

ol gasförmig in die Lösung transportiert und sorbiert und dadurch die Löslichkeit des NaCl herabgesetzt.

Der Verteilungskoeffizient bei der Reinigungskristallisation hängt wesentlich von der Wachstumsgeschwindigkeit G und diese wiederum von der Übersättigung ab [1]. Durch den experimentell einfach kontrollierbaren Ethanol-Partial-

druck der Gasphase kann die Übersättigung des Systems in weiten Grenzen variiert werden.

Es wurden mittels membrangestützter Kristallisation ausgehend von einer Einspeise mit 7 % KCl sehr geringe Verunreinigungsgrade von 0,003 % bei kleiner Wachstumsgeschwindigkeit von $G = 10^{-9}$ m/s erzielt. Vergleichende

Experimente mit schneller Antisolventdosierung führten zu höheren Verunreinigungsgraden von 0,010 % bei $G = 10^{-8}$ m/s und 0,012 % bei $G = 10^{-6}$ m/s.

[1] J. A. Burton et al., *J. Chem. Phys.* **1953**, *21* (11), 1987.

P5.12

Thermisch induzierte Denaturierung von β -Lg: Kinetik der Auffaltung und Aggregation

Dipl.-Ing. A. Tolkach¹⁾ (E-Mail: Alexander.Tolkach@wzw.tum.de), Prof. Dr.-Ing. U. Kulozik¹⁾

¹⁾Lehrstuhl für Lebensmittelverfahrenstechnik, TU-München, Weißenstephaner Berg 1, D-85354 Freising

DOI: 10.1002/cite.200750412

Der Vortragsfokus liegt auf dem Mechanismus der thermischen Denaturierung des majoren Molkenproteins β -Lg. Es wurde eine neue Methode zur reaktionskinetischen Beschreibung und Modellierung der reversiblen Auffaltung und irreversiblen Aggregation von Molkenproteinen entwickelt, die es erlaubte, beide Teilreaktionen unabhängig voneinander zu beurteilen und im Hinblick auf Milieueinflüsse zu charakterisieren. Daraus resultierten die Möglichkeit zur Vorhersage der Konzentration an nativen und irreversibel denaturierten Proteinen während der Erhitzung und auch die Möglichkeit zur Berechnung des Anteils an Proteinmolekülen, die sich im thermisch induzierten „molten globule state“ befinden.

Die Konzentrationsberechnung partiell aufgefalteter Proteine erlaubte es, bekannte Phänomene der Molkenproteindenaturierung mathematisch zu erklären: die Anwesenheit eines Knicks in der ARRHENIUS-Darstellung der formalen Denaturierungsgeschwindigkeitskonstante, die Verschiebung der Knick-Temperatur in Abhängigkeit von den Milieubedingungen, unterschiedliches thermisches Verhalten genetischer Varianten β -Lg A und B sowie eine Rückkopplung zwischen Aggregation und Auffaltung von Proteinen. Mit dieser neu entwickelten kinetischen Beschreibung gelang es außerdem, DSC-Messungen an α -La und β -Lg-Lösungen mit hoher Genauigkeit zu modellieren, wobei ausschließlich aus HPLC-Analy-

sen berechnete thermodynamische Größen „eingespeist“ wurden. Dadurch konnte das allgemein bekannte Phänomen der Verschiebung der Peak-Temperatur im DSC-Thermogramm von β -Lg mit steigender Heizrate und Proteinkonzentration kinetisch interpretiert und vorhergesagt werden und auch, weshalb dieses Phänomen bei den reinen α -La-Lösungen nicht auftreten kann. Molkenproteinmoleküle erlaubten es, die Bildung von Dimeren, Trimeren und Polymeren während der thermischen Behandlung zu berücksichtigen. Dadurch konnte eine Beziehung zwischen den Ergebnissen von HPLC, DSC und SDS-PAGE mathematisch begründet und durch Untersuchungen an β -Lg AA bestätigt werden.

P5.13

Numerische Simulation der Prallbeanspruchung von Partikelkollektiven

A. Weber¹⁾ (E-Mail: andreas.weber@mvm.uka.de), Prof. Dr.-Ing. H. Nirschl¹⁾

¹⁾Institut für Mechanische Verfahrenstechnik und Mechanik, Universität Karlsruhe (TH), D-76128 Karlsruhe

DOI: 10.1002/cite.200750171

Die Diskrete Elemente Methode (DEM) wird zur Simulation der Verzögerung eines kompakten Partikelpfropfens an einer Prallplatte eingesetzt. Dieser Prozess ist eine innovative Art der Zerkleinerung, bei der die Partikeln aufgrund einer Kombination von Prallbeanspru-

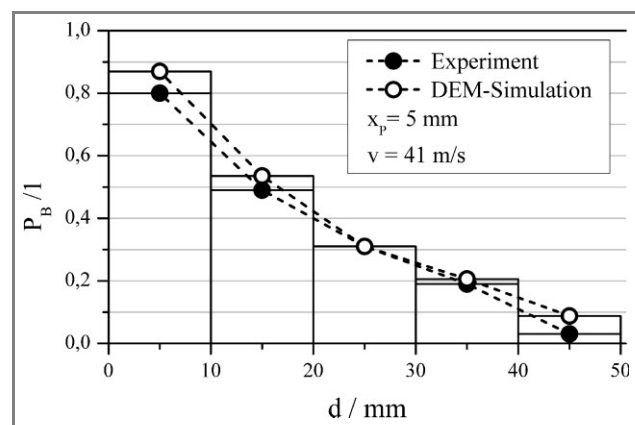


Abbildung 5. Bruchwahrscheinlichkeit P_B von Glaskugeln in Abhängigkeit des Abstandes d der Pfropfschicht zur Prallplatte: Vergleich von Experiment und DEM-Simulation.

chung und interpartikulärer Beanspruchung durch die abrupte Stauchung des Pfpfens vor der Prallplatte zerstört werden.

Zerkleinerungsergebnisse aus Versuchen mit Glaskugeln werden hier präsentiert. Die farbliche Markierung definierter Bereiche des Partikelpfropfens ermöglicht eine detaillierte, ortsauflösende Untersuchung der Zerkleinerungseffizienz. Umlagerungen innerhalb des Pfpfens während seiner pneumatischen Beschleunigung in einem vertikalen Schussrohr werden durch geeignete konstruktive Maßnahmen verhindert,

sodass der Aufbau des Pfpfens beim Verlassen des Schussrohrs seinem ursprünglichen Aufbau vor der Beschleunigung entspricht. Auf diese Weise sind definierte Startbedingungen für die DEM-Simulationen realisiert. Die Einflüsse verschiedener Betriebsparameter wie Ausgangspartikelgröße, Aufprallgeschwindigkeit und Pfpfenhöhe auf das Zerkleinerungsergebnis werden diskutiert.

Einzelkorn-Pralllexperimente dienen zur Bestimmung der Parameter eines von Vogel [1] vorgestellten Zerkleinerungsmodells. Anhand der Ergebnisse

der Einzelkornexperimente wird das verwendete DEM-Modell hinsichtlich der maximal auftretenden Druckkräfte während eines Kontakts kalibriert. Die Beschreibung der Wechselwirkungen zwischen den Partikeln bzw. einem Partikel und der Prallplatte erfolgt mittels des Kontaktmodells nach Hertz Mindlin. Zwischen den Ergebnissen aus DEM-Simulationen und Experimenten ergeben sich gute Übereinstimmungen.

[1] L. Vogel, W. Peukert, *Chem. Eng. Sci.* 2005, 60, 5164.

P5.14

Co-Kristallisation – Ein Verfahren zur Produktgestaltung energetischer Materialien

U. Förter-Barth¹⁾, Dr. M. Herrmann¹⁾ (E-Mail: michael.herrmann@ict.fraunhofer.de), Dr. P. B. Kempa¹⁾, Prof. U. Teipel²⁾

¹⁾Fraunhofer ICT, J.-v.-Fraunhofer-Straße 7, D-76327 Pfinztal

²⁾Fachhochschule Nürnberg, Mechanische Verfahrenstechnik, Wassertortstraße 10, D-90489 Nürnberg

DOI: 10.1002/cite.200750325

Co-Kristalle repräsentieren neue Strukturmodelle, die insbesondere in der Pharmaindustrie großes Interesse erfahren, da anstelle einer additiven Kombination der Eigenschaften der Komponenten eine überproportionale Wirkungssteigerung im Co-Kristall erzielt werden kann. Der Begriff Co-Kristall wird für ganz unterschiedliche Strukturen verwendet. Im einfachsten Fall werden Co-Kristalle als Produkte einer Co-Kristallisation von zwei oder mehreren Komponenten definiert. Konkreter sind strukturell orientierte Definitionsversuche, die die Wechselwirkung der Komponenten im Produkt beschreiben, z. B. nicht-kovalente Bindungen.

Co-Kristallisationsversuche wurden mit den energetischen Materialien Tetramethylen tetranitramin (HMX) und Trimethylen trinitramin (RDX) begonnen. Ein erster Versuch bestand darin, die Oberfläche je eines HMX- und eines RDX-Partikels anzulösen und die Partikel in Kontakt zu bringen. Nach Verdampfung des Lösemittels haften die beiden Partikel fest aneinander. Weitere Versuche umfassten die Verdampfungskristallisation, die Fällung und die Kühlkristallisation von Lösungen und Lösungsgemischen, auch unter Verwendung von Impfkristallen. Die Verfahren lieferten ein breites Probenspektrum,

das von sehr feinen Pulvern bis zu grobkörnigen Partikeln reicht.

Zur Analyse der hergestellten Partikel wurden die Lichtmikroskopie, das Rasterelektronenmikroskop und die Röntgenpulverdiffraktometrie eingesetzt. Die abbildenden Methoden liefern insbesondere bei den grobkörnigen Partikeln Informationen über Partikel Aufbau und Habitus. Sie eignen sich zum Nachweis grober Co-Kristalle, geben jedoch kaum Informationen über den Bindungsstatus. Eine Unterscheidung der Komponenten auf Basis der Kristallstruktur liefert die Röntgenpulverdiffraktometrie.

P5.15

Ein neuartiger Magnetfilter zur selektiven Bioseparation

Dipl.-Ing. C. Eichholz¹⁾ (E-Mail: christian.eichholz@mvm.uka.de), Dipl.-Ing. M. Stolarski¹⁾, Dipl.-Ing. M. Silvestre²⁾, PD Dr.-Ing. M. Franzreb²⁾, Prof. Dr.-Ing. H. Nirschi¹⁾

¹⁾Institut für Mechanische Verfahrenstechnik und Mechanik, Universität Karlsruhe (TH), Straße am Forum 8, D-76131 Karlsruhe

²⁾Institut für Technische Chemie, Forschungszentrum Karlsruhe, Hermann-von-Helmholtz-Platz 1 D-76344 Eggenstein-Leopoldshafen

DOI: 10.1002/cite.200750090

Die Biotechnologie wird als die Schlüsseltechnologie für das 21. Jahrhundert bezeichnet. Allerdings bündelt die Aufbereitung des Zielprodukts in der Biotechnologie im Downstream Processing heute teilweise bis zu 80 % der Betriebs-

und Investitionskosten. Im Sinn einer kostengünstigen und nachhaltigen Biotechnologie wird daher vermehrt die Aufmerksamkeit auf die Entwicklung und Anwendung neuer hybrider Trenntechniken gelegt. Ein Beispiel hierfür ist

die selektive Bioseparation. Dabei werden spezielle Magnetbeads auf Polymerbasis mit eingebetteten magnetischen Nanopartikeln und einer auf das Zielprodukt abgestimmten Oberflächenfunktionalisierung als Trägerpartikel