein neu in SETFOS implementiertes Simulationsmodell für Zweischichtsolarzellen. Weitere Untersuchungen zu diesem Thema konzentrierten sich auf die Stabilität des dotierten organischen Halbleiters. Diese Untersuchungen sind nicht nur interessant im Hinblick auf die Stabilität von Solarzellen, sondern liefern auch wichtige Anhaltspunkte für das Verständnis von Degradationspfaden in Lichtemittierenden Elektrochemi-

schen Zellen (LEC). In diesen Zellen sind dotierte Spezies natürlicherweise vorhanden, und die Stabilität dieser Spezies ist direkt verbunden mit der Stabilität der LEC.

Literatur:

[1] S. Jenatsch et al., Sci. Technol. Adv. Mater., 2015



Abb. 1: Experimentelle und simulierte Strom-Spannungs-Kennlinien für verschiedene Schichtdicken.

Zürcher Fachhochschule

3.6 Numerical Simulation of Stacked OLEDs and Solar Cells

In this project we investigate charge transport in organic semiconductor devices with the aid of a numerical 1D model. The novel aspect is the inclusion of the heat equation into the model to describe self-heating of the device structure.

E. Knapp, B. Ruhstaller
SNSF
2014-2016

The role of self-heating of small organic LEDs has so far been clearly underestimated. In this project we analyze the effect of self-heating on the organic semiconductor device performance with the aid of a numerical model. We couple the commonly used drift-diffusion model with the heat equation and consider thereby heat generated by Joule heat in the organic semiconductor layer. We show that self-heating of the device leads to negative capacitance values at low frequencies and high bias as also observed in measurements [1].

In Fig. 1, we investigate the transient current density response of a single carrier device with trap states to a small voltage step. The upper picture shows a hole-only device at a constant device temperature of 300 K. Depending on the trapping capture rate different decay shapes are obtained. In the lower picture we simulate the same device again, but we allow for self-heating of the structure. At around 10^{-2} s the device is heating up. This process is competing with the trapping decay and will eventually lead to an increased current density compared with the upper simulation.

We can also observe self-heating in impedance spectroscopy. The upper picture in Fig. 2 shows the influence of trap states on the capacitance at a constant device temperature. We see an increased capacitance at low frequency due to the trapping dynamics whereas self-heating decreases the value of the normalized capacitance at low frequency as displayed at the bottom of Fig. 2. Again, we observe that the trapping dynamics and its time scale change the shape of the capacitance curve in both pictures.

The results show that self-heating plays a major role, even in small organic semiconductor devices. For an accurate description of an organic semiconductor device heat conduction has to be included in the model.



Fig. 1 The responses to a voltage step of a hole-only device are displayed for different capture rates. Top: The device has a constant device temperature. Bottom: The device shows self-heating effects and therefore an increased current density.



Fig. 2 Frequency-dependent capacitance for a device at constant device temperature (top) and a device with self-heating (bottom). Trapping increases the capacitance at low frequency while self-heating lowers the capacitance.

Literature: [1] H. Okumoto, T. Tsutsui, Appl. Phys. Express 7, 061601, 2014.

3.7 Verbesserte Farbstoffsolarzellen für Hausfassaden

Die schweizerische Firma Glass2Energy (G2E) produziert Glasfassaden mit integrierten Farbstoffsolarzellen. In diesem KTI-Projekt sollen die Farbstoffsolarzellenmodule von G2E mit der am ICP entwickelten Simulationssoftware PECSIM in ihrer Effizienz und ihrem Design verbessert werden.

Contributors:	M. Schmid, J. Schumacher
Partners:	Glass2Energy SA, CSEM Alpnach, HEIG-VD, ISAAC-SUPSI
Funding:	KTI
Duration:	2015–2016

Die Farbstoffsolarzelle wurde 1991 an der EPF Lausanne entwickelt. Die Vorteile der Farbstoffsolarzelle sind die attraktiven Designmöglichkeiten (verschiedene Farben, Transparenz) und die verschiedenen Einsatzmöglichkeiten, zum Beispiel als Glasfassadenelemente oder als transparente Verglasungen im Inneren von Räumen, s. Abb. 1.



Abb. 1: Farbstoffsolarzellenmodule unseres Industriepartners G2E im Flughafen Genève. Quelle: http://www.g2e.ch.

Die grossflächige Markteinführung dieser Technologie ist bisher unter anderem an der im Vergleich zu konventionellen Silizium-Solarzellen niedrigeren Effizienz gescheitert. Ungefähr 50% der Effizienz verliert man bei der Aufskalierung von einer kleinen Laborzelle (1 cm²) zum Modul ($60 \times 100 \text{ cm}^2$). Um diesen Effizienzverlust zu verkleinern, ist eine quantitative Analyse der Energieverluste im Farbstoffsolarzellenmodul notwendig. Zu den grössten Verlusten gehören Wärmeverluste in den transparenten Oxidschichten der Elektroden, optische Verluste wie Reflexion und parasitäre Absorption, sowie schlechtes Matching der Zellströme bei der seriellen Verschaltung der Einzelzellen zum Modul.

In diesem KTI-Projekt wird die am ICP entwickelte Software PECSIM für die Simulation von Farbstoffsolarzellen weiterentwickelt und auf die Farbstoffsolarzellenmodule von G2E angepasst. Diese neue Software wird dann zur Simulation der Module von G2E eingesetzt werden. Mit den durchgeführten Simulationen wird eine detaillierte Analyse der Energieverluste der Solarmodule erstellt, und so können Wege zur Verbesserung der Solarmodule von G2E aufzeigt werden, s. Abb. 2.



Abb. 2: Schematisch dargestellte Energieverluste in einer Farbstoffsolarzelle (links) und deren Entsprechung im Energiediagramm (rechts).

Die Simulationen dienen auch dazu, die idealen Konfigurationen von Materialien für die verschiedenen Modultypen (Indoor/Outdoor, verschiedenfarbige Module, unterschiedliche Fassadenausrichtung) zu ermitteln. Schliesslich sollen für die Qualitätskontrolle mit der Software auch statistische Abweichungen in der Effizienz der produzierten Module diagnostiziert werden.

3.8 Degradation Analysis of Organic Solar Cells

The direct conversion of sunlight into electricity using solar cells is a key technology for the sustainable energy supply of the future. Thin film solar cells are the fastest growing branch of the booming photovoltaic market. This project addresses stability issues of the different thin film technologies.

Contributors:	S. Züfle, B. Ruhstaller
Partners:	CSEM, Fluxim AG
Funding:	Swisselectric Research, Fluxim AG
Duration:	2012–2014

Organic solar cells are unstable under ambient conditions without encapsulation. Usually the ingress of water through the hole transport layer is an important reason for device failure. In order to understand the dominant degradation process, we analyzed standard P3HT:PCBM organic solar cells with varying hole transport materials. All the devices were fabricated at CSEM using newly developed solution-processed metal oxides as alternative hole transport materials. We find that cells with the hygroscopic PEDOT:PSS are least stable, with T80 times of only 5 minutes under accelerated conditions.

In order to find out the dominant degradation mechanism, we exploit various complementary measurement techniques, that were performed insitu during aging with the newly developed measurement system Paios by Fluxim. Thus transient measurements such as Transient Photocurrent and CELIV (charge extraction by linearly increasing voltage), steady-state techniques like Current-Voltage curves and impedance techniques such as Capacitance-Voltage were performed. All these data are available for all techniques at various times of degradation, giving a very systematic dataset. From the data analysis it seems conceivable that the in-diffusion of water leads to the buildup of an insulating aluminum oxide interface, which blocks charge transport. Using the complementary techniques we can also rule out other effects such as doping or traps being dominant.

In a second step we employ the numerical driftdiffusion simulation tool Setfos in order to reproduce all the different experiments with one single set of material parameters. The interface can be included as an energy barrier for electron and hole transport. In the transient photocurrent shown in the Figure this barrier leads to a build-up of charges at the interface, screening the built-in field and thus completely diminishing the photocurrent. Using the simulation we can show that under accelerated aging conditions the water diffusion into the device does not occur homogeneously, but laterally from the edges. This leads to an effective area loss of the cell proportional to the loss in photocurrent. Using a mathematical model we can reproduce the experimentally obtained decay law, when taking only diffusion from the edges into accout. Diffusion through pinholes only would lead to a different decay of the photocurrent.



Fig. 1: Transient photocurrent of an organic solar cell during accelerated aging, stressed and measured by Paios.

3.9 Modellbasierter Reglerentwurf für die Temperaturregelung eines Kryostaten

In der Grundlagenforschung müssen Bauteile oft auf -150°C oder tiefer gekühlt werden, um Eigenschaften zu messen die es ermöglichen, genaue Modelle der physikalischen Vorgänge abzuleiten. Dafür werden spezielle Kühlgeräte, so genannte Kryostaten, verwendet. In dieser Arbeit wurde ein modellbasierter Regler entwickelt, der die Temperatur eines Kryostaten zur Kühlung der untersuchten Bauteile exakt regelt.

Students: P. Büchel, N. Nyffeler

Category: Semesterarbeit Mentoring: K. Pernstich, O. Fluder (IMS) Handed In: Dezember 2014

Am ICP wird im Rahmen eines KTI-Projektes ein Kryostat entwickelt, mit dem sich organische Leuchtdioden und Solarzellen auf Temperaturen unter -150°C abkühlen lassen, während man die elektrischen und optischen Eigenschaften der Proben misst. Bisher wurde ein handelsüblicher Regler eingesetzt, der einerseits teuer ist und andererseits die gewünschten Anforderungen bzgl. Temperaturstabilität nur unzufriedenstellend erfüllt.

Im Rahmen dieses Projekts sollte ein modellbasierter Temperaturregler entworfen und in Lab-View implementiert werden. Dazu wurde ein mathematisches Modell des Kryostaten entwickelt, welches sein Temperaturverhalten bei gegebener Kühlleistung gut reproduziert. Basierend auf diesem Modell konnte mit Matlab-Simulink ein Regler entworfen werden. Dieser Regler besteht aus einem erweiterten PI-Regler, welcher als diskreter Regler in LabView aufgebaut und getestet wurde. Abb. 1 zeigt den Soll- und Istwert der Temperatur während eines Sprungs im Sollwert. Man erkennt, dass der Regler die Kryostat-Temperatur ohne Überschwingen auf den gewünschten Wert einstellen und die Temperatur auf 0.07°C genau regeln kann. Diese Regelgenauigkeit übertrifft die gestellten Anforderungen bei Weitem.

Die gewonnenen Erkenntnisse führten zu Vorschlägen für ein verbessertes Design des Kryostaten. Erste Messungen am neuen Prototypen verliefen sehr vielversprechend.



Abb. 1: Sollwert und Istwert der Kryostat-Temperatur. Die gewünschte Temperatur wird ohne Überschwingen erreicht, und auf 0.07°C genau geregelt.

3.10 Berechnung des Lichtstreuverhaltens von rauen Schichten in OLEDs

Um die Effizienz von organischen Leuchtdioden zu erhöhen, kommen in modernen OLEDs vermehrt Streuschichten zum Einsatz. Um bereits vor der Produktion simulieren zu können, wie sich eine spezifische Streuschicht auf das Auskopplungsverhalten einer OLED auswirkt, wurden entsprechende Module in die Simulationssoftware Setfos integriert.

Students: K. Lapagna

Category: Master of Science in Engineering Mentoring: B. Ruhstaller Handed In: Februar 2015

Eine OLED (Organic Light Emitting Diode - organische Leuchtdiode) ist ein leuchtendes Dünnschichtbauelement aus organischen, halbleitenden Materialien. Herkömmliche OLEDs bestehen aus verschiedenen dünnen, aufeinanderliegenden, planaren Schichten. Aufgrund dieser planaren, also vollkommen flachen, Schichtstruktur kann optische Totalreflexion auftreten: Licht welches in einem grösseren als dem kritischen Winkel auf die Grenzfläche zwischen einem Medium mit hohem und einem Medium mit niedrigerem Brechungsindex trifft - zum Beispiel von Glas zu Luft wird komplett reflektiert. In OLEDs führt dieser Effekt dazu, dass ein grosser Teil des in der Leuchtschicht erzeugten Lichts seitlich weggeleitet oder bereits im Bauelement wieder absorbiert wird. Das Licht bleibt also in der OLED gefangen anstatt in die Umgebung ausgekoppelt zu werden.

Um diesem Problem entgegen zu wirken werden Techniken entwickelt, Licht innerhalb der OLED in vorteilhaftere Winkel abzulenken, die unter dem kritischen Winkel liegen. Das führt dazu, dass mehr Licht die verschieden Schichten passieren und schlussendlich die OLED als sichtbares Licht verlassen kann. Eine Möglichkeit dies zu erreichen ist es, die Oberflächen einer oder mehrerer Schichten aufzurauen. Die raue Grenzfläche streut einfallendes Licht bei der Reflexion und Transmission in verschiedene Winkel ab. Selbst wenn das Licht dabei in unvorteilhafte Winkel gestreut wird, besteht mit jedem neuen Streuvorgang die Chance, in einem günstigeren Winkel zu landen, um die OLED letztendlich zu verlassen.

In dieser Masterarbeit ging es darum, für die optoelektronische Simulationssoftware Setfos neue Module zu programmieren und zu integrieren, welche die Streueigenschaften rauer Oberflächen berechnen können. Die Module beruhen auf Anwendungen der Fourier- und Mikrotextur-Streutheorie. Dank dieser Module ist es nun möglich, aus gemessenen 3D-Strukturen von rauen Oberflächen Rückschlüsse zu ziehen, ob und wie stark sich die Lichtauskopplung einer OLED dadurch verbessert. Die Messungen der Oberflächentextur wurden mittels Atomic Force Microscopy und Optical Focus Variation durchgeführt. Weitere Messresultate wurden mit einem eigens zu diesem Zweck konstruierten Messaufbau am ICP gewonnen. Für diese Streumessungen wurden Glasproben mit aufgerauter Oberfläche mit einem Laser bestrahlt. Mit einer Photodiode wurde dann gemessen, wie stark und in welche Winkel der Laserstrahl gestreut wurde. Diese Messungen zeigten gute Übereinstimmung beim Vergleich mit den Simulationsresultaten.



Abb. 1: Beispiel einer virtuell generierten rauen Oberfläche, welche als Input für die Streusimulation dient.

3.11 Verstärkerschaltung für transiente Messung an Solarzellen

In der Erforschung von organischen Solarzellen wird seit Kurzem eine neue Messmethode eingesetzt, um die Details des Ladungsträgertransportes besser zu verstehen. In dieser Arbeit wurde ein Hochfrequenzverstärker mit variablem Eingangswiderstand entworfen, um dieses neue Messverfahren auch im hauseigenen Labor einzusetzen und weiter zu verbessern.

Students: D. Oelen, S. Zoller

Category: Bachelor of Science Mentoring: K. Pernstich, H. Hochreutener (ZSN) Handed In: Dezember 2014

Solarzellen auf Basis von organischen (kohlenstoff-basierten) Halbleitern stellen eine nachhaltige Erzeugung von elektrischer Energie in Aussicht, auch wenn die Wirkungsgrade solcher Solarzellen noch kleiner sind als jene von handelsüblichen, anorganischen Solarzellen. Dies liegt vor allem am geringen Energieaufwand während der Produktion und der Möglichkeit, solche Solarzellen in grossen Mengen herzustellen und zu installieren.

Die physikalischen Vorgänge in organischen Solarzellen sind sehr komplex und nur schwierig zu untersuchen. Im vergangenen Jahr wurde in einer Veröffentlichung [1] ein neues Messverfahren vorgestellt, bei dem ein sehr kurzer Laserpuls auf die Solarzellen gerichtet wird, während man das zeitliche Abklingen der Ausgangsspannung misst. Die Änderung dieser abklingenden Ausgangsspannung bei verschiedenen Lastwiderständen lässt Rückschlüsse auf die physikalischen Vorgänge in den Solarzellen zu.

In diesem Projekt wurde ein Hochfrequenzverstärker entwickelt, welcher die Ausgangsspannung der Solarzellen mit einem veränderbaren Lastwiderstand messen kann. Dazu wird der Eingangswiderstand der Schaltung von ca. 1 Ω bis über $10^{11} \Omega$

verändert. Gleichzeitig muss die Bandbreite des Verstärkers über 100 MHz liegen. Diese Vorgaben verlangen ein sehr durchdachtes Schaltungsdesign, um parasitäre Kapazitäten zu minimieren, welche die Bandbreite herabsetzen würden.

Abb. 1 zeigt das gemessene Frequenzverhalten des Verstärkers bei einem Eingangswiderstand von $10^{11} \Omega$. Erst ab $179 \,\mathrm{MHz}$ beginnt das Frequenzverhalten abzufallen, die geforderten Spezifikationen werden also mehr als erfüllt.

Transn	n(P2▶1) S	calar					26/11/	/14 15	:38
參.	Ref: 6.0 dE Att: 0 dB	3	RBW	: 10 kH	z S Ti	NT: 15 s rig: Free f	Tra Run Dem	ice: Cle tect: Sa	aar/Writ mple
M1 D3	68.7397 M 86.5063 M	lHz lHz	0.85 dB 0.19 dB		M2 M4	113.9556 178.9762	MHz -0 MHz -0).45 dB).07 dB	
4.0 —		MD						S12 (no	orm) Mag
2.0 —				12)					
0.0				/	03	-			
-2.0 —									
-4.0									
-8.0									
-10.0 _									
-12.0 _									
Start	1 MHz					Stop:	300 MH	z	
Sa	ve	Recall						N	File

Abb. 1: Gemessener Frequenzgang des Verstärkers.

Literatur:

derstand der Schaltung von ca. 1Ω bis über $10^{11} \Omega$ [1] Phillipa et al., Scientific Reports 4, 5695, 2014.

Appendix

A.1 Student Projects

D. BENZ, N. HÄNI, *ICE-LED Video Multi-Cluster mit Redundanz*, Betreuer: N. Reinke, A. Bariska, Projektarbeit Elektrotechnik.

B. BIGLER, F. MATHYS, *Early-stage skin cancer detection with active thermography*, Betreuer: M. Bonmarin, N. Reinke, A. Bariska, Bachelor Thesis.

P. BÖSCH, Q. METTRAUX, *Automatic skin cancer detection*, Betreuer: M. Bonmarin, Lorenz Holzer, Firmenpartner: Dermolockin GmbH, Projektarbeit Systemtechnik.

M. BOLDRINI, S. ZANGERL, *Simulation von hochfrequenten Dosiervorgängen mittels OpenFoam*, Betreuer: G. Boiger, Firmenpartner: Novartis Pharma AG, Basel, Projektarbeit Maschinentechnik.

P. BÜCHEL, N. NYFFELER, *Modellbasierte Temperaturregelung eines Kryostaten*, Betreuer: K. Pernstich, O. Fluder, Firmenpartner: Fluxim AG, Projektarbeit im Fach System- und Automatisierungstechnik 1.

M. DOLD, *Transmission-Line-Modell zur Analyse von Impedanzspektren von Hochtemperatur-Brennstoffzellen mit Ni/YSZ-Anoden*, Betreuer: T. Hocker, M. Linder, Firmenpartner: Hexis AG, Winterthur, Vertiefungsarbeit Master of Science.

CH. HABLÜTZEL, J. SIMMEN, *Weiterentwicklung eines Experimentalholzvergasers*, Betreuer: G. Boiger, Firmenpartner: Berchtold Apparatebau AG, Thalwil, Projektarbeit Maschinentechnik.

M. JAROLIN, *The theoretical investigation of charge transport in photoelectrochemical electrode with surface states*, Advisors: P. Cendula, R. van de Krol, U. Woggon, Bachelor Thesis in physics, TU Berlin.

V. LAM, *Modellgestützte, thermo- fluiddynamische Entwicklungen im Bereich Hochtemperatur-Brennstoffzellen*, Betreuer: G. Boiger, Firmenpartner: Hexis AG, Winterthur, Vertiefungsarbeit Master of Science.

K. LAPAGNA, Calculation of Light Scattering Distribution Functions based on Fourier and Microfacets Methods for 3D Textures, Betreuer: Beat Ruhstaller, Master Thesis MSE.

F. MÜLLER, *Application Software for Large-Area Modeling of Photovoltaics and OLEDs*, Betreuer: B. Ruhstaller, Master Thesis MSE.

D. OELEN, S. ZOLLER, *Verstärkerschaltung für transiente Messung an Solarzellen*, Betreuer: K. Pernstich, H. Hochreutener, Firmenpartner: Fluxim AG, Projektarbeit Elektrotechnik.

T. OTT, C. RITSCHARD, *Entwicklung, Konstruktion und Inbetriebnahme eines Experimentalholzvergasers*, Betreuer: G. Boiger, A. Fassbind, C. Meier, Firmenpartner: Berchtold Apparatebau AG, Thalwil, Projektarbeit Maschinentechnik. M. SCHWEIZER, T. MESAREC, *Modellierung von Pulverbeschichtungsvorgängen*, Betreuer: G. Boiger, Firmenpartner: Winterthur Instruments, Winterthur, Projektarbeit Maschinentechnik.

A. SIBILIA, *Vibration Compensation Systems for Wavelength Scanning Interferometry*, Advisors: M. Haydn, B. Ruhstaller, Master Thesis MSE.

A. SIDLER, *Konstruktion einer Küvette zur Detektion von Fasern und Partikeln*, Betreuer: G. Boiger, M. Linder, Firmenpartner: Mann+Hummel, Ludwigsburg, Projektarbeit Maschinentechnik.

L. STEPANOVA, *3D ray tracing algorithm for light outcoupling from microstructured OLEDs*, Advisors: C. Kirsch, R. Knaack, B. Ruhstaller, Master Thesis EPFL.

M. SUTER, *Study of the cooling of cocoa butter and chocolate by modeling and simulation techniques*, Betreuer: T. Hocker, Master Thesis MSE.

A.2 Scientific Publications

G. BOIGER, *A thermo fluid dynamic model of wood particle gasification and combustion processes*, Int. J. of Multiphysics, Vol. 8, No.2, 203–230, 2014.

M. BONMARIN, FA. LE GAL, Lock-in thermal imaging for the early-stage detection of cutaneous melanoma: A feasibility study, Computers in Biology and Medicine, 47, 36–43, 2014.

M. BONMARIN, FA. LE GAL, *A lock-in thermal imaging setup for dermatological applications*, Skin Research and Technology, 47, 2014.

M. CANTONI, L. HOLZER, *Advances in 3D focused ion beam tomography*, MRS Bulletin 39, 354–360, 2014.

P. CENDULA, S. DAVID TILLEY, S. GIMENEZ, J. BISQUERT, M. SCHMID, M. GRAETZEL AND J. SCHUMACHER, *Calculation of the Energy Band Diagram of a Photoelectrochemical Water Splitting Cell*, J. Phys. Chem. C, 118 (51), 29599–29607, 2014.

P. CENDULA, A. MALACHIAS, CH. DENEKE, S. KIRAVITTAYA, O. G. SCHMIDT, *Experimental realization of coexisting states of rolled-up and wrinkled nanomembranes by strain and etching control*, Nanoscale, 6 (23), 14326–14335, 2014.

M. ECK, C.V. PHAMA, S. ZÜFLE, M. NEUKOM, M. SESSLER, D. SCHEUNEMANN, E. ERDEM, S. WEBER, H. BORCHERT, B. RUHSTALLER, M. KRÜGER, *Improved Efficiency for Bulk Heterojunction Hybrid Solar Cells by utilizing CdSe Quantum Dot - Graphene Nanocomposites*, Phys. Chem. Chem. Phys., 16, 12251–12260, 2014.

L. C. C ELLIOT, J. I. BASHAM, K. P. PERNSTICH, P. R. SHRESHTA, L. J. RICHTER, D. M. DE-LONGCHAMP, D. J. GUNDLACH, *Probing Charge Recombination Dynamics in Organic Photovoltaic Devices under Open-Circuit Conditions*, Adv. Energy Mater., 4 (15), 1400356, 2014.

G. GAISELMANN, M. NEUMANN, V. SCHMIDT, O. PECHO, T. HOCKER, L. HOLZER, *Quantitative relationships between microstructure and effective transport properties based on virtual materials testing*, Journal of the American Institute of Chemical Engineers 60, 1983–1999, 2014.

S. JENATSCH, R. HANY, A.C. VERON, M. NEUKOM, S. ZÜFLE, A. BORGSCHULTE, B. RUH-STALLER, F. NÜESCH, *Influence of Molybdenum Oxide Interface Solvent Sensitivity on Charge Trapping in Bilayer Cyanine Solar Cells*, J. Phys. Chem. C, 118 (30), 17036–17045, 2014. L. KELLER, A. SEIPHOORI, P. GASSER, F. LUCAS, L. HOLZER, A. FERRARI, *The pore structure oc compacted and partly saturated MX-80 bentonite at different dry densities*, Clay and Clay Minerals, 62, 174–187, 2014.

L. KELLER, M. JOBMANN, P. SCHUETZ, P. GASSER, *On the Potential of Tomographic Methods when applied to Compacted Crushed Rock Salt*, Transport in Porous Media, 104, 607–620, 2014.

M. LINDER, T. HOCKER, L. HOLZER, A. K. FRIEDRICH, B. IWANSCHITZ, A. MAI, J. A. SCHULER, *Model-based prediction of the ohmic resistance of metallic interconnects from oxide scale growth based on scanning electron microscopy*, J. Power Sources, 272, 595–605, 2014.

Y. SAFA, T. HOCKER, M. PRESTAT, A. EVANS, *Post-buckling design of thin-film electrolytes in micro-solid oxide fuel cells*, Journal of Power Sources, 250, 332–342, 2014.

Y. SAFA, T. HOCKER, *A validated energy approach for the post-buckling design of micro-fabricated thin film devices*, Applied Mathematical Modelling, 39, 483–499, 2015.

A.3 News Articles

B. Bhend, G. Boiger, Koryphäe des Flugzeugbaus besucht ZHAW School of Engineering, www.engineering.zhaw.ch, September, 2014.

T. Ott, C. Ritschard, C. Meier, A. Fassbind, G. Boiger, Mit Bachelorarbeit technischen Meilenstein gesetzt, Zürcher Unterländer, Oktober, 2014.

A.4 Conferences and Workshops

S. ALTAZIN, K. LAPAGNA, T. LANZ, C. KIRSCH, R. KNAACK, B. RUHSTALLER, *Design Tool for Light Scattering Enhancement in OLEDs*, SID Symposium Digest of Technical Papers, San Diego, 2014.

J.I. BASHAM, L.C.C. ELLIOTT, K.P. PERNSTICH, D.M. DELONGCHAMP, T.N. JACKSON, D.J. GUND-LACH, *Impedance Spectroscopy and Large Perturbation Transient Photovoltage: Measurement Methods for Recombination Dynamics in Organic Photovoltaics*, SPIE Optics + Photonics 2014, San Diego, 2014.

G. BOIGER, *System Dynamic Modelling Approach for resolving the Thermo Chemistry of Wood Gasification*, 9th Int. Conference of Multiphysics, Sofia, 2014.

B. BRANK, M. JUKIC, S. PICULIN, A. STANIC, J. DUJC, *Finite element modeling of damage and fracture in concrete and metal structural elements*, First world conference on fracture and damage mechanics, Kottayam, 2014.

P. CENDULA, J. SCHUMACHER, *Numerical Modeling of Photoelectrochemical Cells for Solar Hydrogen Production*, 11th Symposium on Modeling and Experimental Validation of Fuel Cells and Batteries, Winterthur, 2014.

P. CENDULA, J. SCHUMACHER, *Modeling of Optical and Electrical Losses in Photoelectrochemical Cells*, International Conference on New Advances in Material Research for Solar Fuels Production, Montreal, 2014.

P. CENDULA, J. SCHUMACHER, Photoelectrochemical Cells: Energetic configuration of the semiconductor/electrolyte interface, Electrochemical Interfaces: Recent Topics and Open Questions,

Zürcher Fachhochschule

Berlin, 2014.

J. DUJC, J. SCHUMACHER, A multi dimension approach for fast analysis of Polymer Electrolyte Membrane Fuel Cells, The European Hydrogen Energy Conference, Sevilla, 2014.

J. DUJC, J. SCHUMACHER, *A multi-dimensional model to analyze large-area PEM fuel cells*, 11th Symposium on Fuel Cell and Battery Modeling and Experimental Validation, Winterthur, 2014.

J. DUJC, L. CAPONE, J. SCHUMACHER, J. BIESDORF, P. BOILLAT, *Computer simulation of liquid water saturation in porous media of fuel cells*, The European Hydrogen Energy Conference, Sevilla, 2014.

J. DUJC, B. BRANK, A. IBRAHIMBEGOVIC, *Coupling of shell and beam computational models in failure analysis of steel frames*, Shell structures: theory and applications: proceedings of the 10th SSTA Conference, Gdańsk, 2014.

T. HOCKER, *Abkühlung von Schokolade – Experimente und Simulation*, Invited Talk, Arbeitskreis-Schoko Meeting, ETH-Zürich, 2014.

T. HOCKER, *Projekt-Beispiele thermisches Management und mikrostrukturierte Materialien*, Invited Talk, Innovationsgruppe Kaffee Meeting, ZHAW-Wädenswil, 2014.

L. HOLZER, T. HOCKER, M. PRESTAT, O. PECHO, R. J. FLATT, G. GAISELMANN, M. NEUMANN, B.IWANSCHITZ, Unraveling microstructure effects in Ni-YSZ anodes by 3D-analysis, FE-simulation and experimental characterization, 11th European SOFC & SOE Forum, Lucern, 2014.

S. JENATSCH, R. HANY, A VÉRON, M. NEUKOM, S. ZÜFLE, B. RUHSTALLER, F. NÜESCH, *Solvent Effect on Charge Transport in Cyanine/C*₆₀ *Bilayer Solar Cells*, Dursol, Winterthur, 2014.

S. JENATSCH, R. HANY, A. BORGSCHULTE, A. VÉRON, M. NEUKOM, S. ZÜFLE, B. RUHSTALLER, F. NÜESCH, *Influence of molybdenum oxide interface solvent sensitivity on charge trapping in bilayer cyanine solar cells*, EMRS Spring Meeting, Lille, 2014.

S. JENATSCH, R. HANY, A. BORGSCHULTE, A. VÉRON, M. NEUKOM, S. ZÜFLE, B. RUHSTALLER, F. NÜESCH, *Influence of molybdenum oxide interface solvent sensitivity on charge trapping in bilayer cyanine solar cells*, SimOEP, Mallorca, 2014.

S. JENATSCH, R. HANY, A. BORGSCHULTE, A. VÉRON, M. NEUKOM, S. ZÜFLE, B. RUHSTALLER, F. NÜESCH, *Influence of molybdenum oxide interface solvent sensitivity on charge trapping in bilayer cyanine solar cells*, EMPA PhD Symposium, St. Gallen, 2014.

L. KELLER, *Pore space relevant for gas transport in Opalinus Clay-Homogeneity,Percolation and Capillary Properties*, Fourth EAGE Shale Workshop, Porto, 2014.

E. KNAPP, B. RUHSTALLER, *Description of Charge Transport in Time-Dependent Measurements of Organic Semiconductor Devices*, International Conference on Simulation of Organic Electronics and Photovoltaics, Mallorca, 2014.

T. LANZ, *Design Tools for Light Scattering Enhancement in OLEDs*, Internatl. Congress on Printed Electronics, Munich, 2014.

M. LINDER, T. HOCKER, L. HOLZER, A. K. FRIEDRICH, B. IWANSCHITZ, A. MAI, J. A. SCHULER, *Effects of Cr*₂O₃ *layer morphology on SOFC-interconnect resistance*, 11th Symposium for Fuel Cell and Battery Modeling and Experimental Validation - ModVal 11, Winterthur, 2014.

M. LINDER, T. HOCKER, L. HOLZER, A. K. FRIEDRICH, B. IWANSCHITZ, A. MAI, J. A. SCHULER, *Quantifizierung und Charakterisierung der Stromsammler Degradation im Brennstoffzellenstapel*,

www.zhaw.ch

Jahrestreffen der ProcessNet-Fachgruppe Energieverfahrenstechnik, Karlsruhe, 2014.

M. LINDER, T. HOCKER, L. HOLZER, A. K. FRIEDRICH, B. IWANSCHITZ, A. MAI, J. A. SCHULER, *Oxide* (*Cr*₂*O*₃) scale growth on metallic interconnects and its impact on ohmic resistance: Combined study of image analysis and modeling, 11th European SOFC & SOE Forum, Lucern, 2014.

M. NEUMANN, G. GAISELMANN, O. PECHO, T. HOCKER, V. SCHMIDT, L. HOLZER, *Quantitative Relationships between Microstructure and Effective Transport Properties based on Virtual Materials Testing*, 11th Symposium for Fuel Cell and Battery Modeling and Experimental Validation — ModVal 11, Winterthur, 2014.

M. NEUMANN, G. GAISELMANN, O. PECHO, T. HOCKER, V. SCHMIDT, L. HOLZER, *Quantitative Relationships between Microstructure and Effective Transport Properties based on Virtual Materials Testing*, 11th European SOFC & SOE Forum, Lucern, 2014.

M. NEUMANN, G. GAISELMANN, O. PECHO, T. HOCKER, V. SCHMIDT, L. HOLZER, *Stochastic Spatial Graph Model for Investigating the Microstructure Influence on Effective Transport Properties*, 11th German Probability and Statistics Day (GPSD), Ulm, 2014.

V. ORAVA, O. SOUČEK, P. CENDULA, *Modelling of reactive non-isothermal mixture flow and its simulation in COMSOL Multiphysics*, 6th International Conference on Advanced COmputational Methods in ENgineering, ACOMEN, Ghent, 2014.

V. ORAVA, O. SOUČEK, P. CENDULA, *Modelling of reactive non-isothermal mixture flow and its simulation in COMSOL Multiphysics*, Comsol Conference, Cambridge, 2014.

V. ORAVA, O. SOUČEK, P. CENDULA, *Modelling of reactive non-isothermal mixture flow and its simulation in COMSOL Multiphysics*, Conference on Modeling, analysis and computing in nonlinear PDEs, MORE, Liblice, 2014.

O. PECHO, L. HOLZER, T. HOCKER, B. IWANSCHITZ, R. J. FLATT, G. GAISELMANN, M. NEU-MANN, *Microstructure-Performance Relationships in Ni-YSZ Anodes: Quantitative Microstructure Characterization and FE-Simulation*, Materials Research Society Fall Meeting, Boston, 2014.

O. PECHO, L. HOLZER, Z. YÁNG, J. MARTYNCZUK, T. HOCKER, R. J. FLATT, M. PRESTAT, *Effects* of sintering temperature on composition, microstructure and electrochemical performance of spray pyrolysed LSC thin film cathode, 11th European SOFC & SOE Forum, Lucern, 2014.

O. PECHO, L. HOLZER, T. HOCKER, B. IWANSCHITZ, R. J. FLATT, G. GAISELMANN, M. NEUMANN, M. PRESTAT, *Microstructure effects in Ni-YSZ anodes: 3D-analysis, FE-simulation and experimental correlation*, 11th Symposium for Fuel Cell and Battery Modeling and Experimental Validation - ModVal 11, Winterthur, 2014.

O. PECHO, L. HOLZER, Z. YÁNG, J. MARTYNCZUK, T. HOCKER, R. J. FLATT, M. PRESTAT, *Quantitative microstructural analysis and electrochemical performance of thin* $La_{0.6}Sr_{0.4}CoO_{3-\gamma}$ *cathodes*, 11th Symposium for Fuel Cell and Battery Modeling and Experimental Validation - ModVal 11, Winterthur, 2014.

B. RUHSTALLER, Advanced characterization of light-emitting and light-harvesting organic semiconductor devices, Internatl. Workshop on Flexible and Printed Electronics, Jeonju, 2014.

B. RUHSTALLER, Analysis of light scattering enhancement and charge transport dynamics in OL-EDs, Internatl. Workshop on Flexible and Printed Electronics, Jeonju, 2014.

B. RUHSTALLER, Analysis of light scattering enhancement and charge transport dynamics in OL-EDs, OLED Forum Japan, Okinawa, 2014. B. RUHSTALLER, Advanced Model-based Characterization of Organic Solar Cells in Time and Frequency Domain, RhineSolar OPV Summer School, Strasbourg, 2014.

B. RUHSTALLER, *Analysis of Dynamic Electrical Response of Fresh and Degraded Organic Solar Cells*, Intl. Conference on Electroluminescence and Organic Optoelectronics, Cologne, 2014.

B. RUHSTALLER, *Design Tools for Light Scattering Enhancement in OLEDs*, SID Display Week, San Diego, 2014.

B. RUHSTALLER, *Introduction to Opto-electronic Solar Cell Modeling with SETFOS*, Workshop on Durability of Solar Cells, Winterthur, 2014.

B. RUHSTALLER, Analysis of Dynamic Electrical Response of Fresh and Degraded Organic Solar *Cells*, Photovoltaics Conference of the Royal Society of Chemistry, London, 2014.

Y. SAFA, *A New Phase Mixture Approach for the Gas-Liquid Flow in Shale Reservoir*, 2nd International Symposium on Energy Challenges and Mechanics (ECM2), Aberdeen, Scotland, 2014.

Y. SAFA, A guideline design of Micro-SOFC membranes, Invited seminar talk, Korea University, Seoul, 2014.

S. ZÜFLE, M. NEUKOM, B. RUHSTALLER, M. ZINGGELER, T. OFFERMANS, I. ZHURMINSKY, M. CH-RAPA, R. FERRINI, *Comparative degradation study of organic solar cells using solution processable metal oxides as hole transporting material*, DURSOL Conference, Winterthur, 2014.

S. ZÜFLE, B. RUHSTALLER, M. NEUKOM, S. ALTAZIN, M. ZINGGELER, T. OFFERMANS, M. CH-RAPA, R. FERRINI, *Metal-oxide based hole transport layers leading to P3HT solar cells with improved stability as studied by dynamic characterization*, HOPV, Lausanne, 2014.

S. ZÜFLE, M. NEUKOM, B. RUHSTALLER, M. ZINGGELER, T. OFFERMANS, I. ZHURMINSKY, M. CH-RAPA, R. FERRINI, *Comparative degradation study of P3HT solar cells using different hole transporting materials*, LOPEC, Munich, 2014.

S. ZÜFLE, M. NEUKOM, B. RUHSTALLER, *Charge carrier dynamics of solar cells – A comparative study*, IOP, London, 2014.

S. ZÜFLE, M. NEUKOM, S. ALTAZIN, M. ZINGGELER, T. OFFERMANS, B. RUHSTALLER, *Analysis of accelerated OPV degradation using an Effective Area Modeling Approach*, ISOS-7 Conference, Barcelona, 2014.

A.5 Public Events

B. RUHSTALLER, T. LANZ, *Dursol Conference*, Winterthur February 2014.

L. HOLZER, M. LINDER, J. SCHUMACHER, M. PRESTAT, O. PECHO, *Main organizer of ModVal 11, int. Symposium for Fuel Cell and Battery Modeling and Experimental Validation*, Winterthur March 2014.

N. REINKE, A. BARISKA, Winterthurer Oberflächentag 2014, Winterthur Juni 2014.

A.6 Patents

Y. SAFA, Lighter-Than-Air wind turbine with upstream-folding blade, Patent pending, Bern, 2014.

www.zhaw.ch

A.7 Prizes and Awards

Manfred Suter von der Max Felchlin AG, Schwyz, macht 2014 besten Abschluss an der ZHAW im Studium Master of Science in Engineering (MSE). Herr Suter hat am ICP in seinen Vertiefungsund Masterarbeiten das Schmelzen und Erstarren von Schokolade untersucht.

T. Ott and C. Ritschard received the *Klimaschutzpreis - myblueplanet Award* for their Bachelor Thesis *Entwicklung, Konstruktion und Inbetriebnahme eines Experimentalholzvergasers*.

T. Ott and C. Ritschard received the *Siemens Excellence Award* for their Bachelor Thesis *Entwicklung, Konstruktion und Inbetriebnahme eines Experimentalholzvergasers*.

A.8 Teaching

- R. AXTHELM, *Lineare Algebra 1+2*, Bachelor of Science.
- R. AXTHELM, Numerik, Bachelor of Science.
- M. BONMARIN, Physik für Energie- und Umwelttechnik 1- Vorlesung, Bachelor of Science.
- M. BONMARIN, *Physik für Maschinentechnik 1– Vorlesung*, Bachelor of Science.
- M. BONMARIN, Physik für Maschinentechnik 2- Vorlesung, Bachelor of Science.
- G. BOIGER, *Fluid- und Thermodynamik 1 Vorlesung, FS14*, Bachelor of Science.
- G. BOIGER, Systemphysik für Aviatik 1 Praktikum, HS14, Bachelor of Science.
- G. BOIGER, Systemphysik für Aviatik 2 Praktikum, FS14, Bachelor of Science.
- G. BOIGER, Advanced Thermodynamics, HS14, Master of Science in Engineering.
- G. BOIGER, Heat and mass transfer with two-phase flow FS14, Master of Science in Engineering.
- L. HOLZER, METU Blockkurs Nachhaltiger Transport von Energie, Bachelor of Science.
- T. HOCKER, Fluid- und Thermodynamik 1, Bachelor of Science.
- T. HOCKER, Systemtechnik Physik 2 in der Aviatik, Bachelor of Science.
- M. JAZBINSEK, Physik für Informatik Vorlesung & Praktikum, Bachelor of Science.
- C. KIRSCH, Mathematik: Analysis für Ingenieure 2, Bachelor of Science.
- C. KIRSCH, Mathematik: Analysis für Ingenieure 3, Bachelor of Science.
- C. KIRSCH, Mathematik: Numerik für Energie- und Umwelttechnik, Bachelor of Science.

K. PERNSTICH, *Mensch, Technik, Umwelt – Nachhaltiger Transport von Energie*, Bachelor of Science.

- K. PERNSTICH, *Physik und Systemwissenschaft in Aviatik 1 Praktikum*, Bachelor of Science.
- K. PERNSTICH, Physik und Systemwissenschaft in Aviatik 2 Praktikum, Bachelor of Science.
- B. RUHSTALLER, *Grundlagen der Solartechnik*, Bachelor of Science.
- J. SCHUMACHER, Physik für Elektrotechniker Vorlesung & Praktikum, Bachelor of Science.
- J. SCHUMACHER, Advanced Thermodynamics, Master of Science in Engineering.
- J. SCHUMACHER, *Multiphysics Modeling and Simulation*, Master of Science in Engineering.
- M. SCHMID, Mathematik: lineare Algebra für Ingenieure 1, Bachelor of Science.
- M. SCHMID, Mathematik: lineare Algebra für Ingenieure 2, Bachelor of Science.

A.9 ICP-Team

Dr. Rebekka Axthelm Dr. Gernot Boiger Marlon BoldriniLecturer Research Assistant Lecturerrebekka.axthelm@zhaw.ch gernot.boiger@zhaw.ch mathias.bonmarin@zhaw.ch luigino.capone@zhaw.ch peter.cendula@zhaw.ch teresa.donghia@zhaw.ch josef.fuchs@zhaw.ch teresa.donghia@zhaw.ch igaka.dujc@zhaw.ch josef.fuchs@zhaw.ch teresa.donghia@zhaw.ch <th>Name</th> <th>Function</th> <th>e-Mail</th>	Name	Function	e-Mail
Dr. Rebekka AxthelmLecturerrebekka Axthelm@2haw.chDr. Gernot BoigerLecturergernot boiger@2haw.chMarlon BoldriniResearch Assistantmarlon.boldrini@2haw.chLuigino CaponeResearch Associatemarlon.boldrini@2haw.chDr. Peter CendulaResearch Associatepeter.cendula@2haw.chDr. Jaka DujcResearch Associatejaka.dujc@2haw.chJosef FuchsResearch Associatejaka.dujc@2haw.chSamuel HauriResearch Associatejosef.fuchs@2haw.chOrr. Lorenz HolzerResearch Associatelorenz.holzer@2haw.chDr. Lorenz HolzerResearch Associatehorenz.holzer@2haw.chDr. Christoph KirschResearch Associatehorenz.holzer@2haw.chDr. Christoph KirschResearch Associateevelyne.knapp@2haw.chDr. Evelyne KnappResearch Associateevelyne.knapp@2haw.chMarkus LinderResearch Associateevelyne.knapp@2haw.chDr. Roit LagagnaResearch Associateevelyne.knapp@2haw.chMarkus LinderResearch Associatepaoloantonio.losio@2haw.chUrsula MayerResearch Assistantmarkus.linder@2haw.chOmar PechoResearch Assistantwit.orava@2haw.chOrkus RegnatResearch Assistantwit.orava@2haw.chProf. Dr. Nils ReinkeLecturerwit.orava@2haw.chMarkus LinderResearch Assistantwit.orava@2haw.chOmar PechoResearch Assistantmarkus.regnat@2haw.chProf. Dr. Nils ReinkeLecturermarkus.regnat@2haw.chProf. Dr.			
Dr. Gernot BoigerLecturergernot.boiger@zhaw.chMarlon BoldriniResearch Assistantmarlon.boldrini@zhaw.chDr. Mathias BonmarinLecturermathias.bonmarin@zhaw.chDr. Peter CendulaResearch Assistantluigino.capone@zhaw.chDr. Peter CendulaResearch Associatepeter.cendula@zhaw.chJosef FuchsResearch Assistantjosef fuchs@zhaw.chSamuel HauriResearch Associatejaka.dujc@zhaw.chProf. Dr. Thomas HockerLecturer, Head ICPthomas.hocker@zhaw.chDr. Kas KellerResearch Associateorenz.holzer@zhaw.chDr. Lukas KellerResearch Associateorenz.holzer@zhaw.chDr. Christoph KirschResearch Associateorenz.holzer@zhaw.chDr. Christoph KirschResearch Associateorenz.holzer@zhaw.chDr. SayagnaResearch Associateorenz.holzer@zhaw.chMarkus LinderResearch Associateorenz.holzer@zhaw.chUrsula MayerResearch Associateorenz.holzer@zhaw.chVit OravaResearch Associateorenz.holzer@zhaw.chVit OravaResearch Assistantmarkus.linder@zhaw.chOmar PechoResearch AssistantorasistantDr. Kurt PernstichLecturerorasistantProf. Dr. Nis ReinkeLecturernis.reink@zhaw.chProf. Dr. Nis ReinkeLecturernis.reink@zhaw.chProf. Dr. Dr. Beat RuhstallerResearch Associateorajom@zhaw.chProf. Dr. Sayas SafaResearch Associatepelajamin.schmid@zhaw.chDr. Matris Reinke <t< td=""><td>Dr. Rebekka Axthelm</td><td>Lecturer</td><td>rebekka.axthelm@zhaw.ch</td></t<>	Dr. Rebekka Axthelm	Lecturer	rebekka.axthelm@zhaw.ch
Marlon BoldriniResearch Assistantmarlon.boldrin@phaw.chDr. Mathias BonmarinLecturermathias.bonmarin@phaw.chLuigino CaponeResearch Assistantmathias.bonmarin@phaw.chDr. Pater CendulaResearch Associatepeter.cendula@phaw.chTeresa D'OnghiaAdministrative Assistantpeter.cendula@phaw.chJosef FuchsResearch Associatejaka.dujc@phaw.chJosef FuchsResearch Assistantjaka.dujc@phaw.chSamuel HauriResearch Assistantsamuel.hauri@phaw.chProf. Dr. Thomas HockerLecturerthomas.hocker@phaw.chDr. Lukas KellerResearch Associatelorenz.holzer@phaw.chDr. Lukas KellerResearch Associatelukas.keller@phaw.chDr. Christoph KirschResearch Associatechristoph.kirsch@phaw.chDr. Paolo LosioResearch Associateevelyne.knapp@phaw.chVit OravaResearch Associatepaoloantonio.losio@phaw.chVit OravaResearch Associatepaoloantonio.losio@phaw.chOmar PechoResearch Associatevit.orav@phaw.chDr. Kurt PernstichLecturerchristoph.meier@phaw.chProf. Dr. Nils ReinkeLecturermarkus.regnal@phaw.chProf. Dr. Jürgen SchumacherResearch Associatemarkus.regnal@phaw.ch </td <td>Dr. Gernot Boiger</td> <td>Lecturer</td> <td>gernot.boiger@zhaw.ch</td>	Dr. Gernot Boiger	Lecturer	gernot.boiger@zhaw.ch
Dr. Mathias BonmarinLecturermathias.bonmarin@zhaw.chLuigino CaponeResearch Assistantluigino.capone@zhaw.chDr. Peter CendulaResearch Associatepeter.cendula@zhaw.chTeresa D'OnghiaAdministrative Assistantpeter.cendula@zhaw.chDosef FuchsResearch Associatejaka.dujc@zhaw.chSamuel HauriResearch Assistantjosef.fuchs@zhaw.chProf. Dr. Thomas HockerLecturer, Head ICPhomas.hocker@zhaw.chDr. Lorenz HolzerResearch Associatelorenz.holzer@zhaw.chDr. Lukas KellerResearch Associatelorenz.holzer@zhaw.chDr. Lukas KellerResearch Associatelukas.keller@zhaw.chDr. Evelyne KnappResearch Associatechristoph.kirsch@zhaw.chDr. Paolo LosioResearch Assistantmarkus.linder@zhaw.chDr. Paolo LosioResearch Assistantmarkus.linder@zhaw.chUrsula MayerResearch Assistantpaoloantoi.losio@zhaw.chVit OravaResearch Assistantvit.orava@zhaw.chOrar PechoResearch Assistantvit.orava@zhaw.chDr. Kurt PernstichLecturerchristoph.meier@zhaw.chMarkus RegnatResearch Assistantvit.orava@zhaw.chProf. Dr. Nis ReinkeLecturermarkus.regnd@zhaw.chProf. Dr. Beat RuhstallerResearch Associatechristoph.meier@zhaw.chProf. Dr. Beat RuhstallerResearch Associatechristop.mein@zhaw.chBenjamin SchmidResearch AssociateBenjamin.rutz@zhaw.chDr. Mathias SchmidResearch AssociateBe	Marlon Boldrini	Research Assistant	marlon.boldrini@zhaw.ch
Luigino CaponeResearch AssistantIuigino.capone@zhaw.chDr. Peter CendulaResearch Associatepeter.cendula@zhaw.chDr. Jaka DujcAdministrative Assistantpeter.cendula@zhaw.chJosef FuchsResearch Associatejaka.dujc@zhaw.chSamuel HauriResearch Assistantjosef.fuchs@zhaw.chSamuel HauriResearch Assistantsamuel.hauri@zhaw.chProf. Dr. Thomas HockerLecturer, Head ICPthomas.hocker@zhaw.chDr. Lorenz HolzerResearch Associatelorenz.holzer@zhaw.chDr. Lukas KellerResearch Associatelorenz.holzer@zhaw.chDr. Lukas KellerResearch Associatechristoph.kirsch@zhaw.chDr. Evelyne KnappResearch Associateevelyne.knapp@zhaw.chMarkus LinderResearch Associateevelyne.knapp@zhaw.chDr. Paolo LosioResearch Associatechristoph.meie@zhaw.chOrna PechoResearch Assistantursulamaria.mayer@zhaw.chDr. Kurt PernstichLecturervit.orava@zhaw.chDr. Kurt PernstichLecturerchristoph.meie@zhaw.chDr. Search Assistantkwrt.pernstich@zhaw.chDr. Kurt PernstichLecturermarkus.regnat@zhaw.chProf. Dr. Nils ReinkeLecturerkurt.pernstich@zhaw.chProf. Dr. Nils ReinkeLecturerkurt.pernstich@zhaw.chProf. Dr. Sear AlastantResearch Associatechristoph.meie@zhaw.chProf. Dr. SterngelResearch Associatechristoph.mein@zhaw.chProf. Dr. SterngelResearch Associatechristoph.aw.ch<	Dr. Mathias Bonmarin	Lecturer	mathias.bonmarin@zhaw.ch
Dr. Peter CendulaResearch Associatepeter.cendula@zhaw.chTeresa D'OnghiaAdministrative Assistantteresa.donghia@zhaw.chJosef FuchsResearch Associatejosef.fuchs@zhaw.chJosef FuchsResearch Assistantsamuel.hauri@zhaw.chSamuel HauriResearch Associatejosef.fuchs@zhaw.chProf. Dr. Thomas HockerLecturer, Head ICPthomas.hocker@zhaw.chDr. Lorenz HolzerResearch Associatelorenz.holzer@zhaw.chDr. Chronz HolzerResearch Associatelukas.keller@zhaw.chDr. Christoph KirschResearch Associatechristoph.kirsch@zhaw.chDr. Evelyne KnappResearch Associatechristoph.kirsch@zhaw.chDr. Paolo LosioResearch Associateevelyne.knapp@zhaw.chUrsula MayerResearch Associateursulamaria.mayer@zhaw.chOrar PechoResearch Associatechristoph.mer@zhaw.chOmar PechoResearch Assistantursulamaria.mayer@zhaw.chDr. Kurt PernstichLecturervit.orava@zhaw.chMarkus RegnatResearch Assistantvit.orava@zhaw.chProf. Dr. Nils ReinkeLecturermarkus.regnat@zhaw.chProf. Dr. Nils ReinkeLecturermarkus.regnat@zhaw.chProf. Dr. SpiesResearch Associatepearch@zhaw.chProf. Dr. Jürgen SchumacherResearch Associatepearch@zhaw.chProf. Dr. Jürgen SchumacherResearch Associatepearamin.rut2@zhaw.chProf. Dr. Jürgen SchumacherResearch Associatepearamin.schmid@zhaw.chProf. Dr. Jürgen SchumacherRes	Luigino Capone	Research Assistant	luigino.capone@zhaw.ch
Teresa D'OnghiaAdministrative Assistantteresa donghi@2haw.chDr. Jaka DujcResearch Associatejaka.dujc@2haw.chJosef FuchsResearch Assistantjosef.fuchs@2haw.chSamuel HauriResearch Assistantsamuel.hauri@2haw.chProf. Dr. Thomas HockerLecturer, Head ICPthomas.hocker@2haw.chDr. Lorenz HolzerResearch Associatelorenz.holzer@2haw.chDr. Lutas KellerResearch Associatelukas.keller@2haw.chDr. Lukas KellerResearch Associatelukas.keller@2haw.chDr. Evelyne KnappResearch Associateevelyne.knapp@2haw.chMarkus LinderResearch Associateevelyne.knapg@2haw.chDr. Baolo LosioResearch Associateevelyne.knapg@2haw.chVit OravaResearch Associatepaoloantonio.losio@2haw.chVit OravaResearch Associatevit.orava@2haw.chVit OravaResearch Associatevit.orava@2haw.chOmar PechoResearch Assistanttobias.ott@2haw.chDr. Kurt PernstichLecturerwit.orava@2haw.chProf. Dr. Nils ReinkeLecturermarkus.regnat@2haw.chProf. Dr. Beat RuhstallerResearch Associatemarkus.regnat@2haw.chProf. Dr. Beat RuhstallerResearch Associatebenjamin.rutz@2haw.chProf. Dr. StaftResearch Associateguido.sartoris@2haw.chProf. Dr. StaftResearch Associateguido.sartoris@2haw.chProf. Dr. Beat RuhstallerResearch Associatebenjamin.schmid@2haw.chProf. Dr. Beat RuhstallerResearch Associate <td< td=""><td>Dr. Peter Cendula</td><td>Research Associate</td><td>peter.cendula@zhaw.ch</td></td<>	Dr. Peter Cendula	Research Associate	peter.cendula@zhaw.ch
Dr. Jaka DujcResearch Associatejaka.dujc@zhaw.chJosef FuchsResearch Assistantjosef.fuchs@zhaw.chSamuel HauriResearch Assistantsamuel.hauri@zhaw.chProf. Dr. Thomas HockerLecturer, Head ICPthomas.hocker@zhaw.chDr. Lorenz HolzerResearch Associatelorenz.holzer@zhaw.chDr. Lukas KellerResearch Associatelorenz.holzer@zhaw.chDr. Christoph KirschResearch Associateevelyne.knapp@zhaw.chDr. Evelyne KnappResearch Associateevelyne.knapp@zhaw.chMarkus LinderResearch Associateevelyne.knapp@zhaw.chDr. Paolo LosioResearch Associatepaoloantonio.losio@zhaw.chUrsula MayerResearch Associatepaoloantonio.losio@zhaw.chVit OravaResearch Associatechristoph.meier@zhaw.chDr. Kurt PernstichLecturerursulamaria.mayer@zhaw.chDr. Kurt PernstichLecturermarkus.linder@zhaw.chProf. Dr. Nils ReinkeLecturerwit.orava@zhaw.chProf. Dr. Nils ReinkeLecturermarkus.crana@zhaw.chProf. Dr. Nils ReinkeLecturermarkus.crana@zhaw.chProf. Dr. Nils ReinkeLecturermarkus.crana@zhaw.chProf. Dr. Nils ReinkeLecturerpainin.rutz@zhaw.chProf. Dr. Nils ReinkeLecturerpainim.rutz@zhaw.chProf. Dr. Nils ReinkeLecturerpainim.rutz@zhaw.chProf. Dr. Nils ReinkeLecturerpainim.rutz@zhaw.chProf. Dr. Beat RuhstallerLecturerpainim.rutz@zhaw.chProf. Dr. Beat R	Teresa D'Onghia	Administrative Assistant	teresa.donghia@zhaw.ch
Josef FuchsResearch Assistantjosef.fuchs@zhaw.chSamuel HauriResearch Assistantsamuel.hauri@zhaw.chProf. Dr. Thomas HockerLecturer, Head ICPthomas.hocker@zhaw.chDr. Lorenz HolzerResearch Associatelorenz.holzer@zhaw.chDr. Mojca JazbinsekLecturermojca.jazbinsek@zhaw.chDr. Lukas KellerResearch Associatelukas.keller@zhaw.chDr. Christoph KirschResearch Associateevelyne.knapp@zhaw.chDr. Evelyne KnappResearch Associateevelyne.knapp@zhaw.chKevin LapagnaResearch Associatepaoloantonio.losio@zhaw.chDr. Paolo LosioResearch Associatepaoloantonio.losio@zhaw.chUrsula MayerResearch Assistantrusulamaria.mayer@zhaw.chVit OravaResearch Assistantvit.orava@zhaw.chOmar PechoResearch Assistantvit.orava@zhaw.chDr. Kurt PernstichLecturerwurt.pernstich@zhaw.chMarkus RegnatResearch Assistantmarkus.regnat@zhaw.chProf. Dr. Nils ReinkeLecturermarkus.regnat@zhaw.chProf. Dr. Beat RuhstallerLecturerremo.ritzmann@zhaw.chProf. Dr. Beat RuhstallerLecturerguido.sartoris@zhaw.chBenjamin RutzResearch Associateguido.sartoris@zhaw.chDr. Matthias SchmidLecturerguido.sartoris@zhaw.chDr. Matthias SchmidLecturerguido.sartoris@zhaw.chDr. Matthias SchmidLecturerguido.sartoris@zhaw.chDr. Matthias SchmidLecturerguido.sartoris@zhaw.ch <td< td=""><td>Dr. Jaka Dujc</td><td>Research Associate</td><td>jaka.dujc@zhaw.ch</td></td<>	Dr. Jaka Dujc	Research Associate	jaka.dujc@zhaw.ch
Samuel HauriResearch Assistantsamuel.hauri@zhaw.chProf. Dr. Thomas HockerLecturer, Head ICPthomas.hocker@zhaw.chDr. Lorenz HolzerResearch Associatelorenz.holzer@zhaw.chDr. Mojca JazbinsekLecturermojca.jazbinsek@zhaw.chDr. Lukas KellerResearch Associatelukas.keller@zhaw.chDr. Evelyne KnappResearch Associateevelyne.knapp@zhaw.chMarkus LinderResearch Associateevelyne.knapp@zhaw.chDr. Paolo LosioResearch Associatepaoloantonio.losio@zhaw.chUrsula MayerResearch Associatepaoloantonio.losio@zhaw.chVit OravaResearch Assistantursulamaria.mayer@zhaw.chOmar PechoResearch Assistantursulamaria.mayer@zhaw.chOmar PechoResearch Assistantursulamaria.mayer@zhaw.chOmar PechoResearch Assistantomar.pecho@zhaw.chOr Kurt PernstichLecturernarkus.regnat@zhaw.chProf. Dr. Nils ReinkeLecturernarkus.regnat@zhaw.chProf. Dr. Nils ReinkeLecturernarkus.regnat@zhaw.chProf. Dr. Beat RuhstallerLecturerpasearch AssistantDr. Kutti Benjamin RutzResearch Associateremo.ritzmann@zhaw.chProf. Dr. Jagen SchumacherResearch Associateguido.sartoris@zhaw.chProf. Dr. Jis ReinkeLecturerpasearch AssociateProf. Dr. Beat RuhstallerLecturerpasearch AssociateProf. Dr. Beat RuhstallerLecturerpasearch AssociateBenjamin SchmidResearch Associatepenjamin.schmid	Josef Fuchs	Research Assistant	josef.fuchs@zhaw.ch
Prof. Dr. Thomas HockerLecturer, Head ICPthomas.hocker@zhaw.chDr. Lorenz HolzerResearch AssociateIorenz.holzer@zhaw.chDr. Lukas KellerResearch AssociateIorenz.holzer@zhaw.chDr. Lukas KellerResearch Associatechristoph.kirsch@zhaw.chDr. Lukas KellerResearch Associatechristoph.kirsch@zhaw.chDr. Evelyne KnappResearch Associateevelyne.knapp@zhaw.chMarkus LinderResearch Associateevelyne.knapp@zhaw.chDr. Paolo LosioResearch Associatepaoloantonio.losio@zhaw.chUrsula MayerResearch Associatepaoloantonio.losio@zhaw.chVit OravaResearch Associatechristoph.meier@zhaw.chVit OravaResearch Assistantursulamaria.mayer@zhaw.chOmar PechoResearch Assistantomar.pecho@zhaw.chDr. Kurt PernstichLecturerkurt.pernstich@zhaw.chProf. Dr. Nils ReinkeLecturernarkus.regnat@zhaw.chProf. Dr. Beat RuhstallerLecturernarkus.regnat@zhaw.chProf. Dr. Beat RuhstallerResearch Assistantbeat.ruhstaller@zhaw.chDr. Watthias SchmidResearch Associateguido.sartoris@zhaw.chDr. Matthias SchmidLecturerbeat.ruhstaller@zhaw.chDr. Matthias SchmidLecturersastistantDr. Matthias SchmidLecturerbenjamin.schmid@zhaw.chDr. Katthias SchmidLecturersastistantDr. Matthias SchmidLecturersastistantDr. Matthias SchmidResearch Associatesether.spiess@zhaw.ch	Samuel Hauri	Research Assistant	samuel.hauri@zhaw.ch
Dr. Lorenz HolzerResearch AssociateIorenz.holzer@zhaw.chDr. Mojca JazbinsekLecturermojca.jazbinsek@zhaw.chDr. Lukas KellerResearch Associatelukas.keller@zhaw.chDr. Christoph KirschResearch Associatechristoph.kirsch@zhaw.chDr. Evelyne KnappResearch Associatechristoph.kirsch@zhaw.chMarkus LinderResearch Associateevelyne.knapp@zhaw.chMarkus LinderResearch Assistantmarkus.linder@zhaw.chUrsula MayerResearch Associatepaoloantonio.losio@zhaw.chUrsula MayerResearch Assistantursulamaria.mayer@zhaw.chVit OravaResearch Assistantchristoph.meier@zhaw.chVit OravaResearch Assistanttobias.ott@zhaw.chOmar PechoResearch Assistanttobias.ott@zhaw.chDr. Jurgen RitzmannResearch Assistantmarkus.regnat@zhaw.chProf. Dr. Nils ReinkeLecturermarkus.regnat@zhaw.chProf. Dr. Beat RuhstallerLecturermarkus.regnat@zhaw.chBenjamin SchmidResearch Associateremo.ritzmann@zhaw.chDr. Yasser SafaResearch Associateremo.ritzmann@zhaw.chDr. Mathias SchmidLecturerbeainmin.schmid@zhaw.chDr. Dr. Jürgen SchumacherLecturerguido.sartoris@zhaw.chProf. Dr. Jurgen SchumacherResearch Associateguido.sartoris@zhaw.chProf. Dr. Jürgen SchumacherResearch Associateguido.sartoris@zhaw.chDr. Mathias SchmidLecturerbenjamin.schmid@zhaw.chDr. Marek SzymanskiResearch Associa	Prof. Dr. Thomas Hocker	Lecturer, Head ICP	thomas.hocker@zhaw.ch
Dr. Mojca JazbinsekLecturermojca.jazbinsek@zhaw.chDr. Lukas KellerResearch Associatelukas.keller@zhaw.chDr. Christoph KirschResearch Associatechristoph.kirsch@zhaw.chDr. Evelyne KnappResearch Associateevelyne.knapp@zhaw.chMarkus LinderResearch Assistantkevin.lapagna@zhaw.chMarkus LinderResearch Assistantmarkus.linder@zhaw.chDr. Paolo LosioResearch Assistantursulamaria.mayer@zhaw.chUrsula MayerResearch Assistantursulamaria.mayer@zhaw.chVit OravaResearch Assistantursulamaria.mayer@zhaw.chVit OravaResearch Assistantursulamaria.mayer@zhaw.chOmar PechoResearch Assistantvit.orava@zhaw.chDr. Kurt PernstichLecturerkurt.pernstich@zhaw.chProf. Dr. Nils ReinkeLecturernils.reink@zhaw.chProf. Dr. Nils ReinkeLecturernils.reink@zhaw.chProf. Dr. Seat RuhstallerResearch Associateremo.ritzmann@zhaw.chDr. Yasser SafaResearch Associateguido.sartoris@zhaw.chDr. Guido SartorisResearch Associateguido.sartoris@zhaw.chDr. Jürgen SchumacherLectureriuergen.schumacher@zhaw.chProf. Dr. Jürgen SchumacherResearch Associateguido.sartoris@zhaw.chProf. Dr. Jürgen SchumacherLectureriuergen.schumacher@zhaw.chProf. Dr. Jürgen SchumacherResearch Associateguido.sartoris@zhaw.chProf. Dr. Jürgen SchumacherResearch Associateguido.sartoris@zhaw.chProf. Dr. Jürg	Dr. Lorenz Holzer	Research Associate	lorenz.holzer@zhaw.ch
Dr. Lukas KellerResearch AssociateIukas.keller@zhaw.chDr. Christoph KirschResearch Associatechristoph.kirsch@zhaw.chDr. Evelyne KnappResearch Associateevelyne.knapp@zhaw.chKevin LapagnaResearch Assistantkevin.lapagna@zhaw.chMarkus LinderResearch Assistantmarkus.linder@zhaw.chDr. Paolo LosioResearch Assistantmarkus.linder@zhaw.chUrsula MayerResearch Associatepaoloantonio.losio@zhaw.chUrsula MayerResearch Associatechristoph.meier@zhaw.chVit OravaResearch Assistantursulamaria.mayer@zhaw.chOmar PechoResearch Assistantvit.orava@zhaw.chDr. Kurt PernstichLecturermarkus.regnat@zhaw.chProf. Dr. Nils ReinkeLecturernils.reinke@zhaw.chProf. Dr. Nils ReinkeLecturernils.reinke@zhaw.chProf. Dr. Sager SafaResearch Assistantbeat.ruhstaller@zhaw.chDr. Sayer SafaResearch Associateremo.ritzmann@zhaw.chDr. Guido SartorisResearch Associateguido.sartoris@zhaw.chProf. Dr. Jürgen SchumacherLecturermathias.schmid@zhaw.chDr. Matthias SchmidLecturermathias.schmid@zhaw.chDr. Marek SzymanskiResearch Associatesven.zangerl@zhaw.chDr. Marek SzymanskiResearch Associatesven.zangerl@zhaw.chSimon ZüfleResearch Assistantberjamin.schmid@zhaw.ch	Dr. Mojca Jazbinsek	Lecturer	mojca.jazbinsek@zhaw.ch
Dr. Christoph KirschResearch Associatechristoph.kirsch@zhaw.chDr. Evelyne KnappResearch Associateevelyne.knapp@zhaw.chMarkus LinderResearch Assistantkevin.lapagna@zhaw.chMarkus LinderResearch Assistantmarkus.linder@zhaw.chDr. Paolo LosioResearch Assistantmarkus.linder@zhaw.chDr. Paolo LosioResearch Associatepaoloantonio.losio@zhaw.chUrsula MayerResearch Associatepaoloantonio.losio@zhaw.chChristoph MeierResearch Assistantursulamaria.mayer@zhaw.chVit OravaResearch Assistantvit.orava@zhaw.chTobias OttResearch Assistantomar.pecho@zhaw.chDr. Kurt PernstichLecturerkurt.pernstich@zhaw.chProf. Dr. Nils ReinkeLecturermarkus.regnat@zhaw.chProf. Dr. Dr. Beat RuhstallerLecturerbeat.ruhstaller@zhaw.chProf. Dr. Saser SafaResearch Associateremo.ritzmann@zhaw.chDr. Yasser SafaResearch Associateyasser.safa@zhaw.chDr. Matthias SchmidLecturerbenjamin.rutz@zhaw.chDr. Matthias SchmidLecturerbenjamin.schmid@zhaw.chDr. Matthias SchmidLecturerbenjamin.schmid@zhaw.chDr. Matthas SzymanskiResearch Associateguido.sartoris@zhaw.chProf. Dr. Jürgen SchumacherLecturerbenjamin.schmid@zhaw.chDr. Matthas SchmidLecturerbenjamin.schmid@zhaw.chDr. Matthas SzymanskiResearch Associatemarek.szymanski@zhaw.chSimon ZüfleResearch Assistantsven.	Dr. Lukas Keller	Research Associate	lukas.keller@zhaw.ch
Dr. Evelyne KnappResearch Associateevelyne.knapp@zhaw.chKevin LapagnaResearch Assistantkevin.lapagna@zhaw.chMarkus LinderResearch Assistantmarkus.linder@zhaw.chDr. Paolo LosioResearch Associatepaoloantonio.losio@zhaw.chUrsula MayerResearch Associatechristoph.meier@zhaw.chUrsula MayerResearch Associatechristoph.meier@zhaw.chUrsula MayerResearch Associatechristoph.meier@zhaw.chUrsula MayerResearch Associatechristoph.meier@zhaw.chUrsula MayerResearch Assistantvit.orava@zhaw.chUrsula MayerResearch Assistantvit.orava@zhaw.chVit OravaResearch Assistantvit.orava@zhaw.chTobias OttResearch Assistantomar.pecho@zhaw.chOmar PechoResearch Assistantomar.pecho@zhaw.chDr. Kurt PernstichLecturerkurt.pernstich@zhaw.chProf. Dr. Nils ReinkeLecturernils.reinke@zhaw.chProf. Dr. Beat RuhstallerLecturerbeat.ruhstaller@zhaw.chDr. Yasser SafaResearch Associateyasser.safa@zhaw.chDr. Guido SartorisResearch Associateyasser.safa@zhaw.chDr. Guido SartorisResearch Associateyasser.safa@zhaw.chDr. Guido SartorisResearch Associateyasser.safa@zhaw.chDr. Guido SartorisResearch Associateyasser.safa@zhaw.chDr. Jürgen SchumacherLecturerjuergen.schumacher@zhaw.chDr. Ole StenzelResearch Associatemarek.szymanski@zhaw.chDr. Ma	Dr. Christoph Kirsch	Research Associate	christoph.kirsch@zhaw.ch
Kevin LapagnaResearch Assistantkevin Lapagna@zhaw.chMarkus LinderResearch Assistantmarkus.linder@zhaw.chDr. Paolo LosioResearch Assistantursulamaria.mayer@zhaw.chDr. Paolo LosioResearch Associatepaoloantonio.losio@zhaw.chUrsula MayerResearch Assistantursulamaria.mayer@zhaw.chChristoph MeierResearch Assistantursulamaria.mayer@zhaw.chChristoph MeierResearch Assistantursulamaria.mayer@zhaw.chVit OravaResearch Assistantursulamaria.mayer@zhaw.chTobias OttResearch Assistantomar.pecho@zhaw.chOmar PechoResearch Assistantomar.pecho@zhaw.chDr. Kurt PernstichLecturerkurt.pernstich@zhaw.chMarkus RegnatResearch Associateremo.ritzmann@zhaw.chProf. Dr. Nils ReinkeLecturernils.reinke@zhaw.chProf. Dr. Beat RuhstallerLecturerbeat.ruhstaller@zhaw.chDr. Yasser SafaResearch Associateyasser.safa@zhaw.chDr. Guido SartorisResearch Associateguido.sartoris@zhaw.chBenjamin SchmidLecturermathias.schmid@zhaw.chDr. Dr. Jürgen SchumacherLecturermathias.schmid@zhaw.chProf. Dr. Jürgen SchumacherResearch Associateguido.sartoris@zhaw.chDr. Marek SzymanskiResearch Associatemarek.szymanski@zhaw.chDr. Marek SzymanskiResearch Associatemarek.szymanski@zhaw.chSimon ZüfleResearch Assistantsimon.zuefle@zhaw.ch	Dr. Evelyne Knapp	Research Associate	evelyne.knapp@zhaw.ch
Markus LinderResearch Assistantmarkus.linder@zhaw.chDr. Paolo LosioResearch Associatepaoloantonio.losio@zhaw.chUrsula MayerResearch Assistantursulamaria.mayer@zhaw.chChristoph MeierResearch Assistantursulamaria.mayer@zhaw.chVit OravaResearch Assistantvit.orava@zhaw.chVit OravaResearch Assistantvoit.orava@zhaw.chVit OravaResearch Assistantvoit.orava@zhaw.chOmar PechoResearch Assistanttobias.ott@zhaw.chDr. Kurt PernstichLecturerkurt.pernstich@zhaw.chMarkus RegnatResearch Assistantmarkus.regnat@zhaw.chProf. Dr. Nils ReinkeLecturernils.reinke@zhaw.chProf. Dr. Beat RuhstallerLecturerbeat.ruhstaller@zhaw.chDr. Yasser SafaResearch Associateyasser.safa@zhaw.chDr. Guido SartorisResearch Associateguido.sartoris@zhaw.chBenjamin SchmidLecturerbenjamin.rutz@zhaw.chDr. Jürgen SchumacherLecturerguido.sartoris@zhaw.chDr. Ole StenzelResearch Associateguido.sartoris@zhaw.chDr. Ole StenzelResearch Associateguido.sartoris@zhaw.chDr. Mark SzymanskiResearch Associateguido.sartoris@zhaw.chDr. Marek SzymanskiResearch Associateguido.sartoris@zhaw.chDr. Marek SzymanskiResearch Associateole.stenzel@zhaw.chDr. Marek SzymanskiResearch Associateole.stenzel@zhaw.chDr. Marek SzymanskiResearch Associatesven.zangerl@zhaw.ch<	Kevin Lapagna	Research Assistant	kevin.lapagna@zhaw.ch
Dr. Paolo LosioResearch Associatepaoloantonio.losio@zhaw.chUrsula MayerResearch Assistantursulamaria.mayer@zhaw.chChristoph MeierResearch Associatechristoph.meier@zhaw.chVit OravaResearch Associatechristoph.meier@zhaw.chVit OravaResearch Assistantvit.orava@zhaw.chTobias OttResearch Assistanttobias.ott@zhaw.chOmar PechoResearch Assistantomar.pecho@zhaw.chDr. Kurt PernstichLecturerkurt.pernstich@zhaw.chMarkus RegnatResearch Assistantmarkus.regnat@zhaw.chProf. Dr. Nils ReinkeLecturernils.reinke@zhaw.chProf. Dr. Beat RuhstallerLecturerbeat.ruhstaller@zhaw.chDr. Yasser SafaResearch Associateremo.ritzmann@zhaw.chDr. Guido SartorisResearch Associateguido.sartoris@zhaw.chBenjamin SchmidResearch Associateguido.sartoris@zhaw.chDr. Jürgen SchumacherLecturerbenjamin.schmid@zhaw.chProf. Dr. Jürgen SchumacherLectureriuergen.schumacher@zhaw.chDr. Markk SzymanskiResearch Associateguido.sartoris@zhaw.chDr. Marek SzymanskiResearch Associatesven.zangerl@zhaw.chDr. Marek SzymanskiResearch Associatemarek.szymanski@zhaw.chSimon ZüfleResearch Assistantsven.zangerl@zhaw.ch	Markus Linder	Research Assistant	markus.linder@zhaw.ch
Ursula MayerResearch Assistantursulamaria.mayer@zhaw.chChristoph MeierResearch Associatechristoph.meier@zhaw.chVit OravaResearch Assistantvit.orava@zhaw.chTobias OttResearch Assistanttobias.ott@zhaw.chOmar PechoResearch Assistantomar.pecho@zhaw.chDr. Kurt PernstichLecturerkurt.pernstich@zhaw.chMarkus RegnatResearch Assistantmarkus.regnat@zhaw.chProf. Dr. Nils ReinkeLecturernils.reinke@zhaw.chRemo RitzmannResearch Associateremo.ritzmann@zhaw.chProf. Dr. Beat RuhstallerLecturerbeat.ruhstaller@zhaw.chDr. Yasser SafaResearch Associateyasser.safa@zhaw.chDr. Guido SartorisResearch Assistantbenjamin.rutz@zhaw.chBenjamin SchmidLecturerguido.sartoris@zhaw.chDr. Dr. Jürgen SchumacherLecturerjuergen.schumacher@zhaw.chDr. Ole StenzelResearch Associatejuergen.schumacher@zhaw.chDr. Marek SzymanskiResearch Associatesven.zangerl@zhaw.chDr. Marek SzymanskiResearch Assistantsven.zangerl@zhaw.chSimon ZüfleResearch Assistantsimon.zuefle@zhaw.ch	Dr. Paolo Losio	Research Associate	paoloantonio.losio@zhaw.ch
Christoph MeierResearch Associatechristoph.meier@zhaw.chVit OravaResearch Assistantvit.orava@zhaw.chTobias OttResearch Assistanttobias.ott@zhaw.chOmar PechoResearch Assistantomar.pecho@zhaw.chDr. Kurt PernstichLecturerkurt.pernstich@zhaw.chMarkus RegnatResearch Assistantmarkus.regnat@zhaw.chProf. Dr. Nils ReinkeLecturernils.reinke@zhaw.chRemo RitzmannResearch Associateremo.ritzmann@zhaw.chProf. Dr. Beat RuhstallerLecturerbeat.ruhstaller@zhaw.chDr. Yasser SafaResearch Associateyasser.safa@zhaw.chDr. Guido SartorisResearch Assistantbenjamin.rutz@zhaw.chBenjamin SchmidLecturerguido.sartoris@zhaw.chDr. Jürgen SchumacherLecturermatthias.schmid@zhaw.chDr. Ole StenzelResearch Associateguergen.schumacher@zhaw.chDr. Marek SzymanskiResearch Associateguergen.schumacher@zhaw.chDr. Marek SzymanskiResearch Assistantbenjamin.zchmid@zhaw.chDr. Marek SzymanskiResearch Associatemarek.szymanski@zhaw.chSimon ZüfleResearch Assistantsimon.zuefle@zhaw.ch	Ursula Mayer	Research Assistant	ursulamaria.mayer@zhaw.ch
Vit OravaResearch Assistantvit.orava@zhaw.chTobias OttResearch Assistanttobias.ott@zhaw.chOmar PechoResearch Assistantomar.pecho@zhaw.chDr. Kurt PernstichLecturerkurt.pernstich@zhaw.chMarkus RegnatResearch Assistantmarkus.regnat@zhaw.chProf. Dr. Nils ReinkeLecturernils.reinke@zhaw.chProf. Dr. Beat RuhstallerLecturerbeat.ruhstaller@zhaw.chProf. Dr. Beat RuhstallerLecturerbeat.ruhstaller@zhaw.chDr. Yasser SafaResearch Associateyasser.safa@zhaw.chDr. Guido SartorisResearch Associateguido.sartoris@zhaw.chBenjamin SchmidLecturerguido.sartoris@zhaw.chDr. Matthias SchmidLecturerjuergen.schmid@zhaw.chDr. Ole StenzelResearch Associateguido.sartoris@zhaw.chDr. Marek SzymanskiResearch Associatejuergen.schumacher@zhaw.chSven ZangerlResearch Assistantole.stenzel@zhaw.chSimon ZüfleResearch Assistantsimon.zuefl@@zhaw.ch	Christoph Meier	Research Associate	christoph.meier@zhaw.ch
Tobias OttResearch Assistanttobias.ott@zhaw.chOmar PechoResearch Assistantomar.pecho@zhaw.chDr. Kurt PernstichLecturerkurt.pernstich@zhaw.chMarkus RegnatResearch Assistantmarkus.regnat@zhaw.chProf. Dr. Nils ReinkeLecturernils.reinke@zhaw.chProf. Dr. Nils ReinkeLecturernils.reinke@zhaw.chProf. Dr. Beat RuhstallerLecturerbeat.ruhstaller@zhaw.chProf. Dr. Beat RuhstallerLecturerbeat.ruhstaller@zhaw.chDr. Yasser SafaResearch Associateyasser.safa@zhaw.chDr. Guido SartorisResearch Associateguido.sartoris@zhaw.chBenjamin SchmidLecturerbenjamin.schmid@zhaw.chDr. Matthias SchmidLecturermatthias.schmid@zhaw.chProf. Dr. Jürgen SchumacherLecturerjuergen.schumacher@zhaw.chDr. Ole StenzelResearch Associateole.stenzel@zhaw.chDr. Marek SzymanskiResearch Associateole.stenzel@zhaw.chDr. Marek SzymanskiResearch Assistantsven.zangerl@zhaw.chSimon ZüfleResearch Assistantsimon.zuefle@zhaw.ch	Vit Orava	Research Assistant	vit.orava@zhaw.ch
Omar PechoResearch Assistantomar.pecho@zhaw.chDr. Kurt PernstichLecturerkurt.pernstich@zhaw.chMarkus RegnatResearch Assistantmarkus.regnat@zhaw.chProf. Dr. Nils ReinkeLecturernils.reinke@zhaw.chRemo RitzmannResearch Associateremo.ritzmann@zhaw.chProf. Dr. Beat RuhstallerLecturerbeat.ruhstaller@zhaw.chBenjamin RutzResearch Associateyasser.safa@zhaw.chDr. Yasser SafaResearch Associateguido.sartoris@zhaw.chDr. Guido SartorisResearch Associateguido.sartoris@zhaw.chBenjamin SchmidResearch Associateguido.sartoris@zhaw.chDr. Matthias SchmidLecturerbenjamin.schmid@zhaw.chProf. Dr. Jürgen SchumacherLecturerjuergen.schumacher@zhaw.chDr. Ole StenzelResearch Associateguido.sartoris@zhaw.chDr. Marek SzymanskiResearch Associatenatthias.schmid@zhaw.chDr. Marek SzymanskiResearch Associatenatek.szymanski@zhaw.chSimon ZüfleResearch Assistantsven.zangerl@zhaw.ch	Tobias Ott	Research Assistant	tobias.ott@zhaw.ch
Dr. Kurt PernstichLecturerkurt.pernstich@zhaw.chMarkus RegnatResearch Assistantmarkus.regnat@zhaw.chProf. Dr. Nils ReinkeLecturernils.reinke@zhaw.chRemo RitzmannResearch Associateremo.ritzmann@zhaw.chProf. Dr. Beat RuhstallerLecturerbeat.ruhstaller@zhaw.chBenjamin RutzResearch Assistantbenjamin.rutz@zhaw.chDr. Yasser SafaResearch Associateyasser.safa@zhaw.chDr. Guido SartorisResearch Associateguido.sartoris@zhaw.chBenjamin SchmidLecturerbenjamin.schmid@zhaw.chDr. Matthias SchmidLecturermatthias.schmid@zhaw.chProf. Dr. Jürgen SchumacherLecturerjuergen.schumacher@zhaw.chEsther SpiessAdministrative Assistantesther.spiess@zhaw.chDr. Marek SzymanskiResearch Associatenarek.szymanski@zhaw.chSven ZangerlResearch Assistantsimon.zuefle@zhaw.chSimon ZüfleResearch Assistantsimon.zuefle@zhaw.ch	Omar Pecho	Research Assistant	omar.pecho@zhaw.ch
Markus RegnatResearch Assistantmarkus.regnat@zhaw.chProf. Dr. Nils ReinkeLecturernils.reinke@zhaw.chRemo RitzmannResearch Associateremo.ritzmann@zhaw.chProf. Dr. Beat RuhstallerLecturerbeat.ruhstaller@zhaw.chBenjamin RutzResearch Associateyasser.safa@zhaw.chDr. Yasser SafaResearch Associateyasser.safa@zhaw.chDr. Guido SartorisResearch Associateguido.sartoris@zhaw.chBenjamin SchmidResearch Associateguido.sartoris@zhaw.chDr. Matthias SchmidLecturermatthias.schmid@zhaw.chProf. Dr. Jürgen SchumacherLecturermatthias.schmid@zhaw.chDr. Ole StenzelResearch Associateguergen.schumacher@zhaw.chDr. Marek SzymanskiResearch Associateole.stenzel@zhaw.chDr. Marek SzymanskiResearch Assistantsven.zangerl@zhaw.chSimon ZüfleResearch Assistantsimon.zuefle@zhaw.ch	Dr. Kurt Pernstich	Lecturer	kurt.pernstich@zhaw.ch
Prof. Dr. Nils ReinkeLecturernils.reinke@zhaw.chRemo RitzmannResearch Associateremo.ritzmann@zhaw.chProf. Dr. Beat RuhstallerLecturerbeat.ruhstaller@zhaw.chBenjamin RutzResearch Assistantbenjamin.rutz@zhaw.chDr. Yasser SafaResearch Associateyasser.safa@zhaw.chDr. Guido SartorisResearch Associateguido.sartoris@zhaw.chBenjamin SchmidResearch Associateguido.sartoris@zhaw.chDr. Matthias SchmidLecturermatthias.schmid@zhaw.chProf. Dr. Jürgen SchumacherLecturerjuergen.schumacher@zhaw.chDr. Ole StenzelResearch Associateguido.sartoris@zhaw.chDr. Marek SzymanskiResearch Associatenatthias.schmid@zhaw.chDr. Marek SzymanskiResearch Associatemarek.szymanski@zhaw.chSimon ZüfleResearch Assistantsimon.zuefle@zhaw.ch	Markus Regnat	Research Assistant	markus.regnat@zhaw.ch
Remo RitzmannResearch Associateremo.ritzmann@zhaw.chProf. Dr. Beat RuhstallerLecturerbeat.ruhstaller@zhaw.chBenjamin RutzResearch Assistantbenjamin.rutz@zhaw.chDr. Yasser SafaResearch Associateyasser.safa@zhaw.chDr. Guido SartorisResearch Associateguido.sartoris@zhaw.chBenjamin SchmidResearch Assistantbenjamin.schmid@zhaw.chDr. Matthias SchmidLecturermatthias.schmid@zhaw.chProf. Dr. Jürgen SchumacherLecturerjuergen.schumacher@zhaw.chEsther SpiessAdministrative Assistantesther.spiess@zhaw.chDr. Marek SzymanskiResearch Associatemarek.szymanski@zhaw.chSven ZangerlResearch Assistantsven.zangerl@zhaw.chSimon ZüfleResearch Assistantsimon.zuefle@zhaw.ch	Prof. Dr. Nils Reinke	Lecturer	nils.reinke@zhaw.ch
Prof. Dr. Beat RuhstallerLecturerbeat.ruhstaller@zhaw.chBenjamin RutzResearch Assistantbenjamin.rutz@zhaw.chDr. Yasser SafaResearch Associateyasser.safa@zhaw.chDr. Guido SartorisResearch Associateguido.sartoris@zhaw.chBenjamin SchmidResearch Assistantbenjamin.schmid@zhaw.chDr. Matthias SchmidLecturermatthias.schmid@zhaw.chProf. Dr. Jürgen SchumacherLecturerjuergen.schumacher@zhaw.chEsther SpiessAdministrative Assistantesther.spiess@zhaw.chDr. Ole StenzelResearch Associateole.stenzel@zhaw.chDr. Marek SzymanskiResearch Assistantsven.zangerl@zhaw.chSimon ZüfleResearch Assistantsimon.zuefle@zhaw.ch	Remo Ritzmann	Research Associate	remo.ritzmann@zhaw.ch
Benjamin RutzResearch Assistantbenjamin.rutz@zhaw.chDr. Yasser SafaResearch Associateyasser.safa@zhaw.chDr. Guido SartorisResearch Associateguido.sartoris@zhaw.chBenjamin SchmidResearch Assistantbenjamin.schmid@zhaw.chDr. Matthias SchmidLecturermatthias.schmid@zhaw.chProf. Dr. Jürgen SchumacherLecturerjuergen.schumacher@zhaw.chEsther SpiessAdministrative Assistantesther.spiess@zhaw.chDr. Ole StenzelResearch Associateole.stenzel@zhaw.chDr. Marek SzymanskiResearch Associatemarek.szymanski@zhaw.chSven ZangerlResearch Assistantsven.zangerl@zhaw.chSimon ZüfleResearch Assistantsimon.zuefle@zhaw.ch	Prof. Dr. Beat Ruhstaller	Lecturer	beat.ruhstaller@zhaw.ch
Dr. Yasser SafaResearch Associateyasser.safa@zhaw.chDr. Guido SartorisResearch Associateguido.sartoris@zhaw.chBenjamin SchmidResearch Assistantbenjamin.schmid@zhaw.chDr. Matthias SchmidLecturermatthias.schmid@zhaw.chProf. Dr. Jürgen SchumacherLecturerjuergen.schumacher@zhaw.chEsther SpiessAdministrative Assistantesther.spiess@zhaw.chDr. Ole StenzelResearch Associateole.stenzel@zhaw.chDr. Marek SzymanskiResearch Associatemarek.szymanski@zhaw.chSven ZangerlResearch Assistantsven.zangerl@zhaw.chSimon ZüfleResearch Assistantsimon.zuefle@zhaw.ch	Benjamin Rutz	Research Assistant	benjamin.rutz@zhaw.ch
Dr. Guido SartorisResearch Associateguido.sartoris@zhaw.chBenjamin SchmidResearch Assistantbenjamin.schmid@zhaw.chDr. Matthias SchmidLecturermatthias.schmid@zhaw.chProf. Dr. Jürgen SchumacherLecturerjuergen.schumacher@zhaw.chEsther SpiessAdministrative Assistantesther.spiess@zhaw.chDr. Ole StenzelResearch Associateole.stenzel@zhaw.chDr. Marek SzymanskiResearch Associatemarek.szymanski@zhaw.chSven ZangerlResearch Assistantsven.zangerl@zhaw.chSimon ZüfleResearch Assistantsimon.zuefle@zhaw.ch	Dr. Yasser Safa	Research Associate	vasser.safa@zhaw.ch
Benjamin SchmidResearch Assistantbenjamin.schmid@zhaw.chDr. Matthias SchmidLecturermatthias.schmid@zhaw.chProf. Dr. Jürgen SchumacherLecturerjuergen.schumacher@zhaw.chEsther SpiessAdministrative Assistantesther.spiess@zhaw.chDr. Ole StenzelResearch Associateole.stenzel@zhaw.chDr. Marek SzymanskiResearch Associatemarek.szymanski@zhaw.chSven ZangerlResearch Assistantsven.zangerl@zhaw.chSimon ZüfleResearch Assistantsimon.zuefle@zhaw.ch	Dr. Guido Sartoris	Research Associate	guido.sartoris@zhaw.ch
Dr. Matthias SchmidLecturermatthias.schmid@zhaw.chProf. Dr. Jürgen SchumacherLecturerjuergen.schumacher@zhaw.chEsther SpiessAdministrative Assistantesther.spiess@zhaw.chDr. Ole StenzelResearch Associateole.stenzel@zhaw.chDr. Marek SzymanskiResearch Associatemarek.szymanski@zhaw.chSven ZangerlResearch Assistantsven.zangerl@zhaw.chSimon ZüfleResearch Assistantsimon.zuefle@zhaw.ch	Benjamin Schmid	Research Assistant	benjamin.schmid@zhaw.ch
Prof. Dr. Jürgen Schumacher Esther SpiessLecturer Administrative Assistant Research Associatejuergen.schumacher@zhaw.ch 	Dr. Matthias Schmid	Lecturer	matthias.schmid@zhaw.ch
Esther SpiessAdministrative Assistantesther.spiess@zhaw.chDr. Ole StenzelResearch Associateole.stenzel@zhaw.chDr. Marek SzymanskiResearch Associatemarek.szymanski@zhaw.chSven ZangerlResearch Assistantsven.zangerl@zhaw.chSimon ZüfleResearch Assistantsimon.zuefle@zhaw.ch	Prof. Dr. Jürgen Schumacher	Lecturer	iuergen.schumacher@zhaw.ch
Dr. Ole StenzelResearch Associateole.stenzel@zhaw.chDr. Marek SzymanskiResearch Associatemarek.szymanski@zhaw.chSven ZangerlResearch Assistantsven.zangerl@zhaw.chSimon ZüfleResearch Assistantsimon.zuefle@zhaw.ch	Esther Spiess	Administrative Assistant	esther.spiess@zhaw.ch
Dr. Marek SzymanskiResearch Associatemarek.szymanski@zhaw.chSven ZangerlResearch Assistantsven.zangerl@zhaw.chSimon ZüfleResearch Assistantsimon.zuefle@zhaw.ch	Dr. Ole Stenzel	Research Associate	ole.stenzel@zhaw.ch
Sven ZangerlResearch Assistantsven.zangerl@zhaw.chSimon ZüfleResearch Assistantsimon.zuefle@zhaw.ch	Dr. Marek Szymanski	Research Associate	marek.szvmanski@zhaw.ch
Simon Züfle Research Assistant simon.zuefle@zhaw.ch	Sven Zangerl	Research Assistant	sven.zangerl@zhaw.ch
	Simon Züfle	Research Assistant	simon.zuefle@zhaw.ch

A.10 Location

ICP Institute of Computational Physics

Technikumstrasse 9 P.O. Box CH-8401 Winterthur

www.icp.zhaw.ch

Contact

Thomas Hocker Phone +41 58 934 78 37 thomas.hocker@zhaw.ch

Administration

Esther Spiess Phone +41 58 934 73 38 esther.spiess@zhaw.ch

Teresa D'Onghia Phone +41 58 934 67 62 teresa.donghia@zhaw.ch





TK building

TL building

Zurich University of Applied Sciences

School of Engineering

ICP Institute of Computational Physics

Technikumstrasse 9 P.O. Box CH-8401 Winterthur

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