

als Wissenschaft angesehene Technik bringen könnten. Einige dieser Verfahren werden vorgestellt und es wird gezeigt, wie diese durch die kombinierte Entwicklung neuer Verfahren und Geräte eingesetzt werden können.

Basierend auf einem neuen Kristallisationsverfahren und Probenträger wurde ein Gerät entwickelt, das über op-

tische Messungen potenzielle Kristallisationsbedingungen für die jeweiligen Proteine erkennen lässt. Durch die Möglichkeit, die Wechselwirkungen zwischen gelösten Proteinmolekülen in einem Kristallisationsexperiment messen zu können, lassen sich aus einer Serie solcher Messungen Trends analysieren und Vorhersagen für eine verbes-

serte Zusammensetzung der Kristallisationslösung treffen. Ein iterativer Prozess aus Probenpräparation, Messung und Vorhersage neuer Lösungsparameter kann damit schneller und vor allem zielgerichteter zu hochwertigen Proteinkristallen führen.

V22.09

Applikationen der Medium-Resolution-NMR-Spektroskopie in der Prozessanalytik: Potenzial und Herausforderungen

Dr. G. Guthausen¹⁾ (E-Mail: gisela.guthausen@kit.edu), F. Dalitz¹⁾, N. Zientek²⁾, Prof. Dr.-Ing. H. Nirschl¹⁾, Prof. Dr.-Ing. M. Kraume³⁾, Dr. M. Maiwald²⁾

¹⁾Karlsruher Institut für Technologie (KIT), Institut für Mechanische Verfahrenstechnik und Mechanik, Straße am Forum 8, D-76131 Karlsruhe, Germany

²⁾BAM Bundesanstalt für Materialforschung und -prüfung, Richard-Willstätter-Straße 11, D-12489 Berlin, Germany

³⁾TU Berlin, Institut für Prozess- und Verfahrenstechnik, Straße des 17. Juni 135, D-10623 Berlin, Germany

DOI: 10.1002/cite.201250110

Die kernmagnetische Resonanz (NMR) erlaubt über die zeitaufgelöste Messung der chemischen Verschiebung und der Kopplungskonstanten eine andere Blickweise auf Moleküle, die an Reaktionen und anderen dynamischen Prozessen beteiligt sind und ermöglicht somit die Charakterisierung von Prozessen, die über optische Eigenschaften funktionaler Gruppen oft nicht zugänglich sind, z. B. Hydrierungen oder Isomerisierungen. Die MR-NMR-Spektroskopie, basierend auf Permanentmagneten mit ¹H-Frequenzen von 2 bis 85 MHz, kann sich dort als vorteilhaft erweisen, wo schnelle, zerstörungsfreie und integral arbeitende Methoden erforderlich sind und zudem in rauen Umgebungen gearbeitet werden muss [1]. Einige Herausforderungen für Online-Untersuchungen sind noch zu bewältigen. Ein Durchfluss-Probenkopf muss konstru-

iert werden, der im Hinblick auf Sensitivität und Selektivität optimiert werden muss. Auswirkungen des Strömungsverhaltens in der Flusszelle [2] sowie Materialeigenschaften sind hierbei zu berücksichtigen. Verschiedene Anwendungen in der Prozesskontrolle wurden bereits aufgezeigt. Unter anderem konnten chemische Reaktionen hinsichtlich Stoffumsatz und Kinetik über die MR-NMR-Spektroskopie beobachtet werden und zeigen die vielversprechende Einsetzbarkeit der MR-NMR Spektroskopie zur Prozesskontrolle.

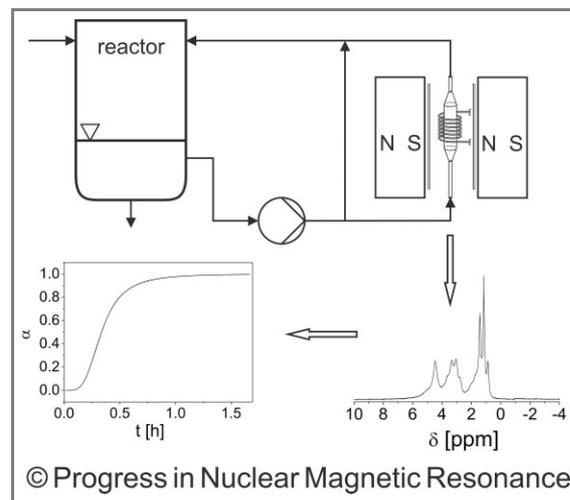


Abbildung.

[1] A. Nordon, *Analyst* **2001**, 126 (2), 260.

[2] F. Dalitz, *Chem. Eng. Sci.* **2012**, 75, 318.

V22.10

SAXS-Charakterisierung von SiO₂-Nanopartikeln zur Erforschung der stattfindenden Partikelwachstumsvorgänge im Stöber-Prozess

A. Gutsche¹⁾ (E-Mail: alexander.gutsche@kit.edu), Prof. Dr.-Ing. habil. H. Nirschl¹⁾

¹⁾Karlsruher Institut für Technologie, Institut für Mechanische Verfahrenstechnik und Mechanik, Straße am Forum 8, D-76131 Karlsruhe, Germany

DOI: 10.1002/cite.201250116