



# **TU GRAZ** *research*

## **Prestigeträchtige Space-Connection *Prestigious Space Connection***

Thermomechanische Verfahren bei der Metallverarbeitung ■ Verfolgung einzelner Biomoleküle jenseits der optischen Auflösungsgrenze ■ Wie Roboter autonom und zuverlässig werden ■ Mobilität: Der gesamten Auswirkung auf der Spur ■ Schwefelfänger für die Biomassennutzung

*Thermomechanical Treatments in Metalworking ■ Tracking Single Biomolecules beyond the Optical Resolution ■ How Robots are Increasingly Becoming Autonomous and Reliable ■ Mobility: Looking for the Overall Effect ■ Capturing Sulfur for Enhanced Use of Biomass*

# Inhalt/Contents

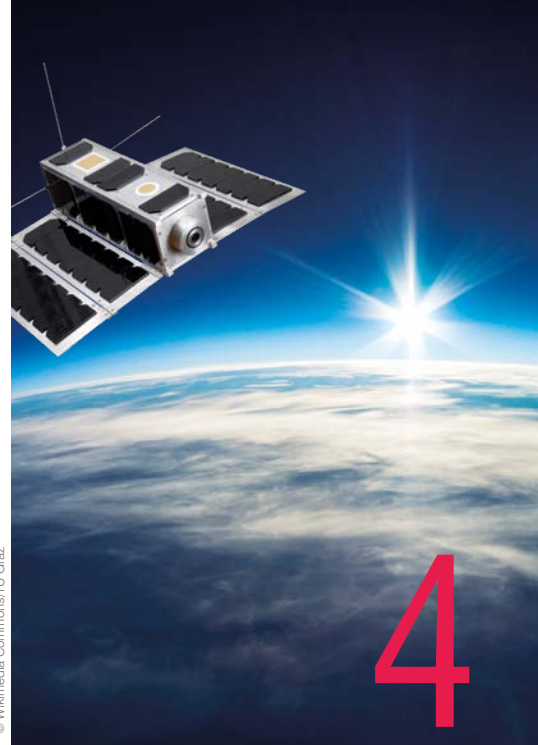
## 3 Vorwort / Preface

## On the Top

## 4 Prestigeträchtige Space-Connection

### *Prestigious Space Connection*

Doris Griesser



© Wikimedia Commons/TU Graz

# 4

## Fields of Expertise

WISSENSCHAFTERINNEN UND WISSENSCHAFTLER PRÄSENTIEREN AUSGEWÄHLTE PROJEKTE UND FORSCHUNGSBEREICHE IM RAHMEN DER FÜNF FIELDS OF EXPERTISE (FoE)

SCIENTISTS PRESENT SELECTED PROJECTS AND RESEARCH AREAS IN THE FRAMEWORK OF THE FIVE FIELDS OF EXPERTISE (FoE)

### 10 Advanced Materials Science

Klaus Reichmann, Leiter/Head of FoE „Advanced Materials Science“

### 11 Thermomechanische Verfahren bei der Metallverarbeitung

*Thermomechanical Treatments in Metalworking*

Cecilia Poletti

### 14 Human & Biotechnology

Bernd Nidetzky, Leiter/Head of FoE „Human & Biotechnology“

### 15 Verfolgung einzelner Biomoleküle jenseits der optischen Auflösungsgrenze

*Tracking Single Biomolecules beyond the Optical Resolution*

Zdeněk Petrášek

### 18 Information, Communication & Computing

Johannes Wallner, Leiter/Head of FoE „Information, Communication & Computing“

### 19 Wie Roboter autonom und zuverlässig werden

*How Robots are Increasingly Becoming Autonomous and Reliable*

Gerald Steinbauer

### 22 Mobility & Production

Helmut Eichlseder, Leiter/Head of FoE „Mobility & Production“

### 23 Mobilität: Der gesamten Auswirkung auf der Spur

*Mobility: Looking for the Overall Effect*

Helmut Brunner  
Mario Hirz

### 26 Sustainable Systems

Urs Hirschberg, Leiter/Head of FoE „Sustainable Systems“

### 27 Schwefelfänger für die Biomassennutzung

*Capturing Sulfur for Enhanced Use of Biomass*

Moritz Husmann

## Life

FORSCHUNG UND TECHNIK IM ALLTÄGLICHEN – WIE FORSCHUNGSERGEBNISSE AUF UNSER LEBEN WIRKEN UND ES VERBESSERN KÖNNEN

RESEARCH AND TECHNOLOGY IN EVERYDAY LIFE: HOW RESULTS OF RESEARCH AFFECT OUR LIVES AND CAN IMPROVE THEM

### 30 Innovative Kontrastmittel für den medizinischen Durchblick

*Innovative Contrast Media for Medical Imaging Techniques*

Annemarie Happe

## Cooperations

GEMEINSAM FORSCHEN UND ENTWICKELN – WIE SPEZIALISIERTE INTERDISZIPLINÄRE ZUSAMMENARBEIT IN ERFOLG UND WEITERENTWICKLUNG RESULTIERT

CONDUCTING RESEARCH AND DEVELOPMENT TOGETHER: HOW INTERDISCIPLINARY COOPERATION BETWEEN EXPERTS LEADS TO SUCCESS AND FURTHER DEVELOPMENT

### 33 Pflanzentreibstoff 2.0

*Biofuels 2.0*

Verena Ahne

## Internationalisation

EXZELLENTRE FORSCHUNG STREBT NACH LEBENDIGEM AUSTAUSCH IN GLOBALEN NETZWERKEN – WIE DIE TU GRAZ DEN INTERNATIONALEN FORSCHUNGSDIALOG LEBT

EXCELLENT RESEARCH ASPIRES TO A LIVELY EXCHANGE IN THE GLOBAL NETWORK: GRAZ UNIVERSITY OF TECHNOLOGY AND INTERNATIONAL RESEARCH DIALOGUE

### 36 Neue Materialien aus der Quantenwelt

*Novel Materials Created in the Quantum World*

Wolfgang E. Ernst  
Werner Schandor



Horst Bischof  
Vize rektor für Forschung  
Vice Rector for Research

**Liebe Kolleginnen und Kollegen, sehr geehrte Forschungspartnerinnen und -partner  
und an unserer Forschung Interessierte!**

***Dear colleagues, research partners and everyone interested in our research activities,***

Im letzten TU Graz *research* durfte ich über zwei ERC Starting Grants berichten, diesmal gibt es wieder eine Reihe von Forschungserfolgen zu vermelden, auf die wir als TU Graz sehr stolz sind. Allen voran ist Hermann Scharfetters 2,5-Millionen-Euro-Projekt CONQUER zu nennen, mit dem er bei FET Open erfolgreich war.

FET Open ist wirklich kompetitiv, von 600 eingereichten Projekten wurden nur 24 genehmigt. Was mich besonders freut, ist, dass die Antragstellung des Projektes mit einer Anschubfinanzierung unterstützt wurde. Daran sieht man, dass dies ein effektives Instrument ist. Einen weiteren Erfolg kann Otto Koudelka mit OPS-SAT verzeichnen. Im Auftrag der ESA soll um 2,4 Millionen Euro ein Nanosatellit entwickelt werden, der zum Testen von Software direkt im orbitalen Flug Verwendung finden soll. Dieses Projekt unterstreicht einmal mehr die Vorreiterrolle der TU Graz im Bereich der Nanosatelliten. Diese und viele andere Beispiele erfolgreicher Projekte unterstreichen die Exzellenz der TU Graz in der Forschung.

Um auch in Zukunft von solchen Erfolgen berichten zu können, müssen wir die Forschung im Haus weiter stärken. Eines der Instrumente dazu ist das Leadprojekt. Leadprojekte sind interdisziplinäre, eher grundlagenorientierte Projekte, mit denen die TU Graz bereits eine nachgewiesene internationale Sichtbarkeit hat. Leadprojekte sollen in der neuen Leistungsvereinbarungsperiode mit bis zu zwei Millionen Euro gefördert werden. Vor Kurzem wurde die Vorantragstellung abgeschlossen, sieben sehr gute Projektanträge wurden eingereicht. Vier Konsortien haben sich aufgrund des internen Feedbacks und des Evaluierungsverfahrens entschieden, einen Vollertrag zu stellen. Die Projekte sind: Dependable Internet of Things in Adverse Environments; High Efficiency Pt-Free Low Temperature Fuel Cell; Materials for Energy Technologies and Beyond sowie Simulation Methods in Computational Sciences. Sie zeigen einen schönen Querschnitt durch verschiedene FoE. Die Vollerträge werden international begutachtet (FWF hat die Gutachter/innen-Auswahl übernommen) und am 23. Juni findet dann im Beisein der internationalen Jury ein öffentliches Hearing statt, bei dem dann die Auswahl der Leadprojekte getroffen wird. Die Projekte sollten dann mit 1. Jänner 2016 der neuen LV-Periode starten.

Das Semester neigt sich dem Ende zu, die Ferien stehen vor der Tür und ich wünsche Ihnen und Ihren Familien einen erholsamen Sommer. Mögen Sie ein wenig Zeit finden, sich in die Lektüre dieses TU Graz *research* zu vertiefen. Eine interessante und vielseitige Auswahl von Texten erwartet Sie.

*In the last issue of TU Graz research I was able to report about two ERC Starting Grants. This time I have another range of research successes to announce of which we at Graz University of Technology are extremely proud. The most notable success is Hermann Scharfetter's 2.5 million euros CONQUER project, which was approved by FET Open.*

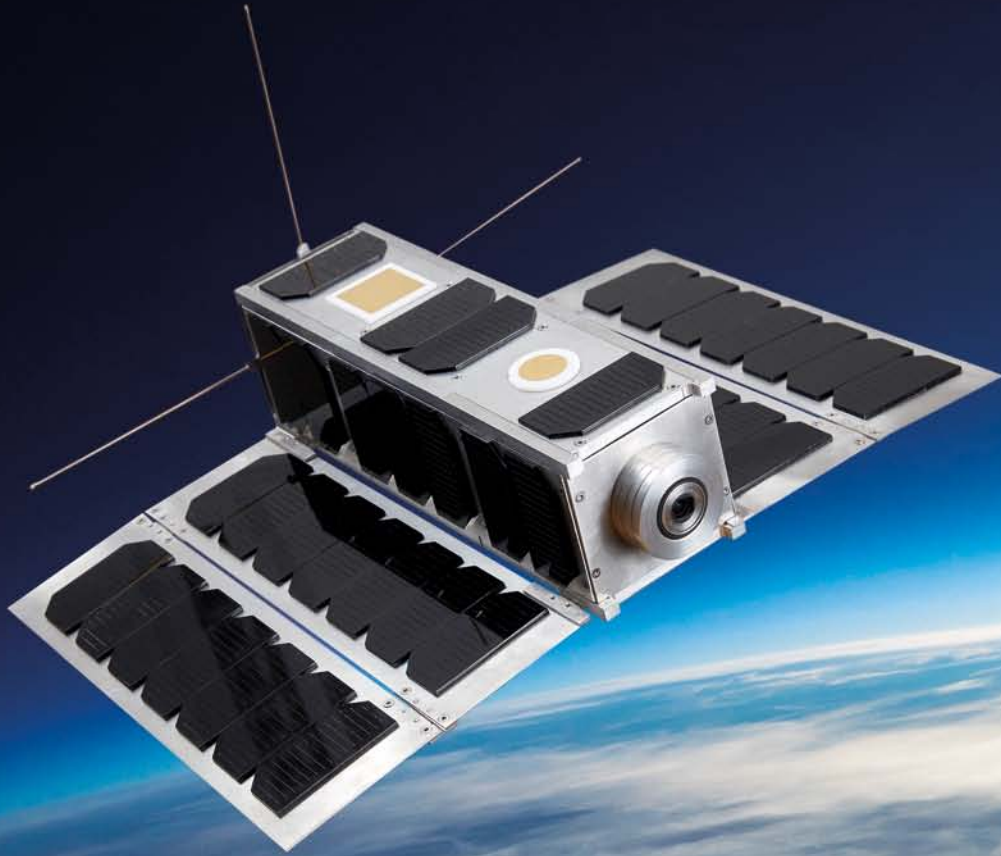
*FET Open is truly competitive: out of 600 submitted projects, only 24 were approved. What I find especially gratifying is that the project proposal was supported with start-up funding, which as you can see from this is an effective instrument. Another success was notched up by Otto Koudelka with OPS-SAT. Commissioned by ESA, a nanosatellite is to be developed for about 2.4 million euros to be used to test software in orbital flight. This project underscores once again the pioneering role of Graz University of Technology in the field of nanosatellites. These and many other examples of successful projects highlight the excellence of Graz University of Technology in research.*

*To be able to report about such successes in the future, we have to continue to strengthen research internally. One of the instruments for doing so is the lead project. Lead projects are interdisciplinary and basic research-oriented projects that have already given Graz University of Technology a proven international track record. In the new performance agreement period, lead projects are to be funded to the amount of 2 million euros. Recently the preliminary applications were assessed and seven very good project proposals finally submitted. Four consortia have decided to submit a full proposal due to internal feedback and the evaluation process. The projects are Dependable Internet of Things in Adverse Environments, High Efficiency Pt-Free Low Temperature Fuel Cell, Materials for Energy Technologies and Beyond, and Simulation Methods in Computational Sciences. They offer a suitable cross section from the various Fields of Expertise. The full proposals are being internationally appraised (the Austrian Science Fund is in charge of selecting reviewers) and on 23 June a public hearing will take place in the presence of the international jury where the lead projects will be chosen. The projects will start at the beginning of the new performance agreement period on 1<sup>st</sup> January 2016.*

*The semester is drawing to a close and the summer vacation is about to begin, so I'd like to wish you and your families a relaxing break. I hope that you can find time to immerse yourselves in this TU Graz research, where an interesting and varied selection of articles awaits you.*

*Horst Bischof*





Doris Griesser

## Prestigeträchtige Space-Connection *Prestigious Space Connection*

Vor zwei Jahren schickte Österreich seinen ersten Satelliten ins All. Der an der TU Graz entwickelte Nano-satellit liefert neue Erkenntnisse zur Entstehung von Sternen und Planeten. Der Erfolg dieses Unternehmens veranlasste die ESA, die Grazer Forscherinnen und Forscher nun mit einem weiteren Satellitenprojekt zu beauftragen: Ab 2017 soll OPS-SAT neue Weltraumtechnologien erstmals direkt im orbitalen Flug testen.

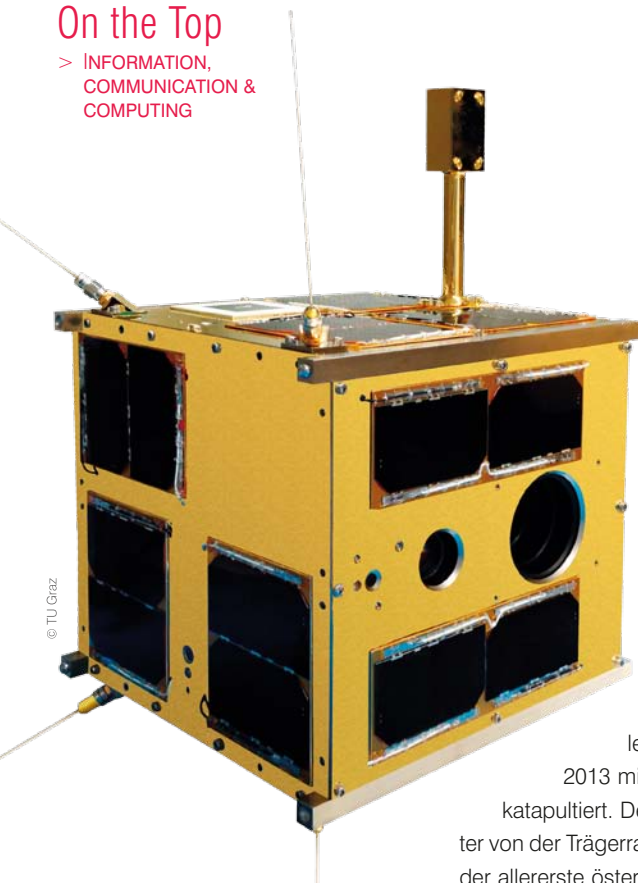
*Two years ago Austria sent its first satellite into space. Developed at Graz University of Technology, the nano-satellite revealed new findings about the origin of the stars and planets. The success of this enterprise induced ESA to commission the Graz researchers with a further satellite project. In 2017, OPS-SAT will test new space technologies in orbital flight for the first time.*

**Abbildung 1:**  
**Fliegendes Weltraum-Labor: OPS-SAT ist die erste**  
**Nanosatellitenmission der ESA und soll 2017 ins**  
**All starten – unter der Leitung der TU Graz.**

**Figure 1:**  
**Flying space lab: OPS-SAT is ESA's first**  
**nanosatellite mission and should be launched in**  
**2017 under the management of Graz University**  
**of Technology.**

**F**rüher suchten Nationen die Anerkennung der Welt auf dem „Feld der Ehre“. Heute ist das Weltall jener Bereich, in dem sich Prestige im großen Stil gewinnen lässt. Wer dort erfolgreich Projekte durchführt, erwirbt sich quasi den Ritterschlag zum globalen Technologie-Führer bzw. zur globalen Technologie-Führerin. Dass auch kleine Länder wie Österreich vom Prestige der Weltraumtauglichkeit profitieren können, zeigt sich am bemerkenswerten Umstand, dass österreichisches Know-how mittlerweile bei fast jeder NASA- oder ESA-Mission mit an Bord ist. Über 50 österreichische Unternehmen produzieren heute Weltraumtechnik, aus der Weltraumpräsenz der Alpenrepublik entstanden rund 1.000 Arbeitsplätze. Am Renommee Österreichs als kleine, feine Weltraumnation hat die TU Graz maßgeblich mitgewirkt. Wurde doch der erste österreichische Satellit im All, TUGSAT-1, in Graz konzipiert und gebaut. Wie es sich für eine Weltraumnation gehört, hat Österreich dank dieser Mission seit 2011 sogar ein eigenes Weltraumgesetz. Darin ist festgelegt, wie lange ein Satellit im All bleiben darf und dass jeder Staat für die von seinen Weltraumprojekten verursachten Schäden verantwortlich ist. „Dabei geht es vor allem um mögliche Kollisionen mit anderen Satelliten“, erläutert Otto Koudelka, Leiter des Instituts für Kommunikationsnetze und Satellitenkommunikation der TU Graz und Mastermind von TUGSAT-1. „Vor Satellitenabstürzen braucht man sich dagegen nicht zu fürchten, denn Minisatelliten verglühen, bevor sie in die Erdatmosphäre eintreten.“ >

**E**arlier, nations sought the recognition of the world on the “field of valour”. But today, space is the field where prestige can be won in the grand style. Whoever carries out successful space projects, earns their spurs as a global technology leader. That small countries such as Austria can benefit from the prestige of space capability is shown in the remarkable fact that Austrian know-how is meanwhile used in almost every NASA or ESA mission. More than 50 Austrian companies produce space technology today, and about 1,000 jobs can be attributed to the Alpine republic's presence in space. Graz University of Technology has played a significant role in building the reputation of Austria as a small but smart space nation. After all, the first Austrian satellite to be launched into space – TUGSAT-1 – was conceived and built in Graz. As is fitting for a space nation, thanks to this mission Austria has had its own space law since 2011. This law legislates on how long a satellite is allowed to remain in space and that each state is responsible for any damages arising from its space projects. “What is important here are possible collisions with other satellites,” explains Otto Koudelka, head of the Institute of Communication Networks and Satellite Communications at Graz University of Technology and mastermind of TUGSAT-1. “But we don't have to be worried about falling satellites because minisatellites burn up before they enter the Earth's atmosphere.” >



© TU Graz

## Der erste österreichische Satellit

Seit über zwei Jahren umkreist TUGSAT-1 als einer von fünf Nanosatelliten nun die Erde. Gemeinsam mit seinem Schwestersatelliten UniBRITE, der von der Universität Wien in Kanada in Auftrag gegeben wurde, und drei weiteren Kleinsatelliten aus Kanada und Polen wurde TUGSAT-1 im Februar

2013 mit einer indischen Rakete ins All

katapultiert. Der Grazer Satellit wurde als erster von der Trägerrakete abgekoppelt und ist damit der allererste österreichische Satellit im Weltraum. Seine Aufgabe ist es, Daten über die Helligkeitsschwankungen bestimmter Sterne zu sammeln. Von diesen Informationen erhofft sich die Wissenschaft neue Erkenntnisse über die Entstehung dieser Sterne, unseres Universums und nicht zuletzt von Leben. „Aus den ursprünglich geplanten zwei Jahren im All werden letztlich vier werden“, berichtet Otto Koudelka. „Danach wird uns die Auswertung der wertvollen Daten auf Trab halten.“

## Die neue Mission

Für Begeisterung bei den österreichischen Weltraum-Aficionados sorgt auch die kürzlich erfolgte Zusage für ein weiteres Nanosatellitenprojekt: 2,4 Millionen Euro stellt die europäische Weltraumorganisation ESA der TU Graz für deren neue Mission namens OPS-SAT zur Verfügung. „In diesem Projekt wollen wir Weltraumsoftware während des orbitalen Flugs auf ihre Zuverlässigkeit testen“, so Otto Koudelka, Leiter der 2017 startenden Mission. Mit diesen In-Orbit-Tests wird erstmals ein strenges Tabu der Raumfahrt gebrochen: „Aus Gründen der Sicherheit setzt die ESA ebenso wie andere Weltraumorganisationen auf bewährte Technologie: Was einmal funktioniert, wird nicht mehr angetastet“, erläutert Koudelka. „Im Satellitengeschäft herrschen deshalb zum Teil noch die Kommunikationsstandards aus den 1980er-Jahren, und auch die IT-Infrastruktur ist nicht viel jünger.“ Um die Tür für Neues zu öffnen, sollen im fliegenden Labor OPS-SAT verbesserte Prozessoren, Funkempfänger und Weltraumsoftware mit geringem Risiko unter realen Bedingungen getestet werden.

## The first Austrian satellite

TUGSAT-1 has been orbiting the Earth for two years now and is one of five nanosatellites to be doing so. Together with its sister satellite UniBRITE, whose construction in Canada was commissioned by the University of Vienna, and three other small satellites from Canada and Poland, TUGSAT-1 was fired into space on an Indian rocket in February 2013. The Graz satellite was the first to be jettisoned by the carrier rocket and thus became the first Austrian satellite in space. Its task is to collect data about the variability of brightness of particular stars. From this information science hopes to gain new knowledge about the origin of these stars, our universe and, not least, life itself. “The originally planned two years in space turned into four,” reports Otto Koudelka. “Then evaluating all this useful data will keep us busy for a while.”

## The new mission

The recently given undertaking for a further nanosatellite project was greeted with enthusiasm by Austrian space aficionados. The European Space Agency, ESA, will make available 2.4 million euros to Graz University of Technology for the new mission named OPS-SAT. “In this project we want to test the reliability of space software during orbital flight,” says Otto Koudelka, project leader of the mission which will be launched in 2017. On the occasion of these in-orbit tests, a strict taboo of space travel will be broken for the first time. “For reasons of safety, ESA relies on well-proven technology – just like other space organisations. What works is left well alone,” explains Koudelka. “Up to



© TU Graz

**Abbildung 3:**  
Modelldarstellung des OPS-SAT mit  
Sonnensegel.

*Figure 3:*  
A model representation of OPS-SAT  
with solar array panels.





© Lughammer - TU Graz

### Viel Arbeit auf kleinstem Raum

„Wir haben auch eine spezielle Elektronik an Bord, mit der die Positionssignale von Flugzeugen aus dem All detektierbar sind“, so der Wissenschaftler. „Damit kann man die Position eines Flugzeugs auch dann feststellen, wenn es sich außerhalb der Reichweite von Bodenstationen befindet.“ Mit der gleichen Hardware soll auch ermittelt werden, welche Funkfrequenzen eine besonders hohe bzw. geringe Störanfälligkeit aufweisen. Mit an Bord ist zudem eine auf die Erde gerichtete Kamera, die einfache Fernerkundungsaufgaben – etwa die Detektion von Waldbränden – erfüllen kann.

Sieben internationale Partner aus Forschung und Wirtschaft sind an dieser Mission beteiligt, die vom Betriebszentrum der ESA in Darmstadt aus dirigiert wird. Um den Minisatelliten bis 2017 startklar zu machen, haben die Grazer Expertinnen und Experten ein dichtes Programm abzuarbeiten: „In diesen zwei Jahren muss der Satellit designet und gebaut werden, die gesamte Software ist zu schreiben, zu integrieren und zu testen“, so Projektleiter Otto Koudelka. „Allein für die Tests werden wir elf Monate brauchen. Denn erfahrungsgemäß geht alles schief, was vorher nicht sorgfältig getestet wurde.“ >

*a certain extent, the communication standards of the 1980s still prevail in the satellite business, and even the IT infrastructure is not much more recent.” To open the door to new things, improved processors, radio receivers and space software will be tested in OPS-SAT as a flying laboratory – with less risk and under real conditions.*

### Lots of work in very little space

*“We’ve also got a special piece of electronics on board which can detect the positions of aircraft from space via their signals,” the scientist continues. “Through this, the position of an aircraft can be pinpointed when outside the range of the ground station.” Using the same hardware, radio frequency interferences can be identified. Also on board is a camera which is aimed at the Earth and which can carry out simple remote sensing tasks – like the detection of forest fires.*

*Seven international partners from research and industry are involved in the mission. The mission itself will be directed from the ESA operations centre in Darmstadt. To make the minisatellite ready for takeoff by 2017, the Graz experts have to work through a packed programme. “The satellite has to be designed and built in these two years. The whole software will have to be written, integrated >*

### Abbildung 4:

**Der Nanosatellit TUGSAT-1 wurde an der TU Graz entwickelt, gebaut und getestet.**

### Figure 4:

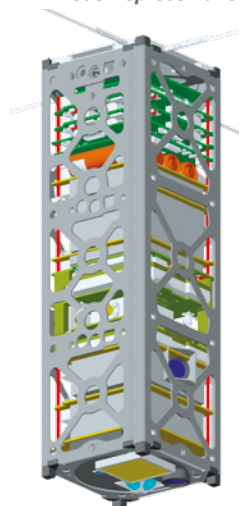
**The TUGSAT-1 nanosatellite was developed, built and tested at Graz University of Technology.**

### Abbildung 5:

**Modelldarstellung des OPS-SAT.**

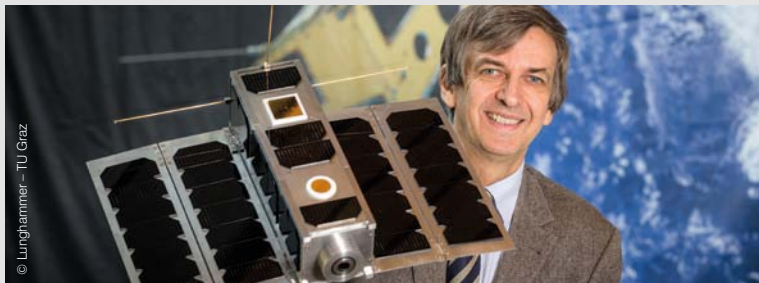
### Figure 5:

**A model representation of OPS-SAT.**



© TU Graz

## „Satellitenvater“ der TU Graz: Otto Koudelka *The “father of the satellite” at Graz University of Technology: Otto Koudelka*



Seit 2003 ist Universitätsprofessor Otto Koudelka Leiter des Instituts für Kommunikationsnetze und Satellitenkommunikation der TU Graz. Hier absolvierte er auch sein Studium der Elektrotechnik, promovierte mit Auszeichnung, habilitierte sich und war seit 1980 in verschiedenen Positionen tätig. Nach einer Gastprofessur an der University of Kansas stand er von 2000 bis 2002 dem Institut für Nachrichtentechnik und Wellenausbreitung vor und leitete von 2002 bis 2012 das Institut für Angewandte Systemtechnik bzw. die Forschungsgruppe Weltraumtechnik und Akustik der Joanneum Research.

Otto Koudelka ist Mitglied zahlreicher Komitees der Europäischen Weltraumagentur ESA, der Internationalen Akademie für Astronautik, Vorsitzender des Space Communications and Navigation Committee der International Astronautical Federation (IAF) sowie österreichischer Delegierter im COST-Ausschuss für Informations- und Kommunikationstechnologien. Für seinen Beitrag zum BRITE-Projekt, in dessen Rahmen der erste österreichische Satellit ins Weltall gelangte, wurde der ambitionierte Wissenschaftler 2014 vom Österreichischen Weltraum Forum mit dem Polarsternpreis ausgezeichnet. Seit über einem Jahrzehnt gilt sein Forschungsinteresse insbesondere Fragestellungen der Kleinsatellitentechnik, an deren Weiterentwicklung er maßgeblich beteiligt ist.

*Professor Otto Koudelka has been head of the Institute of Communication Networks and Satellite Communications at Graz University of Technology since July 2003. He also completed his studies of electrical engineering here, gained his doctoral degree with distinction, qualified as a full professor, and has held a variety of posts since 1980. After a visiting professorship at the University of Kansas, he was head of the Institute of Communications Engineering and Wave Propagation from 2000 to 2002 and headed the Institute of Applied Systems Technology and the research group Space Technology and Acoustics of Joanneum Research from 2002 to 2012.*

*Otto Koudelka is a member of a number of committees of the European Space Agency, the International Academy of Astronautics, chairman of the Space Communications and Navigation Committee of the International Astronautical Federation (IAF), and Austrian delegate to the COST Committee for Information and Communications Technologies. The aspiring scientist was awarded the Pole Star Prize by the Austrian Space Forum for his contribution to the BRITE project in the framework of which the first Austrian satellite was launched into space. His research interests have focused on issues of small-satellite technology for over 10 years, in whose further development he has been largely involved.*

### Nanosatelliten auf dem Vormarsch

Wie TUGSAT-1 wird auch OPS-SAT ein sehr kleiner Satellit werden: 10 mal 10 mal 30 cm sind seine zarten Maße, wobei noch die zwei ausklappbaren Solarzellen von 20 mal 30 cm dazukommen. Das technische Know-how für die extreme Miniatürisierung konnten die Grazer Weltraumexpertinnen und -experten zum Teil bereits im Rahmen der Vorgängermission aufbauen. Mittlerweile boomt die Kleinsatellitentechnologie weltweit. „Vor einigen Jahren noch wurden Nanosatelliten als ‚Weltraummüll‘ und ‚Spielzeug für Universitäten‘ verunglimpft“, lacht Otto Koudelka. „Inzwischen haben Weltraumagenturen und Industrie aber erkannt, dass man damit neue Technologien sehr rasch und kostengünstig ausprobieren kann.“ So kostet etwa die billigste Satellitenmission der ESA an die 40 Millionen Euro, während TUGSAT-1 mit 450.000 Euro auskam. Zurzeit kreisen etwa 250 Kleinsatelliten im All, bis 2020 sollen es bereits an die 2.000 sein, schätzt der Wissenschaftler.

### Weltraumtechnologie im Alltag

Was aber bringt die Weltraumforschung außer Prestige für eine Gesellschaft? „Tatsächlich ist die Weltraumtechnik aus unserem Alltag längst nicht mehr wegzudenken“, ist Otto Koudelka überzeugt. „Man denke nur an die Telekommunikation – auch in Österreich wird die Hälfte aller TV-Programme über Satellit ausgestrahlt. Hier geht es um Milliardenmärkte!“ Auch Wettervorhersagen oder Navigationssysteme beziehen ihre Daten von Satelliten. Ohne Fernerkundungssatelliten hätte man zum Beispiel das Ozonloch nicht entdeckt, die gefährlichen Gase nicht verboten und die ökologische Gefahr letztlich nicht abgewendet. Die Weltraumforschung hat also eine Reihe starker Argumente auf ihrer Seite, vor allem, wenn sie wie die Grazer Projekte auf Nanosatelliten setzt. ■



and tested," adds project leader Otto Koudelka. "For the tests alone we'll need 11 months. Because from experience, everything that hasn't been carefully tested goes wrong."

#### **Nanosatellites on the march**

OPS-SAT will be a very small satellite, just like TUG-SAT-1. 10 x 10 x 30 cm are its tender dimensions, but you have to add on the two fold-out solar cells of 20 x 30 cm. The Graz space experts were able to build up their technical know-how for the extreme miniaturisation to some degree in the context of the previous mission. In the meantime small satellite technology is booming worldwide. "A few years ago nanosatellites were vilified as space debris and toys of universities," adds the scientist with a laugh. "Meanwhile though, space agencies and industry have recognised that new technologies can be tried out very quickly and cheaply this way." The cheapest ESA satellite mission costs around 40 million euros, whereas TUGSAT-1 managed with 450,000 euros. Currently, some 250 small satellites are orbiting in space, and by 2020 there will be about 2,000, estimates Otto Koudelka.

#### **Space technology in daily life**

But what's the point of space research apart from prestige for a society? "As a matter of fact, space technology has become indispensable to daily life," says a convinced Otto Koudelka. "Just think of telecommunication: in Austria, too, half of all TV programmes are broadcast using satellites. At stake are markets worth billions." Weather reports and navigation systems also get their data from satellites. Without remote sensing satellites we wouldn't have discovered the ozone hole, for instance, we wouldn't have prohibited the dangerous gases or been able to avert the ecological danger. Space research has a whole range of arguments on its side, especially when it focuses on nanosatellites, as the Graz projects do. ■

**Abbildung 6:**  
TU Graz-Forscherinnen und -Forscher wurden von der ESA mit dem Nanosatellitenprojekt OPS-SAT beauftragt.

**Figure 6:**  
Researchers at Graz University of Technology were commissioned by ESA with the OPS-SAT nanosatellite project.





# Advanced Materials Science



Klaus Reichmann ist Leiter des FoE „Advanced Materials Science“.  
*Klaus Reichmann is head of the FoE Advanced Materials Science.*

Als Einleitung zum FoE „Advanced Materials Science“ habe ich diesmal die Frage „Gemeinsam oder einsam?“ gewählt. Diese etwas ungewöhnliche Assoziation erwuchs aus der Initiative, unser Masterstudium Advanced Materials Science zu einem NAWI-Studium zu machen. Damit ist die

Frage auch schon beantwortet. Ja, wir wollen in der zuständigen Studienkommission gemeinsam einen Weg finden, die Ressourcen und Fachkompetenzen an der Karl-Franzens-Universität und der Technischen Universität in dieses interdisziplinäre Masterstudium einfließen zu lassen.

Vor allem in den Bereichen Nanotechnologie und Biomaterialien gibt es interessante Aspekte, von denen unsere Studierenden profitieren können. Geplant ist, das NAWI-Konzept in einem englischsprachigen Masterstudium ab dem Wintersemester 2016 umzusetzen.

Erfolgreich abgeschlossen wurde das Berufungsverfahren für die dem FoE zugeordnete §99-Professur. Bernhard Sonderegger, den die berufliche Laufbahn vor einigen Jahren nach Südafrika führte, hat die Stelle angetreten und ist nun engagiert dabei, das Gebiet der Materialsimulation zu verstärken.

Engagiert sind auch Mitglieder unseres FoE in der Organisation von Workshops. Über 60 Teilnehmerinnen und Teilnehmer besuchten den „Atomic Force Microscopy Workshop on Advanced Bio- and Materials Characterisation“, veranstaltet vom Institut für Elektronenmikroskopie und Nanoanalytik in Kooperation mit Bruker Nano Surface Division. Ende Jänner war das Institut für Werkstoffkunde und Schweißtechnik Gastgeber eines Workshops zum Thema „Advanced Materials Modelling for Industrial Practice“ des European Virtual Institute on Knowledge-based Multifunctional Materials (KMM-VIN) gemeinsam mit der Federation of European Materials Societies (FEMS).

In der aktuellen Ausgabe finden Sie folgende Beiträge aus dem FoE „Advanced Materials Science“: Cecilia Poletti vom Institut für Werkstoffkunde und Schweißtechnik berichtet über thermomechanische Verfahren bei der Metallverarbeitung. In der Rubrik „Internationalisation“ werden die Forschungen von Wolfgang Ernst (Institut für Experimentalphysik) vorgestellt: Das Team um Wolfgang Ernst arbeitet mit Kolleginnen und Kollegen aus Italien, Spanien und Deutschland zusammen – gemeinsam erforschen sie neue Materialien aus der Quantenwelt.

*For the introduction to the FoE Advanced Materials Science the question arose as to whether we are planning for the future “together or separately”. I made this association because of the initiative to convert our master’s program Advanced Materials Science into a NAWI program. So the answer to this question is definitely yes to “together”. We want to find a way together to incorporate the resources and expertise of the University of Graz and Graz University of Technology. There are interesting aspects for the benefit of our students especially in the field of Nanotechnology and Biomaterials. We plan to implement an English NAWI program starting in the winter semester 2016.*

*The appointment of a temporary section 99 professorship was successfully implemented in our FoE. Bernhard Sonderegger, who continued his career in South Africa a few years ago, has taken up this position and ambitiously enhances the field of Materials Simulation.*

*Other members of the FoE have organized workshops energetically. More than 60 participants attended the Atomic Force Microscopy Workshop on Advanced Bio- and Materials Characterization held by the Institute of Electron Microscopy and Nanoanalysis in cooperation with Bruker Nano Surface Division. End of January the Institute of Materials Science and Welding hosted the workshop Advanced Materials Modelling for Industrial Practice, a joint event of the European Virtual Institute on Knowledge-based Multifunctional Materials (KMM-VIN) and the Federation of European Materials Societies (FEMS).*

*In this issue you will find the following contributions from the FoE Advanced Materials Science: Cecilia Poletti from the Institute of Materials Science and Welding reports on thermomechanical treatments in metalworking. Wolfgang Ernst’s research (Institute of Experimental Physics) is presented in the Internationalisation section. Wolfgang Ernst’s team works together with colleagues from Italy, Spain and Germany – together they’re are researching into new materials from the quantum world.*

# Thermomechanische Verfahren bei der Metallverarbeitung

## *Thermomechanical Treatments in Metalworking*

Cecilia Poletti

Das Schmieden von Metallen ist eine der ältesten Arbeitstechniken der Menschheit und etwa 6.000 Jahre alt. Die Technik wurde benutzt, um Waren zu produzieren, um Landwirtschaft, Wohnen, Medizin, Transport und jede Art von menschlichen Aktivitäten zu entwickeln. Hochleistungsmetalle und -legierungen werden auch bei hohen Temperaturen umgeformt, um komplexe Formen und hervorragende Eigenschaften zu erzielen.

Ein großer Teil unserer alltäglichen Produkte wird aus Metallen und Legierungen hergestellt. Von Schneidwerkzeugen bis hin zu Satelliten wurden Metalle und Legierungen entwickelt, um die technologische Entwicklung zu unterstützen. Daraus hat sich eine gesamte Produktionskette, angefangen bei der Erzgewinnung bis hin zur Weiterverarbeitung, entwickelt. Die Herstellung von Schwertern ist ein typisches Beispiel für thermomechanische Behandlungen. Obwohl das Schmieden von Metallen in unserem Allgemeinwissen integriert ist, ist die Notwendigkeit dieses Prozesses nicht jedem bewusst. Warum schmelzen wir nicht einfach ein Metall und gießen es in die Form eines beliebigen Produkts?

Thermomechanische Prozesse wie das Schmieden ermöglichen eine Erwärmung und eine plastische Verformung des Materials, um zwei gewünschte Ziele zu erreichen: Dem Werkstück wird eine gewünschte Form gegeben und das Gefüge des Materials wird dadurch modifiziert. Aber warum soll das Gefüge überhaupt verändert werden? Kann man die Mikrostruktur designen?

### **Mikrostrukturänderungen**

Metalle und Legierungen sind heterogene Materialien im Mikro- und Nanometerbereich – wesentliche Veränderungen sind für unser Auge daher auch nicht sichtbar. Die Mikrostruktur von Metallen und Legierungen wird in der Regel als eine Anordnung von Defekten in einem perfekten >

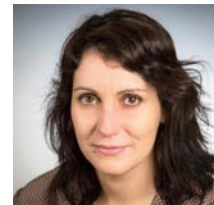
*The forging of metals is one of the oldest working techniques of mankind and about 6,000 years old. It has been used to produce goods to develop agriculture, housing, medicine, transport and any kind of human activity. Advanced metals and alloys are also formed at elevated temperatures to achieve a unique combination of complex shapes and excellent properties.*

*Many of our day-to-day products are made of metals and alloys. From cutting tools to satellites, metals and alloys have been developed to support technological evolution. The whole production chain from extraction of ores up to finishing has evolved accordingly. In this sense, the production of swords is a typical example of a thermomechanical treatment. Although the forging of metals is somehow incorporated in our general knowledge, not everyone is aware of the intricacies of this process. Why don't we just melt a metal and pour it into a mold with the shape of any desired product?*

*During thermomechanical processing, such as forging, the work-piece is heated and plastically deformed to achieve two main objectives: to obtain a desired shape and to modify the material at the microstructural scale. Although the first objective seems to be more or less obvious, what is the meaning and importance of microstructural changes? Can we design the microstructure?*

### **Microstructural modifications**

*Metals and alloys are heterogeneous materials at the micro and nano scales – essential modifications are imperceptible to the eyes. Their microstructure is usually described as an arrangement of defects in a perfect crystal: punctual defects such as voids and linear defects such as dislocations and stacking faults. Dislocations are further arranged into 3D structures called subgrain and grain boundaries to delimit crystallographic homogeneous areas such as subgrains and grains, respectively. In some alloys, such as titanium alloys and steels, allotropic >*



Cecilia Poletti, in Argentinien geboren, studierte Verfahrenstechnik an der Universidad Nacional del Comahue in Neuquén. Seit 2011 ist sie am Institut für Werkstoffkunde und Schweißtechnik tätig, 2012 Habilitation im Fach Werkstoffkunde, seit Juni 2014 Assoc. Professorin. Poletti beschäftigt sich mit Forschungsthemen im Bereich thermomechanischer Prozesse von metallischen Werkstoffen.

*Cecilia Poletti, born in Argentina, studied chemical engineering at the Universidad Nacional del Comahue in Neuquén. Since 2011 she has worked at the Institute of Materials Science and Welding, and did her habilitation in materials science in 2012. Since June 2014 Associate Professor Poletti has conducted research in the field of thermomechanical processing of metallic materials.*



Kristall beschrieben. Die Defekte können nulldimensionaler (Leerstellen) und zweidimensionaler (Versetzungen und Stapelfehler) Art sein. Versetzungen werden weiteres in 3-D-Strukturen, Subkorn- und Korngrenzen eingeteilt, um kristallografisch homogene Bereiche wie Subkörner bzw. Körner abzugrenzen. Titanlegierung und Stahl ermöglichen durch allotrope Umwandlungen die Kombination vieler metallischer Phasen. In den meisten Legierungen können sich intermetallische und harte keramische Partikel während der Erstarrung oder Wärmebehandlung abscheiden.

transformations allow the combination of many metallic phases. And in most alloys, intermetallic and ceramic hard particles precipitate during solidification or heat treatments.

Plastic deformation and thermally activated phenomena occurring during thermomechanical processes are responsible for the modification of the microstructure of alloys, as illustrated in Figure 1. A general raising of the dislocation density hardens the material by plastically deforming it. When processing metals at high temperatures, the mi-

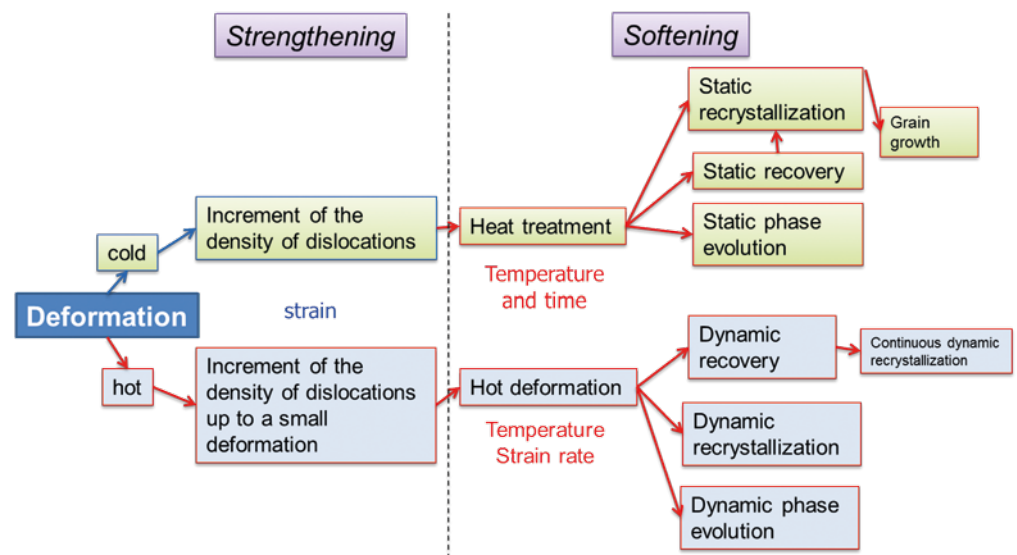


Abbildung 1:  
Gefügeänderungen während  
thermomechanischer Verfahren.  
Figure 1:  
Microstructural evolution during  
thermomechanical processing.

Plastische Verformung und thermisch aktivierte Phänomene, die während thermomechanischer Prozesse stattfinden, verändern das Gefüge von Legierungen (Abbildung 1). Eine allgemeine Erhöhung der Versetzungsdichte wird mittels der plastischen Verformung das Material aushärten. Das Materialgefüge modifiziert sich durch erhöhte Temperaturen: Das Material erholt sich oder rekristallisiert. Statische und postdynamische mikrostrukturelle Veränderungen treten

crostructure is modified by recrystallization and recovery phenomena as a function of time or deformation. Static and post-dynamic microstructural changes occur frequently after hot deformation. After recrystallization, grains grow by capillarity. Precipitates further influence the plastic deformation of metallic materials. While small precipitates hinder the movement of dislocations and boundaries, larger ones can act as nucleation sites for recrystallization. The first ones are

Requirement	Mechanism	Microstructure
<b>Mechanical resistance (strength)</b>	Grain refinement Strain hardening Precipitation hardening Martensitic hardening	Fine grains High dislocation density Fine precipitates within grains Martensitic structure
<b>Creep resistance</b>	Avoid grain boundary diffusion Avoid grain/subgrain boundary movement	Large grains (mono-crystal) Boundaries pinned by precipitates
<b>Fatigue resistance</b>	Crack propagation reduction	Intricate microstructure
<b>Electrical conductivity</b>	Reduction of microstructural defects	Low dislocation density, low amount of precipitates

Abbildung 2:  
Gefüge und Materialeigenschaften.  
Figure 2:  
Microstructure and materials  
properties.

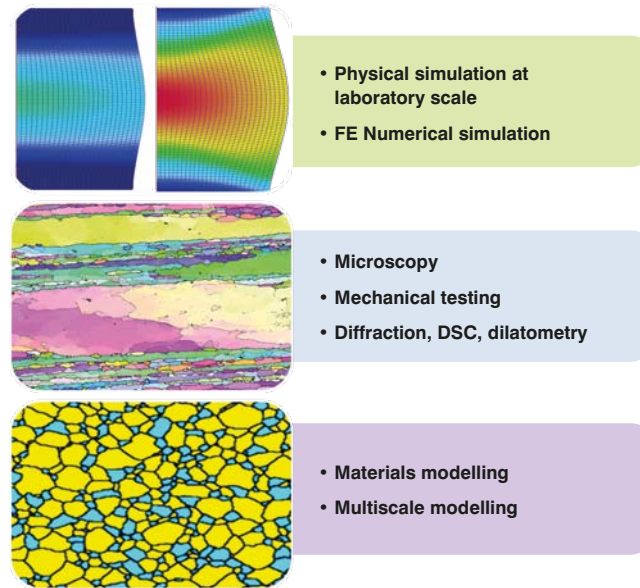
häufig nach der Warmverformung auf. Nach der Rekristallisation vergrößern sich die Körner durch Kapillarwirkung. Weiters beeinflussen die harten Partikel die plastische Verformung von Metallen: Die kleinen Partikel verhindern die Bewegung von Versetzungen und Korngrenzen, die größeren dienen als Keime zur Rekristallisation. Erstere werden verwendet, um das Material zu verfestigen, die großen Ausscheidungen dienen wiederum der Modifizierung der kristallografischen Textur.

All diese Mikrostrukturänderungen können durch einen angemessenen thermomechanischen Prozess gesteuert werden, um erwünschte Eigenschaften zu erzeugen. Manche der beschriebenen Änderungen finden nur statt, wenn das Metall unter plastischer Verformung und Temperatur behandelt wird. Einige Beispiele davon sind in der Tabelle dargestellt (vgl. Abbildung 2).

### Entwicklung und Optimierung thermomechanischer Prozesse

Massivumformprozesse wie Extrusion, Warmwalzen und Schmieden werden verwendet, um das Gussgefüge zu modifizieren. Weiterverarbeitungen sowie Gesenkschmieden, Tiefziehen und Profilextrusion ändern die Mikrostruktur und die Form des fertigen Teiles. Während der Umformprozesse verteilen sich Temperatur und Verformungen im Werkstück nicht homogen. Somit werden heterogene Gefüge und Schädigungen durch triaxiale und heterogene Belastungen erzeugt.

In der letzten Dekade wurden Hypothesen und Theorien sowie neue Charakterisierungsmethoden entwickelt, um thermomechanische Prozesse physikalisch im Detail zu beschreiben. Ziel ist es, Hochleistungslegierungen herzustellen und die Entwicklung von deren Mikrostruktur und Schädigung während der Materialbearbeitung zu interpretieren und vorherzusagen. Dies soll durch die Kombination von kontrollierten Experimenten mit schnellen physikalisch basierten Multiskalenmodellen erfolgen (vgl. Abbildung 3). ■



© Cecilia Poletti

**Abbildung 3:**  
Strategie, um thermomechanische Verfahren zu entwickeln und zu optimieren.

**Figure 3:**  
Strategy to develop and optimize thermomechanical processing.

*used to strengthen the material, and the large ones to modify the crystallographic texture.*

*All the microstructural changes described above can be controlled in an appropriate thermomechanical process to achieve the desired properties in the final product. Many of these modifications can be achieved only if the metal is subjected to both plastic deformation and temperature. Some examples of microstructure requirements are shown in Figure 2.*

### Development and optimization of thermomechanical processes

*Bulk metal forming operations such as extrusion, hot rolling and forging are widely used to transform the cast microstructure. Further processing, such as close-die forging, deep drawing and profile extrusion, also modifies the microstructure and, more importantly, the shape of the final part. During forming processes, temperature, strain and strain rate are not homogeneous within the workpiece. Thus, heterogeneous microstructures and damage due to triaxial and heterogeneous loads are generated.*

*Many scientists and engineers all around the world have been conducting research to find hypotheses and theories as well as characterization methodologies to explain and describe the physical mechanisms involved in thermomechanical processing. The main goals are to design advanced products for high performance applications and to interpret and describe the evolution of their microstructure and damage during processing. The combination of controlled experimental data with fast physically-based multi-scale models is the key for a comprehensive understanding of the phenomena involved (see Figure 3). ■*

# Human & Biotechnology



Bernd Nidetzky ist Leiter des FoE „Human & Biotechnology“. *Bernd Nidetzky is head of the FoE Human & Biotechnology.*

Die Fachbeiträge aus dem FoE „Human & Biotechnology“ setzen dieses Mal den Schwerpunkt auf das Thema Imaging (bildgebende Verfahren). Es handelt sich zweifellos um ein disziplinenübergreifendes zentrales Stärkefeld innerhalb dieses FoE mit internationaler Sichtbarkeit und breiter

Vernetzung an unserer Universität, am Standort Graz und darüber hinaus. Modernes Imaging benötigt komplexe Methoden – teilweise mit molekularer Auflösung. Verschiedene Forscher/innengruppen

an der TU Graz sind führende Innovationstreiberinnen auf diesem Gebiet mit hochdynamischer Entwicklung. Die Beiträge zeigen die Breite der verschiedenen Anwendungsmöglichkeiten mit Untersuchungen auf Niveau des biologischen Einzelmoleküls bis hin zum systemischen Studium von komplexen Geweben und von Organen.

Der Beitrag über Hermann Scharfetters Forschungen (vgl. Seite 30–32) ist aus Sicht des FoE in mehrerlei Hinsicht wert, hervorgehoben zu werden. Der Erfolg seines Projekts CONQUER im Rahmen des EU-Exzellenzprogramms FET Open verdient unsere herzliche Gratulation und Anerkennung. Die für dieses Projekt enorm wichtige Kooperation zwischen biomedizinischer Technik und Chemie zeigt die Bedeutung der aktiven Vernetzung innerhalb dieses FoE und mit anderen FoE an der TU Graz. Zu guter Letzt freut es uns sehr, dass eine Anschubfinanzierung aus dem FoE „Human & Biotechnology“ ein wenig dazu beigetragen hat, so erfolgreiche Projekte auf Schiene zu bringen. Wenn es ein Argument bräuchte, die ohnehin sehr gut aufgenommene und erfolgreiche Initiative der Anschubfinanzierung von Vizerektor Bischof fortzusetzen, wäre das Projekt von Scharfetter ein sehr überzeugendes.

In fachlich-personeller Hinsicht warten auf unser FoE sehr spannende Zeiten. Die Berufungskommission aus „Technologie von Biomaterialien“ hat ihre Arbeit abgeschlossen, jene aus „Molekularer Biotechnologie“ die ihre gerade angenommen. Ebenso wie es in den Fachbereichen Computational Biotechnology und Bioinformatik kürzlich gelungen ist (die letzte Ausgabe des Forschungsjournals berichtete darüber), hoffen wir, uns im FoE über diese anstehenden Berufungen in diesen Gebieten erfolgreich verstärken zu können.

*Contributions from the FoE Human & Biotechnology to this issue of TU Graz research focus on imaging methods and their applications. Imaging constitutes a core expertise and main strength across the scientific disciplines represented in this FoE. It provides a basis for many collaborations at our university and in science networks in and beyond Graz. Modern imaging and visualization require sophisticated methods, often capable of molecular resolution. Different groups at Graz University of Technology are innovation leaders in the highly dynamic field of imaging that has seen important recent developments. Contributions to this issue reveal the broad application-oriented scope of imaging methods which enable studies to be carried out at the single molecule level as well as allowing for systemic investigation of complex tissues and even organs.*

*The article about Hermann Scharfetter's project (cf. page 30–32) is noteworthy in different respects and is a special highlight of the FoE. The recent success of Scharfetter's project CONQUER in the EU Framework Programme FET Open deserves comprehensive recognition and commendation. Collaboration between biomedical engineering and chemistry constitutes a core element of this project, demonstrating the importance of active networks across disciplines within this FoE and with other Fields of Expertise at Graz University of Technology. Lastly, it is gratifying to see that start-up funding from the FoE Human & Biotechnology has had a small role in getting the now successful project application off the ground. If ever an argument was required to support the (in any case) very well received and broadly successful initiative of Vice Rector Bischof regarding the so-called start-up funding, Scharfetter's project would be a compelling one.*

*Concerning its main people, the FoE can expect exciting times ahead. The Appointment Committee for Bio-based Materials Technology has just finished its work while that for Molecular Technology has recently started. As was possible in the fields of computational biotechnology and bioinformatics, as reported in the last issue of TU Graz research, we hope to sustain and strengthen expertise in the above-mentioned areas within the FoE.*



# Verfolgung einzelner Biomoleküle jenseits der optischen Auflösungsgrenze

## *Tracking Single Biomolecules beyond the Optical Resolution*

Zdeněk Petrášek

Auf Fluoreszenz basierende Einzelmolekülmethoden erlauben es, hochdynamische biomolekulare Wechselwirkungen mit extrem hoher Empfindlichkeit zu quantifizieren. Die schnelle Kinetik frei diffundierender Moleküle in Lösung kann mit der Fluoreszenzkorrelationsspektroskopie untersucht werden. Langsame oder immobilisierte Moleküle können dagegen direkt abgebildet und verfolgt werden, und zwar mit einer Raumauflösung, die die klassische optische Grenze weit überschreitet. Diese präzise Lokalisierung individueller Moleküle dient als Grundlage der neuartigen Superresolution-Mikroskopie, einer Methode, die eine Auflösung von bis zu 20 Nanometer erlaubt.

Fluoreszenztechnologie wird, unter Verwendung von Autofluoreszenz oder künstlicher Farbstoffmarkierung, seit Jahrzehnten als hochempfindliche Methode zur Detektion von Molekülen und zur Untersuchung von deren Wechselwirkungen mit ihrer unmittelbaren Umgebung eingesetzt. Die Empfindlichkeit der Fluoreszenzparameter (Spektrum, Lebensdauer oder Fluoreszenzpolarisation) hat zu einer Vielzahl von Anwendungen in biologischen und chemischen Wissenschaften geführt. Der Fortschritt in der Lichtdetektionstechnologie hat es letztendlich ermöglicht, die Fluoreszenz von einzelnen Molekülen zu detektieren, was zur Entwicklung mehrerer Einzelmolekülverfahren geführt hat.

### **Fluoreszenzkorrelationsspektroskopie**

Fluoreszenzkorrelationsspektroskopie (FCS) ist eines der ersten Verfahren, das auf der Detektion des Signals einzelner Moleküle basiert. Dabei wird die Fluoreszenz eines winzigen Volumens gemessen, durch das zu jedem Zeitpunkt nur wenige Moleküle schnell diffundieren (Abbildung 1). Die statistische Analyse der Fluktuationen der Fluoreszenz liefert Informationen über die Konzentration und Diffusionsgeschwindigkeit der Moleküle, deren Wechselwirkungen, chemische Reaktionen usw. Obwohl während einer Messung über viele >

*Single molecule fluorescence techniques allow quantification of biomolecular interactions and dynamics with extremely high sensitivity. The fast kinetics of molecules freely diffusing in solution can be investigated by Fluorescence Correlation Spectroscopy. Slowly moving or immobilized molecules can be directly imaged and tracked with spatial resolution far exceeding the classical optical limit. This precise localization of individual molecules forms the basis of superresolution microscopy, a technique that can be used to visualize details on the scale of tens of nanometers.*

*Fluorescence technology, using either native fluorescence of the investigated molecules or labeling them with a fluorescent marker, has been employed for decades as a very sensitive method to detect the presence of molecules and to study their interactions with other molecules or with their microenvironment. The sensitivity of fluorescence parameters, such as the emission spectrum, lifetime or anisotropy, to molecular interactions has led to a wide range of applications in chemical and biological sciences. The advances in light detection technology have ultimately made it possible to detect fluorescence from individual molecules, resulting in a range of "single molecule" techniques.*

### **Fluorescence Correlation Spectroscopy**

*Fluorescence Correlation Spectroscopy (FCS) is one of the early techniques based on the detection of a signal from single molecules. It measures the fluctuations of fluorescence in a tiny femtoliter volume within a liquid sample containing on average only a few fast diffusing molecules (Figure 1). Statistical analysis of these fluctuations can yield information about the concentration and the diffusion properties of the fluorescent molecules, their interactions and chemical reactions, etc. Although the measurement represents an average over many molecules, FCS is regarded as a single molecule >*

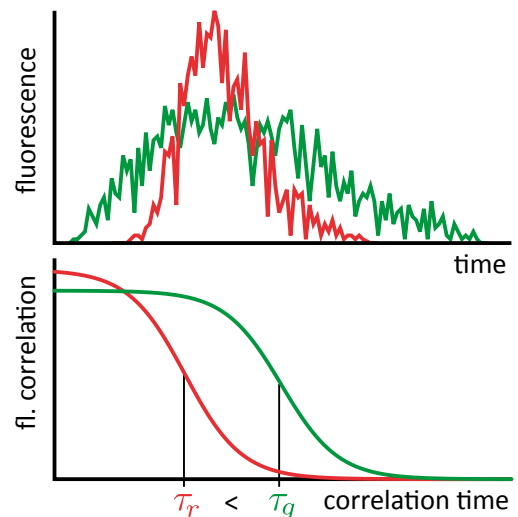
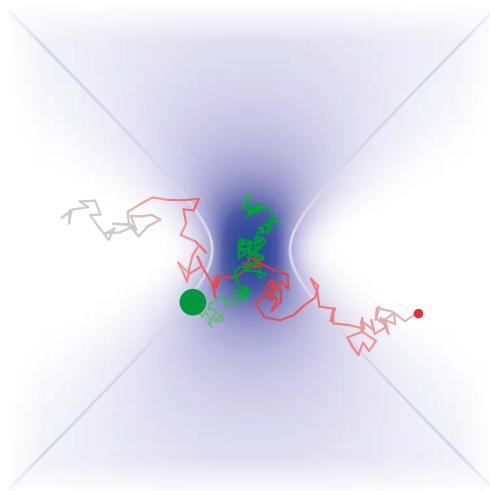


Zdeněk Petrášek arbeitet am Institut für Biotechnologie und Bioprozesstechnik. Seine Forschungsinteressen liegen in der optischen Spektroskopie und Mikroskopie und ihren Anwendungen in Biowissenschaften und Biotechnologie.

*Zdeněk Petrášek works at the Institute of Biotechnology and Biochemical Engineering. His research interests are optical spectroscopy and microscopy and their applications in biosciences and biotechnology.*

**Abbildung 1:**  
**Fluoreszenzkorrelations-**  
**spektroskopie:** Ein fluoreszierendes  
Molekül, das durch den Objektivfo-  
kus diffundiert, generiert einen Licht-  
puls. Die Dauer des Lichtpulses wird  
von der Geschwindigkeit des  
Moleküls bestimmt, die wiederum  
von der Größe des Moleküls abhängt.

*Figure 1:*  
*Fluorescence Correlation*  
*Spectroscopy: A fluorescent molecule*  
*diffusing through the objective focus*  
*generates a burst of light. The*  
*duration of this burst depends on the*  
*molecule's speed, which in turn*  
*reflects the size of the molecule.*



© Zdeněk Peřák

Moleküle gemittelt wird, wird FCS als Einzelmolekülverfahren betrachtet, da es ein starkes Signal von individuellen Molekülen voraussetzt. Das Verfahren benötigt nur extrem kleine Probevolumina, was seine Anwendung in mikrofluidischen Reaktoren und sogar in lebenden Zellen ermöglicht. Zu den Anwendungen zählen die Detektion von Bindungs- und Dissoziationsreaktionen und die Untersuchung von schnellen Konformationsänderungen der Biomoleküle.

## Einzelmoleküllokalisierung und -verfolgung

Die in letzter Zeit entwickelten hochempfindlichen EMCCD-Kameras („electron multiplying charge-coupled devices“) erlauben es, unbewegliche oder sich langsam bewegende Moleküle direkt abzubilden. Auf dem Bild erscheint ein Molekül als sogenannte Punktspreizfunktion („point spread function“, PSF), die aufgrund der optischen Auflösungsgrenze aber viel größer als das Molekül selbst ist. Die Position des Zentrums der PSF, und deshalb auch des Moleküls, kann jedoch mit einer bis zu zehnmal höheren Präzision bestimmt werden (Abbildung 2). Auf diese Weise kann eine Raumauflösung im Bereich von 20 nm erreicht

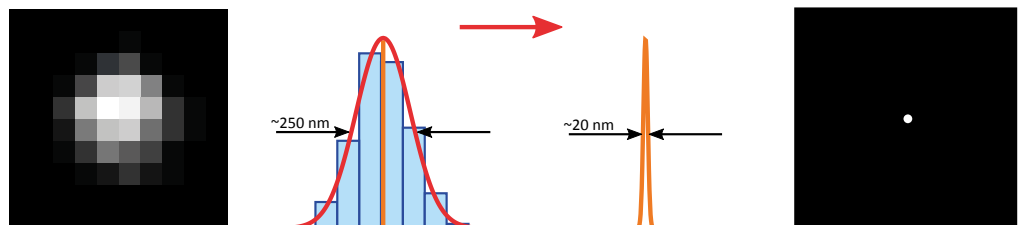
method, as it requires a sufficiently high signal from individual molecules. The technique operates with extremely small sample volumes, allowing its application in microfluidic chemical reactors or even in living cells. Applications include the detection of binding interactions and the investigation of the fast conformational fluctuations of biomolecules.

## Molecular localization and tracking

Immobile or slowly moving fluorescent molecules can be directly imaged with the recently developed high signal-to-noise EMCCD cameras. Due to the limits of optical resolution, an image of a molecule („point spread function“, PSF) is much larger than the molecule itself. However, the position of the center of the image, indicating the location of the molecule, can be determined with up to 10 times higher precision (Figure 2). In this way, the spatial resolution on the order of 20 nm, comparable to the sizes of large protein complexes, can be achieved. The possibility of localizing single molecules with precision far beyond the classical optical resolution limit has led to the expansion of two related fields: single molecule tracking and superresolution microscopy.

**Abbildung 2:**  
**Lokalisierung:** Obwohl die Größe der  
PSF (d. h. des Bildes eines Moleküls)  
durch die optische Auflösung auf  
wenige hundert Nanometer begrenzt  
ist, kann das Zentrum der PSF, wo sich  
das Molekül befindet, mit zehnmal  
höherer Auflösung bestimmt werden.

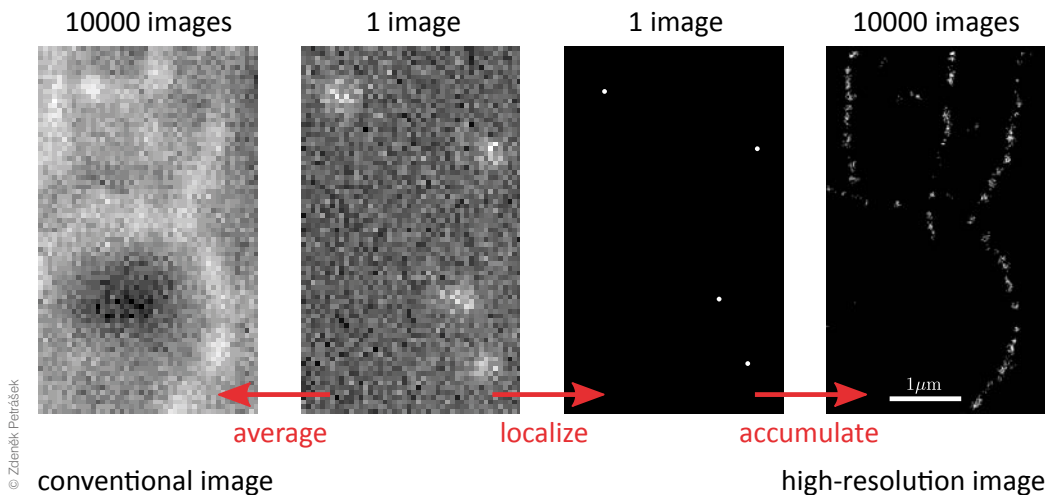
*Figure 2:*  
*Localization: Although the size of the*  
*image of a single molecule (PSF*  
*width) is limited by the optical*  
*resolution to a few hundred*  
*nanometer, the position of the center*  
*of this image, where the molecule is*  
*located, can be calculated with a*  
*resolution about ten times higher.*



© Zdeněk Peřák

werden. Diese Möglichkeit, einzelne Moleküle mit einer Präzision zu lokalisieren, die die klassische optische Auflösungsgrenze weit überschreitet, hat zu einer rasanten Entwicklung zweier Forschungsrichtungen geführt: der Einzelmolekülverfolgung und der supraauflösenden Mikroskopie.

The motion of molecules, either random or guided by other structures, can be followed by localizing their images in subsequent camera frames and connecting these into a trajectory. In this way, the stepping movement of the molecular motors myosin and kinesin along their respective filaments, or

**Abbildung 3:**

**Superauflösung:** Durch vielfaches Abbilden und Lokalisierung jeweils weniger Moleküle wird ein hochauflöstes Bild konstruiert.

**Figure 3:**

**Superresolution:** Repeated imaging and localization of a small number of molecules at a time allows the build-up of a high resolution image.

Die Bewegung der Moleküle kann durch ihre Lokalisierung in einer Reihe von Bildern und durch die Verbindung der aufeinanderfolgenden Positionen in eine Trajektorie verfolgt werden. So wurden z. B. die schrittweise Bewegung der Motorproteine Myosin und Kinesin entlang der entsprechenden Filamente oder die Diffusion der Proteine in Zellmembranen verfolgt. Eine vielversprechende biotechnologische Anwendung ist die Verfolgung von individuellen Enzymen auf unlöslichem Substrat, was eine Quantifizierung der enzymatischen Prozessivität und der Wechselwirkungen mit dem Substrat ermöglichen sollte.

### Superauflösende Mikroskopie

Die Lokalisierung individueller Moleküle ist das Prinzip eines suprauflösenden Mikroskopieverfahrens, das im letzten Jahr mit dem Nobelpreis für Chemie gewürdigt wurde. Die Auflösung eines konventionellen Bildes ist durch die Breite der PSF bestimmt. Wenn die Moleküle aber erst lokalisiert werden, wie in dem Verfolgungsverfahren, und das Bild der Probe aus den Positionen der individuellen Moleküle rekonstruiert wird, kann die tatsächliche räumliche Auflösung um mehr als ein 10-Faches erhöht werden. Um eine möglichst genaue Lokalisierung zu erzielen, werden zu jedem Zeitpunkt nur wenige Moleküle chemisch oder photophysikalisch „eingeschaltet“, und nach ihrer Aufnahme wieder „ausgeschaltet“. Durch vielfache Wiederholung dieses Prozesses wird am Ende ein hochauflöstes Bild aus den Positionen der individuellen Moleküle aufgebaut. Dieses Verfahren hat großes Potenzial für ein breites Spektrum von Anwendungen, z. B. der Visualisierung der Verteilung von Enzymen auf einem unlöslichen Substrat, der Verfolgung des prozessiven Abbaus vom Substrat durch das Enzym, Bestimmung der Bindungs- und Dissoziationskonstanten oder der Quantifizierung der enzymatischen Aktivität mittels fluorogener Substrate. ■

*the diffusion of proteins in cell membranes, have been tracked. A promising biotechnological application is the tracking of individual enzyme molecules along their solid substrate, allowing the quantification of their processivity and other enzyme-substrate interactions.*

### Superresolution microscopy

*Localization of individual molecules is the principle of one type of superresolution microscopy techniques that was acknowledged by the Nobel Prize in chemistry last year. The resolution of an image is limited by the size of the images of the fluorescent molecules (the PSF width) used to label the sample. If the molecules are however localized as in the tracking technique, and the image of the sample is constructed from the position of these molecules, the resolution can be increased by a factor of more than ten. Reliable localization is achieved by chemically or photophysically “switching on” only a small fraction of fluorescent molecules at a time, and switching them “off” again after they are imaged and localized. By repeating this process many times, the final image is built up from the positions of a large number of localized molecules. This technique has a great potential for a wide range of applications, for example, the visualization of the distribution of enzyme binding sites on a solid substrate, monitoring of the processive action of the enzyme, the determination of binding and detachment rates, or the quantification of the enzyme activity by using fluorogenic substrate. ■*



# Information, Communication & Computing



Johannes Wallner ist Leiter  
des FoE „Information,  
Communication & Computing“.  
*Johannes Wallner is head  
of the FoE Information,  
Communication & Computing.*

Das Field of Expertise „Information, Communication & Computing“ freut sich dieser Tage besonders über Neuigkeiten zu einem publikumswirksamen Thema: Zwei Jahre nach der Beteiligung der TU Graz an der Nanosatellitenmission BRITE, die Helligkeiten von Sternen vermisst, erhielt die TU Graz im März 2015 den Zuschlag der Europäischen Raumfahrtagentur ESA für ein weiteres Nanosatellitenprojekt: OPS-SAT soll unter anderem Software, Kommunikationsprozeduren, Datenkomprimierung und optische Kommunikation von der Erde in den Raum testen.

Die wesentliche Innovation liegt dabei im Wort „testen“ – normalerweise wird genau dies streng vermieden, um wertvolle Satelliten nicht unnötigen Risiken auszusetzen. Der physische Start des Satelliten ins All ist für die zweite Hälfte des Jahres 2017 vorgesehen. Im vorliegenden Heft wird auf den Seiten 4 bis 9 dieses prestigeträchtige Weltraumprojekt rund um das Team von Otto Koudelka vom Institut für Kommunikationsnetze und Satellitenkommunikation der TU Graz vorgestellt.

Andere Neuigkeiten in unserem Field of Expertise betreffen die Besetzung der FoE-Professor/innenstelle mit der Widmung „Computational Topology and Geometry“, für die zu Redaktionsschluss bereits ein Besetzungsvorschlag vorlag. In diesem Heft ist einer weiteren der vielseitigen Aktivitäten der Kolleginnen und Kollegen ein Artikel gewidmet: Auf den Seiten 19 bis 21 berichtet Gerald Steinbauer vom Institut für Softwaretechnologie über die Arbeit seiner Arbeitsgruppe an modellbasierten Techniken zur Erhöhung der Zuverlässigkeit von autonomen Robotern.

*Our Field of Expertise (Information, Communication, and Computing) is delighted to hear news about a topic of great scientific and public interest. Two years ago Graz University of Technology participated in the BRITE nanosatellite mission, whose purpose was to measure the variable brightness of stars. Now, in March 2015, the European Space Agency has awarded another nanosatellite project – OPS-SAT – to Graz University of Technology. Its purpose is to test on-board software, communication procedures, compression, and ground-space optical communication, among other things. The key word here is “test”, which is usually strictly avoided in order not to jeopardize valuable satellites. The launch date is expected to be late 2017. This prestigious space project is led by Otto Koudelka of the Institute of Communication Networks and Satellite Communication, and is presented on pages 4–9.*

*Other news from our Field of Expertise concerns the Professorship of Computational Topology and Geometry. At the time of going to print, the hiring committee will have already produced a short list. The article on pages 19–21 is dedicated to one of the many versatile activities of colleagues – in this case Gerald Steinbauer (Institute of Software Technology), who reports about the work of his group on model-based methods to increase robustness and dependability of autonomous robots.*



# Wie Roboter autonom und zuverlässig werden

## *How Robots are Increasingly Becoming Autonomous and Reliable*

Gerald Steinbauer

Autonome Roboter sind heute näher an Menschen als klassische Industrieroboter. Darum ist die Zuverlässigkeit dieser Roboter entscheidend. Modellbasierte Techniken, die während des Entwicklungsprozesses und des Einsatzes angewandt werden, können diese Zuverlässigkeit erhöhen. Aus der wissenschaftlichen Perspektive sind das Testen und die Überwachung der komplexen Interaktion des Roboters mit seiner Umgebung und seiner Entscheidungsautonomie von besonderem Interesse.

Autonome Roboter werden sowohl vermehrt in der Industrie oder dem Gewerbe als auch im täglichen Leben eingesetzt. Diese neue Robotergeneration zeigt drei Eigenschaften, die sie von klassischen Industrierobotern unterscheidet. Erstens sind die Roboter mobil, interagieren direkt und teilen sich die Umgebung mit Menschen, ohne durch einen Zaun getrennt zu sein. Zweitens verfügen sie über einen gewissen Grad an Entscheidungsautonomie, der es ihnen erlaubt, Ziele auf unerwarteten Wegen zu erreichen und autonom auf Änderungen in der Umgebung zu reagieren. Drittens sollen sie über einen langen Zeitraum ohne Wartung durch Menschen funktionieren. Daher ist die Zuverlässigkeit solcher Systeme – die Fähigkeit, die vorgesehene Funktion auch bei auftretenden Problemen zu erbringen – entscheidend. Probleme erwachsen hier primär aus der Komplexität der realen Welt, die für einen Roboter schwer zu greifen ist, und seiner, im Vergleich zum Menschen, immer noch beschränkten Fähigkeiten in der Wahrnehmung, dem Agieren und dem Schlussfolgern. Menschen haben bessere Fähigkeiten zur Wahrnehmung der Welt entwickelt und sind gut darin, mit unvollständigen Informationen, Inkonsistenzen und Annahmen umzugehen.

### Die Modelle stehen im Zentrum

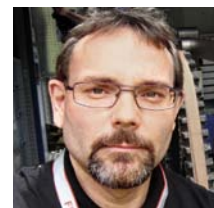
Die Arbeitsgruppe Autonome intelligente Systeme am Institut für Softwaretechnologie forscht an >

*Autonomous robots are nowadays much closer to humans than classical industrial robots. For this reason, their dependability is crucial. Model-based techniques applied during the development and deployment process are able to increase this dependability. From the research perspective testing and monitoring the complex interaction of a robot with its environment and its decisional autonomy is particularly interesting.*

*Autonomous robots are increasingly deployed in industry or for professional services as well as in daily life. This new generation of robots exhibits three central properties that distinguish them from classical industrial robots. First, they are mobile and directly interact and share their space with humans without being separated by a fence. Secondly, they possess a certain degree of decisional autonomy allowing them to achieve goals in novel, unexpected ways and to autonomously respond to changes in the environment. Lastly, they can ideally work for a long time without needing maintenance or care from humans. For this reason, the dependability of such systems – the capability to provide the intended function safely even in the face of difficulties – is crucial. Difficulties mainly originate from the complexity and non-determinism of the real world, which is hard to grasp for a robot with sensing, acting and reasoning capabilities inferior to those of humans. Humans have developed much better skills for perceiving the world and are very good at dealing with incomplete information, inconsistencies and default assumptions. Such capabilities are hardly ever seen in autonomous robots.*

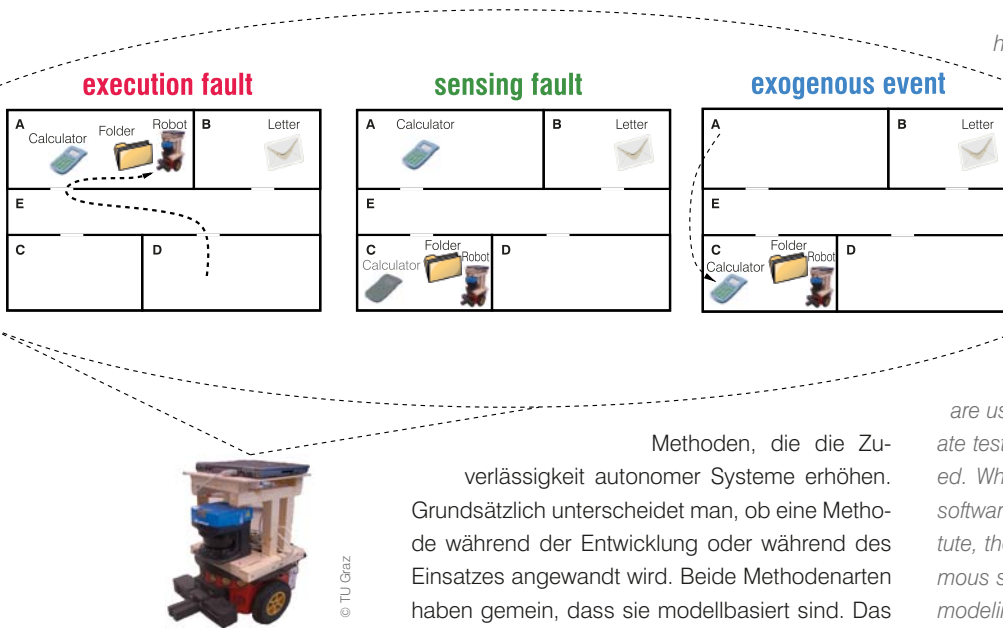
### Models are central

*The working group Autonomous Intelligent Systems at the Institute for Software Technology conducts research on methods to improve the dependability of autonomous systems. Basically these methods differ if they are applied during the development of the system or during its deployment. Both methods >*



Gerald Steinbauer ist Inhaber einer Professorenlaufbahnstelle am Institut für Softwaretechnologie der TU Graz. Seine Forschungsinteressen konzentrieren sich auf zuverlässige autonome Roboter. Er ist (bzw. war) Projektleiter von zwei nationalen Forschungsprojekten zu diesem Thema.

*Gerald Steinbauer is assistant professor with tenure track at the Institute of Software Technology at Graz University of Technology. His research interests focus on dependable autonomous robots. He has been project leader of two national research projects on this topic.*



**Abbildung 1:**  
**Diagnose der Wissensbasis eines Roboters. Mehrere konsistente Erklärungen für eine inkonsistente Wahrnehmung.**

**Figure 1:**  
**Diagnosis of a robot's knowledge base. Several consistent explanations for an inconsistent perception.**

Methoden, die die Zuverlässigkeit autonomer Systeme erhöhen. Grundsätzlich unterscheidet man, ob eine Methode während der Entwicklung oder während des Einsatzes angewandt wird. Beide Methodenarten haben gemein, dass sie modellbasiert sind. Das bedeutet, dass sie Modelle verwenden, die das gewünschte Verhalten des Systems beschreiben. Die verwendeten Modelle reichen von endlichen Automaten über Transitionssysteme bis zu logikbasierten deklarativen Modellen. Während der Entwicklung werden Methoden des modellbasierten Testens (MBT) verwendet. Diese verwenden die Modelle, um Testfälle zu generieren, die es erlauben, Fehler im System zu detektieren. Während die Anwendung von MBT auf Hardware und Software schon lange im Fokus des Institutes steht, ist die Anwendung in autonomen Systemen relativ neu. Die Herausforderung ist hier die Modellierung des Nichtdeterminismus der Interaktion mit der Umgebung und die Tatsache, dass der Roboter seine Aufgabe auf verschiedene und unerwartete Art erledigen kann. Einfache Beschreibungen von Input/Output-Relationen sind hier nicht ausreichend.

Eine Alternative ist die Beschreibung als Planungsproblem mit einem Anfangszustand, einer Menge von Aktionen und einem Ziel. Während des Einsatzes werden modellbasierte Techniken zur Diagnose und Reparatur verwendet. Die zentrale Idee ist, dass Beobachtungen aus dem realen System mit erwartenden Beobachtungen, die vom Modell generiert werden, verglichen werden. Wird eine Diskrepanz festgestellt, wurde ein Problem detektiert. Weiterführendes Schlussfolgern erlaubt es, die Ursache des Problems zu identifizieren. Diese Techniken werden auf allen Ebenen, von der Hardware über die Software bis hin zum

have in common that they are model-based – meaning that there are models of the system that describes the desired behavior of the system. The used models range from finite state machines over labeled transition systems to logic-based declarative models.

During the development process model-based testing (MBT) techniques are used. These techniques use models to generate test cases so that system errors can be detected. While the application of MBT to hardware and software has long been within the focus of the Institute, the application of these techniques to autonomous systems is quite new. The challenges are the modeling of the non-determinism of the interaction with the environment and the fact that the robot is able to achieve its task in various and even unexpected ways. For this reason, simple descriptions of input/output relations are not sufficient.

An alternative is seeing the description as a planning problem with an initial state, a set of possible actions and a goal. During the deployment of the robot, model-based reasoning to perform diagnosis and repair is used. The central idea is that observations from the real system are compared to expected observations generated by a system model. When a discrepancy is encountered, a problem is detected. Further reasoning allows the root cause of the problem to be identified. These techniques had been applied at all levels in robots ranging from hardware and software to the belief and behavior of a robot. Usual root causes are broken hardware components, undiscovered dead locks in the software, uncertain percepts leading to wrong beliefs or unreliable action executions. Once the root cause has been identified, there are methods to derive repair strategies to automatically mitigate the problems. For instance the robot can plan to execute sensing actions in order to remove inconsistent knowledge.

## From basic research to application

The foundations of these methods were mainly developed in basic research projects funded by the FWF before. Earlier projects focused on the diagnosis and repair of robots' hardware and software while a recently finished project "Active Belief Re-



Wissen und Verhalten des Roboters, angewandt. Übliche Ursachen für Probleme sind defekte Hardwarekomponenten, unentdeckte Deadlocks in der Software, ungenaue Wahrnehmungen, die zu falschen Vorstellungen führen, oder die unpräzise Ausführung von Aktionen. Nachdem die Ursache identifiziert wurde, gibt es Methoden, um Reparaturstrategien anzuleiten, die erlauben, den Fehler automatisch zu beheben. Zum Beispiel kann der Roboter Sensor-Aktionen planen, die es erlauben, widersprüchliches Wissen zu entfernen.

### Von der Grundlagenforschung zur Anwendung

Die Basis dieser Methoden wurde hauptsächlich in Grundlagenforschungsprojekten, die vom FWF gefördert wurden, entwickelt. Frühere Projekte fokussierten sich auf die Diagnose und Reparatur der Hardware und der Software der Roboter, während sich das kürzlich beendete Projekt „Aktive Wissensadaption für intelligente autonome Roboter“ mit der automatischen Online-Diagnose der Wissensbasis des Roboters beschäftigte. Neben der Grundlagenforschung werden die Techniken auch direkt in realen Robotersystemen der Arbeitsgruppe angewandt. Ein System ist das Robotersystem des RoboCup Rescue Robot Studierendenteams, das an internationalen Wettbewerben teilnimmt und dessen Ziel die Unterstützung von Einsatzkräften ist, wo die Zuverlässigkeit eine große Rolle spielt. Diese Anwendung ist daher die optimale Testumgebung für diese Techniken und ermöglicht es weiter, die Studierenden mit diesen Techniken zu konfrontieren. Momentan werden im FFG-Bridge-Projekt „Garantie der Zuverlässigkeit von Service-Robotern während des gesamten Lebenszyklus“ die entwickelten Methoden für das Testen und die Überwachung in eine Flotte autonomer Transportroboter im industriellen Umfeld integriert. ■



*pair for Intelligent Autonomous Robots” dealt with the automated online diagnosis and repair of the robot’s knowledge base. Moreover, this project focused on the seamless integration of the methods in the perception-decision-execution cycle of the robot. Apart from basic research, techniques are directly utilized in running the robot systems of the research group. One of these systems is the robot system in the RoboCup Rescue Robot student team, which participates in international competitions and whose goal is to support first responders, where dependability is an important issue. This application is therefore a great test bed for the techniques and also exposes students to the methods. Currently, within the FFG bridge project “Guaranteeing Service Robot Dependability During the Entire Life Cycle”, methods which have been developed for testing and supervision are being integrated into a fleet of autonomous transport robots in an industrial setting. ■*

**Abbildung 2:**  
**Roboter Wowbagger des RoboCup  
Rescue Robot Teams – eine optimale  
Testplattform für Zuverlässigkeit.**

**Figure 2:**  
**Robot Wowbagger of the RoboCup  
Rescue Robot team – an optimal test  
bed for dependability.**

# Mobility & Production



Helmut Eichlseder ist Leiter des FoE „Mobility & Production“. Helmut Eichlseder is head of the FoE Mobility & Production.

In den letzten Monaten hat sich im FoE „Mobility & Production“, in dessen Rahmen sich mehr als 20 Institute mit Aufgabenstellungen auf den Gebieten Fahrzeug- und Antriebstechnik, Fahrzeugsicherheit, zugehörige Energieträger, Produktionstechnik etc. wissenschaftlich befassen, wieder einiges Berichtenswertes getan: Einen ganz wesentlichen Schritt von langfristiger Bedeutung stellt die Ausschreibung einer Stiftungsprofessur „Advanced Manufacturing“ dar, die mit der Bewerbungsfrist bis 8. April bereits

veröffentlicht wurde. Damit soll das Fachgebiet der „Produktion im Maschinenbau“ innerhalb der Fakultätsinitiative „Smart Production Graz“ und des FoE „Mobility & Production“ entwickelt werden und ein Konzept der Forschungs- und Lernfabrik TU Graz umgesetzt werden. Ziele sind die Implementierung von Industrie 4.0 in die Forschungs- und Lernfabrik und damit in die Ausbildung der Studierenden. Als Pilotprojekt soll nun ein konkretes Produkt die höchstmögliche Flexibilität und Automatisierung einer „Losgröße-1-Produktion“ („batch size one“-Produktion) aufzeigen. Die auf fünf Jahre befristete Professur wird dem Institut für Fertigungstechnik der Fakultät für Maschinenbau und Wirtschaftswissenschaften zugeordnet. Bereits in den nächsten Tagen wird mit der erforderlichen Vorauswahl der Kandidatinnen und Kandidaten begonnen.

Über einen schönen Erfolg als Folge einer Anschubfinanzierung gilt es zu berichten: In der EU-Horizon-2020-Förderschene konnte mit einem sehr renommierten Konsortium und der Koordinatorin AVL ein Projekt zum Thema Schwerlast-Lkw („heavy duty“-Lkw) mit Erdgasantrieb eingeworben werden. Dies kann zunächst leider nicht für die Antragstellung zum Leadbereich „Automotive Mechatronik“ gesagt werden, über deren Vorbereitung ich bereits im letzten Forschungsjournal berichtet habe.

Eine der wesentlichen und übergreifenden Themenstellungen des FoE ist die umweltverträgliche Mobilität und Produktion. Darauf fokussieren auch die beiden Projekte, die im Folgenden kurz vorgestellt werden: Im Beitrag von Helmut Brunner und Mario Hirz (Institut für Fahrzeugtechnik) mit dem Thema „Mobilität: Der gesamten Auswirkung auf der Spur“ wird im Gegensatz zur heute zumeist auf den Energieverbrauch bzw. die CO<sub>2</sub>-Emission bei der Nutzung eingeschränkter Bewertung eine gesamthafte Betrachtung vorgenommen. Im zweiten Artikel mit dem Titel „Pflanzenztreibstoff 2.0“ wird ein Weg aufgezeigt, wie ein wesentlicher Anteil von Biomasse in einen biogenen Treibstoff der zweiten Generation umgewandelt werden kann. Nikolaus Schwaiger, wissenschaftlicher Mitarbeiter am Institut für Chemische Verfahrenstechnik und Umwelttechnik, erforscht diesen Biotreibstoff.

*During the last months noteworthy events have been carried out in the FoE Mobility & Production. In its framework more than 20 institutes scientifically focus on the fields of automotive and propulsion technology, vehicle safety, associated energy sources and production technology, among other things. A major step of long-term importance is the announcement of the endowed professorship Advanced Manufacturing, which was published with an application deadline of April 8<sup>th</sup> 2015. Through this professorship the special field of “production in mechanical engineering” shall be developed by the faculty initiative Smart Production Graz and the FoE Mobility & Production leading to a conceptual realization by the research and learning factory at Graz University of Technology. The goals are the implementation of Industry 4.0 in the research and learning factory and thus in the training of the students. The highest possible flexibility and automation by “batch size one” production by means of a specified product shall start as a pilot project. This five-year professorial chair is assigned to the Institute of Production Engineering of the Faculty of Mechanical Engineering and Economic Sciences. Within the next few days the essential preselection of candidates will be started.*

*An encouraging success as a result of a start-up funding deserves special mention here. Within the EU-Horizon 2020 funding, the Heavy Duty Vehicles with Natural Gas Drive project was able to be acquired by a highly renowned consortium coordinated by AVL. Unfortunately, the application carried out by the leading field of Automotive Mechatronics, whose preparations were described in the last issue of TU Graz research, was unsuccessful.*

*One of the most important and comprehensive topics of the FoE is eco-friendly mobility and production, and this is the focus of two projects which I'd like to briefly introduce here. In the piece by Helmut Brunner and Mario Hirz (Institute of Automotive Engineering) with the title “Mobility: Looking for the Overall Effect” – in contrast to the today's mostly limited assessment of energy consumption or CO<sub>2</sub> emission during use – an overall examination was made. In the second article, entitled “Biofuels 2.0”, a way of converting a significant proportion of biomass into a second-generation biogenic fuel is shown. Nikolaus Schwaiger, research associate at the Institute of Chemical Engineering and Environmental Technology, is conducting research into this biofuel.*



# Mobilität: Der gesamten Auswirkung auf der Spur

## Mobility: Looking for the Overall Effect

Helmut Brunner, Mario Hirz

Im Rahmen eines Forschungsprojekts in Kooperation mit dem österreichischen Verein für Kraftfahrzeugtechnik (ÖVK) und dem ÖAMTC wird am Institut für Fahrzeugtechnik an neuen Ansätzen für die Individualmobilität der Zukunft gearbeitet. Ein Ziel ist die Bewertung verschiedener Mobilitätskonzepte und Technologien unter Berücksichtigung des gesamten Lebenszyklus.

Der motorisierte Individualverkehr hat weltweit betrachtet den größten Anteil an der gesamten Verkehrsleistung, wobei Prognosen von einem weiteren Wachstum ausgehen. Die Europäische Union verfolgt Ziele zur Reduktion des Ausstoßes von Treibhausgasen wie CO<sub>2</sub>. Ab 2021 soll beispielsweise ein durchschnittlicher Pkw nicht mehr als 95 Gramm CO<sub>2</sub> pro Kilometer gefahrener Strecke im genormten Fahrzyklus ausstoßen. Der Einsatz alternativer und innovativer Materialien, Technologien und Energieformen, um den CO<sub>2</sub>-Ausstoß zu reduzieren, kann jedoch zu einer Erhöhung des Aufwands und der resultierenden Emissionen in der Phase der Produktion und Bereitstellung sowie in der Phase des Lebensendes eines Fahrzeuges („End of Life“, EOL) führen. Außerdem stellt die Art der Fahrzeugnutzung einen wichtigen Aspekt im gesamten Lebenszyklus dar. Hier spielen die Fahrleistung und der Anteil verschiedener Streckenprofile (z. B. städtischer Verkehr, Überlandverkehr und Autobahnfahrten) eine Rolle. Im Sinne einer ganzheitlichen Analyse und Bewertung ist es daher erforderlich, die Untersuchungen nicht nur auf die Fahrzeuge zu beschränken, sondern Mobilität als ganzheitliches System zu betrachten und alle in Abbildung 1 in vier Kategorien eingeteilten Einflüsse zu berücksichtigen.

### Analyse des Mobilitätsverhaltens

Ausgangsbasis für die Untersuchungen ist die Kenntnis des realen Mobilitätsverhaltens von Personen verschiedener Alters- und Berufsgruppen. Die Analyse der Daten aus einer durchgeführten >

*As part of a research project in cooperation with the Austrian Society of Automotive Engineers and the ÖAMTC, new approaches for individual mobility of the future are being elaborated at the Institute of Automotive Engineering. One of the aims is a broad evaluation of various mobility concepts and technologies, taking into account the entire life cycle.*

*Individual motorized traffic is responsible for the largest share of global traffic, and forecasts assume even further growth. The European Union is developing different objectives to reduce CO<sub>2</sub>. From 2021 onwards, as an example, the CO<sub>2</sub> emission of an average passenger car is limited to 95 grams of CO<sub>2</sub> per kilometer distance traveled in the standardized driving cycle. The use of alternative and innovative materials, technologies and forms of energy, however, may increase the effort and the resulting emissions at the stage of production, supply and end-of-life. Furthermore, the use phase is an important aspect in the life cycle analysis. In this case, the traffic performance and mix of different road profiles, such as urban transport, rural or motorway journeys, need to be taken into account. In terms of a holistic analysis and evaluation it is necessary not to limit the investigations only to the vehicle but to consider mobility as an integrated system and to be aware of further influences in the four categories, which can be seen in Figure 1.*

### Mobility behavior analysis

*The starting point for the research is the knowledge of the real mobility behavior of persons of various ages and professions. The analysis of the collected data from a conducted mobility inquiry enables the derivation of various representative use cases, mainly differed by the daily and maximum traffic performance and transport demand within a defined time period. Another important aspect is the composition of different road profiles (urban traffic, rural or motorway traffic). >*



Helmut Brunner ist wissenschaftlicher Projektmitarbeiter am Institut für Fahrzeugtechnik. Als Themenschwerpunkt verfolgt er die Mobilität der Zukunft mit Fokus auf den urbanen Raum und im Kontext der Auswirkungen im gesamtheitlichen Lebenszyklus.

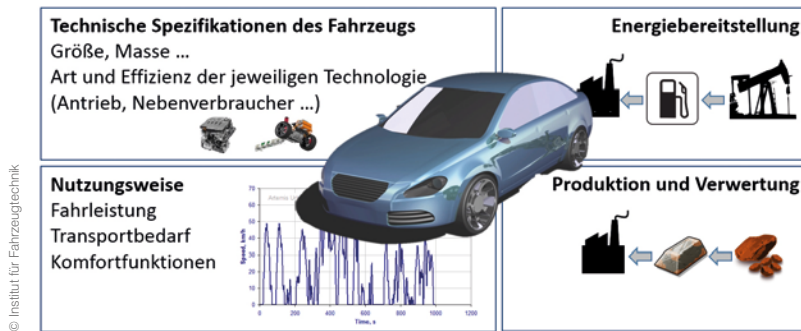
*Helmut Brunner is scientific project researcher at the Institute of Automotive Engineering. His main research focus is in the mobility of the future, especially in urban areas and within the context of the entire life cycle.*



Mario Hirz ist stellvertretender Institutsvorstand am Institut für Fahrzeugtechnik und Leiter des Forschungsbereichs für Automotive Mechatronik.

*Mario Hirz is vice head of the Institute of Automotive Engineering and head of the Research Area for Automotive Mechatronics.*





**Abbildung 1:**  
**Einflussfaktoren auf den**  
**Lebenszyklus eines Fahrzeugs.**

*Figure 1:*  
*Influencing factors on the life*  
*cycle of a vehicle.*

Mobilitätsaufnahme ermöglicht die Ableitung stellvertretender Nutzungsmuster. Hier zeigen sich Unterschiede im täglichen und maximalen Fahrleistungs- und Transportbedarf innerhalb eines definierten Zeitraums oder in der Zusammensetzung der Streckenprofile.

### Technische Analyse

Eine umfassende Analyse von Technologien in der Fahrzeug- und Antriebstechnik in Hinblick auf Produktion, Nutzungsphase und End-of-Life-Phase macht die unterschiedlichen Einflüsse auf die Lebenszyklusbetrachtungen deutlich. Im Fokus stehen dabei Fahrzeugkonzepte, Größen, Antriebssysteme, Energiespeicher, Karosserieformen und Kombinationen von Einzeltechnologien. Neben dem Fahrzeugantrieb gewinnt mit zunehmender Anzahl an Komfortfunktionen auch der Energiebedarf von Nebenaggregaten im Fahrzeug an Bedeutung. Zur Ermittlung dieser Einflüsse werden Messungen an Fahrzeugen unter realen Bedingungen durchgeführt.

### Life Cycle Assessment

Diese Methode dient zur Bewertung des gesamten Lebenszyklus von Produkten und umfasst die Zusammenhänge in den Phasen der Produktion, der Nutzung und des „End of Life“ (EOL). Mit dem Fortschritt der Entwicklungen zur Effizienzsteigerung steigt oft auch der Aufwand zur Herstellung und Verwertung. Der Einbau von komplexeren Systemen zur Abgasnachbehandlung sowie von E-Motoren und Batterien erfordert zusätzliche Materialien, von Nichteisenmetallen wie Aluminium oder Kupfer bis hin zu selteneren Rohstoffen wie Kobalt oder Neodym. Ein anderes Beispiel ist die Leichtbauweise. Während der Phase der Nutzung trägt sie durch einen geringeren Fahrwiderstand zur Verringerung des Energieverbrauchs bei, jedoch kann der Einsatz von Leichtbaumaterialien den Bedarf an Energie während der Phase der Produktion erhöhen. Während die Gewinnung und Bereitstellung des Werkstoffes Stahl in einem

### Technical analysis

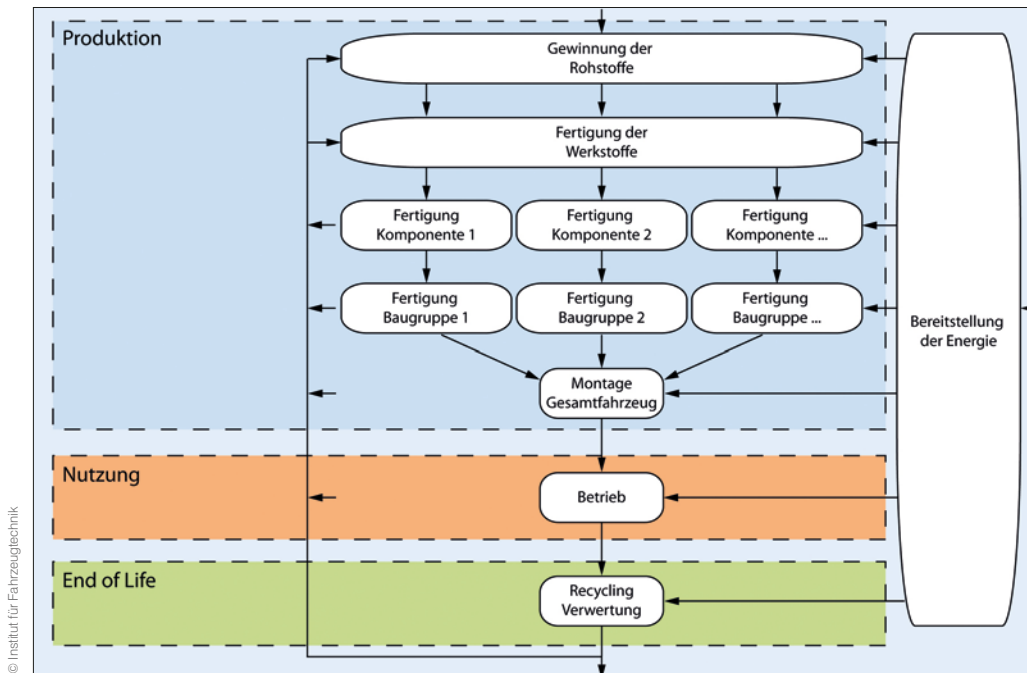
A comprehensive analysis of automotive technologies taking into account the production, use phase and end-of-life phase, illustrates the different influences on life cycle considerations. The focus is on different vehicle designs, sizes, propulsion systems, energy storage systems, body technologies and combinations of individual technologies. In addition to the vehicle drive, an increasing number of comfort functions and auxiliaries has resulted in a growth of the energy demand in the vehicle. In this project, the determination of these influences is carried out by measurements on vehicles under real conditions.

### Life Cycle Assessment

This method is used for the evaluation of defined impact categories along the entire life cycle of product and processes and considers the relationships in the phases of production, use and end-of-life (recycling). Developments and innovations such as the integration of more complex systems for exhaust after-treatment, the additional installation of electric motors in hybrid vehicles or the use of batteries to store energy in the vehicle, result in an increased demand for various materials, from non-ferrous metals such as aluminum or copper to rare earth materials such as cobalt or neodymium. The increase in efficiency of the drive is in contrast to a possible additional effort during production and end-of-life treatment. Another example is the lightweight construction. During the use phase this strategy contributes to a lower driving resistance, which results in a reduced energy consumption. However, the use of lightweight materials can increase the need for energy during the phase of production. An example of this is the use of aluminum. Since the production and supply of steel material results in an energy demand of around 2 to 5 kWh per kilogram, the provision of aluminum requires about 30 to 60 kWh/kg. As the production of aluminum requires a high amount of electrical energy, it is important to consider the technology and efficiency of electric energy production.

### Comprehensive survey and evaluation

A generated data master enables the creation, simulation, evaluation and illustration of a variety of scenarios of individual mobility, supported by a developed simulation model in MATLAB. This can



**Abbildung 2:**  
Schema des Lebenszyklus eines Pkw.  
*Figure 2:*  
Life cycle of a passenger car.

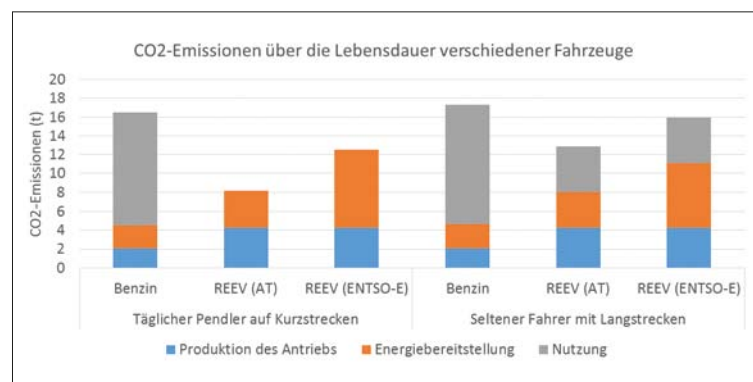
Energiebedarf von rund 2 bis 5 kWh/kg resultieren, benötigt die Bereitstellung von Aluminium etwa 30 bis 60 kWh/kg. Der hohe Einsatz an elektrischer Energie erfordert hier wie auch während der Phase des Betriebs eines (teil-)elektrisch angetriebenen Fahrzeugs die Berücksichtigung der Technologien zur Erzeugung des elektrischen Stroms.

### Gesamtbetrachtung und Bewertung

Der aus den Untersuchungen in den verschiedenen Abschnitten generierte Datenstamm ermöglicht die Darstellung einer Vielzahl von Szenarien zur Abbildung der Individualmobilität. Dies erfolgt über ein entwickeltes Simulationsmodell in MATLAB und kann über einen definierten Langzeitraum unter Verwendung verschiedener Fahrzeug- und Mobilitätskonzepte und durch das Setzen von Rahmenbedingungen (Fahrprofil, Ortsbezug, Energiemix oder klimarelevante Kriterien) variiert werden. Abbildung 3 zeigt beispielsweise die resultierenden CO<sub>2</sub>-Emissionen für den Betrieb eines Benzinfahrzeugs und eines elektrisch betriebenen Fahrzeugs mit Range Extender. Im seltenen Falle von Langstrecken leert sich die Batterie oftmals während der Fahrstrecke, wodurch der an Bord befindliche mit Benzin betriebene Generator zum Einsatz kommt. Der Kurzstreckenfahrer kann das Potenzial des elektrischen Antriebs besser nutzen. Bei einem Vergleich des österreichischen mit dem europäischen Strommix ist erkennbar, dass die Technologie der Stromerzeugung einen deutlichen Einfluss auf die CO<sub>2</sub>-Bilanz hat. ■

be done over a defined long-term period, using different vehicle and mobility concepts and the setting of boundary conditions such as the driving profile, local subjections, energy mix, and climate conditions. As an example, Figure 3 shows the resulting CO<sub>2</sub>-emissions for the use of gasoline and range-extender electric driven vehicles taking into account different user scenarios and mixes of electric energy production. The considered use case of the right example is a composition of rare but longer trips, where the battery of the vehicle is emptied frequently. Therefore, the on-board generator is activated to reload the battery. As a result, only a low CO<sub>2</sub> saving potential can be determined in relation to a conventional gasoline driven vehicle. ■

**Abbildung 3:**  
Gesamtemissionen an CO<sub>2</sub> für die Herstellung (blau) und den Betrieb (grau) verschiedener Antriebssysteme sowie aus der Bereitstellung verschiedener Energieformen (orange). REEV: Elektrofahrzeug mit Range Extender zur Verlängerung der Reichweite; (AT): österreichischer Strommix; (ENTSO-E): europäischer Strommix. Betriebszeit: 9 Jahre (entspricht etwa 90.000 km).  
*Figure 3:*  
Total emissions of CO<sub>2</sub> for production (blue) and use (grey) of different propulsion systems, and from the energy supply (orange). REEV: range-extender electric vehicle; (AT): electric energy production in Austria; (ENTSO-E): European electric energy mix; period of use: 9 years, 90,000km, resp.





## Sustainable Systems



Urs Hirschberg ist Leiter des FoE „Sustainable Systems“ und befindet sich auf Sabbatical in den USA. Urs Hirschberg is head of the FoE Sustainable Systems and is presently on a sabbatical in the USA.

Laut NASA war 2014 das wärmste je gemessene Jahr (seit 1880); die zehn wärmsten je gemessenen Jahre – mit Ausnahme des Jahres 1998 – haben nach 2000 stattgefunden. In manchen Teilen der Welt hat der Klimawandel bereits dramatische Folgen, etwa in Kalifornien, das derzeit

eine seit vier Jahren andauernde Dürre erlebt. Der wirtschaftlich stärkste Bundesstaat der USA verfügt über eine hochentwickelte Wasserinfrastruktur. Aber angesichts eines historisch einzigartigen

Schneemangels in den Bergen hat Gouverneur Jerry Brown jetzt Maßnahmen angekündigt, um den Wasserverbrauch um 25 Prozent zu reduzieren. In der Agrarwirtschaft, die 80 Prozent des kalifornischen Wassers verbraucht, liegen die Nerven blank – es geht um Milliarden.

Im sogenannten California Delta kommen zwei große Flüsse zusammen, bevor sie in die San Francisco Bay fließen. Hier liegt der Fokus auf wirtschaftlichen und politischen Interessen: Ein großer Teil des südkalifornischen Wasserbedarfs wird vom Delta in Richtung Los Angeles gepumpt – Wasser, das auch der Norden dringend braucht. Zudem liegt das Delta – ein ehemaliges Sumpfgebiet – unter dem Meeresspiegel und sein Ökosystem ist bedroht, wenn nicht genug Flusswasser in Richtung Bay fließt. Was passiert, wenn der Meeresspiegel steigt? Oder wenn die Dämme in einer Flut brechen? Im März habe ich mit zwei Forschern das Delta bereist und mit Expertinnen und Experten über die Situation gesprochen. Die Probleme des Deltas sind komplex und systemisch. Sie betreffen Wasser, Landwirtschaft, Biodiversität, Siedlungsplanung, Lebensweisen und Artenschutz. Kalifornien ist weit weg, aber die Klimaproblematik betrifft letztlich uns alle. Durch seinen weltweiten Einfluss kann Kalifornien dazu beitragen, dass die Probleme der Klimaerwärmung ernst genommen werden und dass die Bereitschaft steigt, nachhaltige Lösungen zu suchen und umzusetzen.

Nachhaltigkeitsforschung hat viele Facetten. Auf Seite 27 beschreibt Moritz Husmann vom Institut für Wärmetechnik innovative Reinigungsverfahren in der Biomassevergasung. Wenn dieses Heft erscheint, wird die dem Field of Expertise „Sustainable Systems“ zugeordnete §99-Forschungsprofessur für „Integrated Building Systems“ vergeben sein. Das FoE erwartet von dieser Professur wichtige Impulse für die fakultätsübergreifende Forschung.

According to NASA, 2014 was the warmest year since records began (in 1880). The ten warmest years ever measured – with the exception of 1998 – all occurred since 2000 and in some parts of the world the consequences of climate change are already dramatic. A perfect example is California, which is currently in the fourth year of an extreme drought. As the US state with the strongest economy, California's water infrastructure is highly developed. But with the snow pack at an all time low Governor Jerry Brown just announced measures to reduce water use by 25%. The agriculture sector, which uses 80% of California's water, is nervous – billions are at stake.

In the so-called California Delta two big rivers join before they flow out into the San Francisco Bay. The man-made Delta is the focus of intense economic and political interests: a critical part of Southern California's water supply is piped from the Delta towards Los Angeles – water that is much needed in the North as well. What's more, the Delta, a former marsh, now lies below sea level and the current ecosystem relies on fresh water flow out into the Bay. What happens when sea water levels rise? Or if the flood defenses fail catastrophically? In March I traveled through the Delta with two researchers and spoke with many experts about the situation. The Delta's problems are complex and systemic. They concern water, agriculture and people's leisure and livelihoods, as well as lifestyles, urban planning, biodiversity and species protection. California is far away, but ultimately climate change concerns us all. With its economic influence California's difficulties may help world leaders realize that the dangers of global warming are imminent and thus increase our readiness to find and implement sustainable solutions.

Sustainability research has many facets. On page 27 Moritz Husmann from the Institute of Thermal Engineering describes innovative cleaning methods in biomass gasification. When this issue appears, the section 99 professorship for Integrated Building Systems, created for the FoE Sustainable Systems, will have been named. The FoE expects important contributions to interdisciplinary research from this new position.



## Schwefelfänger für die Biomassenutzung

### *Capturing Sulfur for Enhanced Use of Biomass*

Moritz Husmann

Eine vielseitige Möglichkeit zur energetischen Nutzung von Biomasse besteht in der thermischen Vergasung von Biomasse. Je nach Zielanwendung und Art der eingesetzten Biomasse muss das entstehende Gas entsprechend gereinigt werden. Am Institut für Wärmetechnik (IWT) der TU Graz forschen wir an Konzepten, um diese Gasreinigung zu vereinfachen und damit die Erzeugung von biogenem Erdgas wirtschaftlich attraktiv zu machen.

#### Erzeugung von biogenem Erdgas aus Biomasse

Neben der Verbrennung als der simpelsten Form der energetischen Nutzung von Biomasse besteht die Möglichkeit, durch Vergasung ein erdgasähnliches Produktgas zu erzeugen, welches das Einsatzspektrum hinsichtlich Strom und Wärmeerzeugung gegenüber der Verbrennung deutlich erweitert. Eine mögliche Technologie ist die allotherme Vergasung, bei der die Vergasung durch externe Energiezufuhr ermöglicht wird und durch Wasserdampf als Vergasungsmedium ein stickstoffarmes, wasserstoffreiches Synthesegas entsteht. Dieses eignet sich nach Aufbereitung zur Einspeisung in das Erdgasnetz oder zur Weiterverwendung in der chemischen Industrie zur Produktion von Biokraftstoffen („biofuels“). Zwar ist die allotherme Vergasung von Holzhackschnitzeln mit Wasserdampf Stand der Technik, jedoch ohne Förderung nicht wirtschaftlich, da Holz ein zu kostspieliger Brennstoff ist. Aus diesem Grund wird am IWT an Lösungskonzepten gearbeitet, das Brennstoffspektrum in Richtung niederwertiger Brennstoffe zu erweitern. Neben Kriterien wie Aschegehalt und Zusammensetzung stellt vor allem die im Regelfall deutlich erhöhte Belastung des Gases mit Chlor und Schwefel ein Problem dar, da die Kosten für eine aufwendige Gasreinigung den Vorteil günstigerer Brennstoffe schnell zunichtemachen können. Am IWT werden neben der Teerreformierung vor allem Entschwefelungskonzepte untersucht, die durch eine Kombination aus verschiedenen Reinigungsstufen sowohl die Verbrauchskosten als auch den erreichten Restschwefelgehalt reduzieren sollen (vgl. Abbildung 1). >

*A versatile tool for energetic use of biomass is the gasification of biomass. Depending on the target application and the type of biomass used, the produced gas needs further treatment. At the Institute of Thermal Engineering (IWT) of Graz University of Technology, we are conducting research to simplify the concepts of this gas purification method and thus to make the production of biogenic natural gas economically more attractive.*

#### Production of biomass derived substitute natural gas

*In addition to incineration as the simplest form of the energetic use of biomass, it is possible to generate a gas which is similar to natural gas by means of gasification. This significantly extends the range of pathways in terms of current and heat generation over mere combustion. One possible technology is allothermal gasification, in which the gasification is made possible by an external supply of energy and steam as the gasifying medium leading to the formation of a nitrogen-poor, hydrogen-rich synthesis gas. After further purification and conversion steps this gas is suited for injection into the natural gas grid or for further use in the chemical industry for the production of “biofuels”. Although the allothermal gasification of wood chips with steam is state of the art, it is not economically feasible without subsidies, since wood is an overly expensive fuel. For this reason we are working on solutions to expand the range of fuels towards lower quality fuels and residues. In addition to limiting criteria such as ash content and composition, syngas derived from such low grade biomass and residues tends to contain a considerably increased fraction of chlorine and sulfur. This is problematic, since the cost of a more expensive gas cleaning can easily negate the advantage of cheaper fuels. Besides investigations on tar reforming, new concepts for desulfurization in particular which should reduce both the consumption costs and the achieved residual sulfur by a combination of different purification steps are being investigated at the IWT (see Figure 1). >*



Moritz Husmann studierte Verfahrenstechnik in Erlangen und beschäftigt sich im Rahmen seiner Dissertation an der TU Graz mit der In-situ-Entschwefelung von Synthesegas aus thermischer Vergasung von Biomasse.

*Moritz Husmann studied process engineering in Erlangen and is currently working on his PhD at Graz University of Technology in research on the in-situ desulfurization of synthesis gas derived from thermal gasification of biomass.*

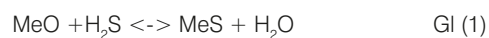
**Abbildung 1:**  
**Angestrebtes modulares Konzept zur gestuften Entschwefelung mit den jeweiligen Zielwerten am Auslass der einzelnen Entschwefelungsstufen (HDS – Hydrosulfurierung).**

*Figure 1:*  
*Pursued concept of gas cleaning for high sulfur-containing fuels with optional steps such as hydrosulfurization (HDS). The displayed values for sulfur content represent the outlet margins of each process step.*

*Literatur/Reference:*  
Husmann, M.; Hochenauer, C.; Meng, X.; Jong, W. de; Kienberger, T. Evaluation of Sorbents for High Temperature In Situ Desulfurization of Biomass-Derived Syngas. *Energy Fuels* 2014, 28 (4), 2523–2534.

## Innovative Gasreinigung: In-situ-Entschwefelung

Ein neuartiges Konzept ist hierbei unter anderem die In-situ-Grobentschwefelung, die durch Zugabe von Adsorbentien in das Bettmaterial der Wirbelschicht bereits im Reaktor eine Einbindung des bei der Vergasung als Schwefelwasserstoff ( $H_2S$ ) frei werdenden Schwefels gewährleisten soll. Hierfür werden Metalloxide ( $MeO$ ) eingesetzt, welche nach folgender Entschwefelungsreaktion (Gl 1) unter Bildung von Wasser sulfidiert werden.

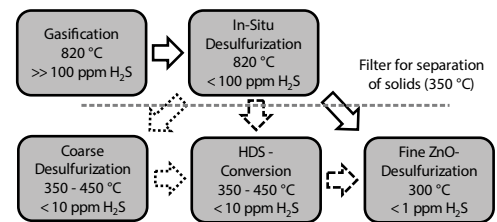


In einem ersten Schritt wurden die im Reaktor vorherrschenden Bedingungen in einer Simulation (Software: FactSage) nachgebildet, um die theoretisch erreichbaren chemischen Gleichgewichte (GGW) für verschiedene  $MeO$  zu ermitteln. Die in Abbildung 2 dargestellten Ergebnisse der Simulation zeigen die thermodynamisch erreichbaren Restschwefelgehalte im Synthesegas für verschiedene Adsorbentien.

Es zeigt sich (Abbildung 2), dass unter den Bedingungen im Vergasungsreaktor für die meisten Adsorbentien der erreichbare Restschwefelgehalt dem in Abbildung 1 dargestellten Benchmark-Kriterium für eine In-situ-Entschwefelung nicht genügt. Auffällig ist hingegen eine Schmelzphase von Calciumoxid ( $CaO$ ) und Bariumoxid (dargestellt als  $BaO$ ), deren thermodynamisches Gleichgewicht unter  $5 \text{ ppm}_v H_2S$  liegt. Würden Restschwefelgehalte in dieser Größenordnung erreicht, wäre die Anforderung an eine Grobentschwefelung mehr als erreicht und ein wichtiger Schritt in Richtung des ökonomischen Einsatzes alternativer Brennstoffe in der Biomassevergasung getan.

## Von der Theorie zur Praxis

Um die in der Theorie vielversprechenden Ergebnisse auch auf ihre Umsetzung in der Praxis hin zu überprüfen, wurde eine am IWT bestehende Vergasungsanlage für die Untersuchung der In-situ-Entschwefelung umgebaut. Dadurch ist es möglich, den Schwefelgehalt im Gas bei der Vergasung von Holzpellets durch die Zufuhr von Kohlenstoffdisulfid ( $CS_2$ ) variabel anzuheben, um somit chemische Gleichgewichte der Entschwefelung in einem breiten Spektrum sichtbar zu machen. Die Analyse von Schwefelwasserstoff und



## Innovative gas cleaning: in-situ desulfurization

A novel approach includes as a first step the in-situ coarse desulfurization. The concept is a capture of sulfur that is released during gasification as hydrogen sulfide ( $H_2S$ ) by the addition of sorbents within the bed material of the fluidized bed reactor. For this purpose, metal oxides ( $MeO$ ) are applied which are sulfided according to the following desulfurization reaction (Eq 1) under formation of water.



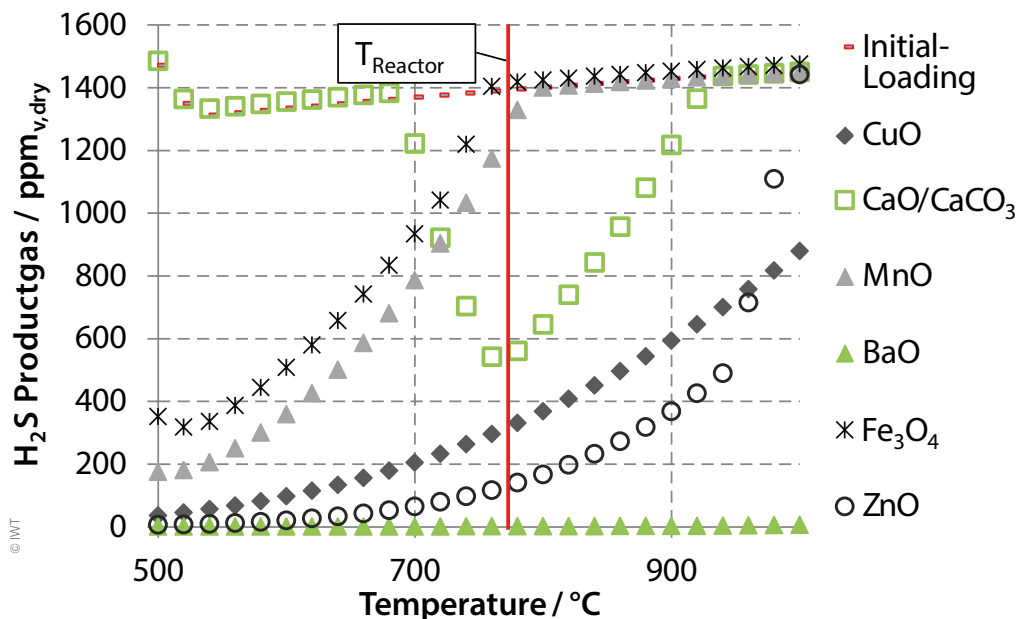
In a first step, the prevailing conditions in the reactor were simulated (Software: FactSage) to determine the theoretically achievable chemical equilibria (CEQ) for various  $MeO$ . Results of the simulation are depicted in Figure 2 and show the thermodynamically achievable residual sulfur content in the synthesis gas for various sorbents.

As can be seen in Figure 2 most sulfur sorbents do not meet the benchmark for residual sulfur content depicted in Figure 1 for in-situ desulfurization. In striking contrast, a melting phase of calcium oxide ( $CaO$ ) and barium oxide (shown as  $BaO$ ) shows a thermodynamic equilibrium below  $5 \text{ ppm}_v H_2S$  for the conditions prevailing in the gasification reactor. If residual sulfur contents in this range could be achieved, the requirement for a coarse desulfurization would be more than met and an important step towards the economical use of alternative fuels in the field of biomass gasification would be accomplished.

## Bringing theory to application

To verify the promising theoretical results by experimental investigation, a gasification reactor at IWT has been adapted for process application of in-situ desulfurization sorbents. For this purpose a fluidized bed reactor for the gasification of wood pellets has been connected to a test gas rig in order to adjust the sulfur content in the gas by the





**Abbildung 2:**  
Thermodynamisches Gleichgewicht der Entschwefelungsreaktion (Gl 1) hinsichtlich der im Produktgas vorliegenden Restbelastung an  $\text{H}_2\text{S}$  in Abhängigkeit der Temperatur (simulierte Werte für 40%  $\text{H}_2\text{O}$ ).

**Figure 2:**  
Thermodynamic equilibrium of the desulfurization reaction (Eq 1) for various desulfurization sorbents showing the residual content of  $\text{H}_2\text{S}$  in the gas in dependence on temperature. (Simulated values for 40%  $\text{H}_2\text{O}$ ).

anderen flüchtigen Schwefelkomponenten erfolgt durch gasförmige Probenahme online über einen Gaschromatographen. Die Untersuchung des Teergehaltes und des Anteils an schwefelhaltigen Teerkomponenten erfolgt über extraktive Probenahme durch Analyse von Flüssigproben. Die Bandbreite der am IWT vorhandenen Gasanalytik, in Kombination mit einer Vielzahl an langzeitstabilen Vergasungsanlagen verschiedener Leistungsklassen, macht das Institut zu einem besonders geeigneten Standort für die Untersuchung und Weiterentwicklung innovativer Gasreinigungskonzepte. Untersuchungen zur In-situ-Entschwefelung zeigen vielversprechende Ergebnisse hinsichtlich der Übereinstimmung zwischen Theorie und Praxis, wobei eine erste Untersuchungsreihe mit CaO als Adsorbentium durchgeführt wurde und eine Entschwefelung von 1500 auf 500 ppm<sub>v</sub> gezeigt werden konnte. Derzeit laufende Untersuchungen mit einem Bariumoxid-basierten Adsorbentium zeigen eine ähnliche Tendenz, wobei bereits eine Entschwefelung von 80 auf unter 60 ppm<sub>v</sub> erreicht wurde. ■

supply of carbon disulfide ( $\text{CS}_2$ ). Like this it is possible to investigate chemical equilibria of the desulfurization reaction (Eq 1) in a broad spectrum of sulfur content. The analysis of hydrogen sulfide and other volatile sulfur compounds is carried out by online gaseous sampling using a gas chromatograph. The investigation of the tar content and the proportion of sulfur-containing tar components is carried out by extractive sampling through analysis of liquid samples. The range of the gas analysis infrastructure available at IWT, in combination with a variety of long-term stable gasification plants of different performance scales, qualify the institute as a particularly suitable location for the investigation and development of innovative gas cleaning concepts. Studies on the in-situ desulfurization show promising results regarding the agreement between theory and practice, and a first series of studies using calcium oxide as sorbent was performed and a desulfurization of 1500 to 500 ppm<sub>v</sub> could be shown. Ongoing studies using a barium oxide-based sorbent show a similar trend, achieving a desulfurization of 80 to below 60 ppm<sub>v</sub>. ■

## Innovative Kontrastmittel für den medizinischen Durchblick *Innovative Contrast Media for Medical Imaging Techniques*

Annemarie Happe

**D**ie Magnetresonanztomografie (MRT) ist aus dem klinischen Alltag nicht mehr wegzudenken. Kontrastmittel liefern zusätzliche funktionelle Informationen, der Informationsgehalt in Bezug auf molekulare Unterschiede bei verschiedenen Erkrankungen ist aber relativ unspezifisch. Biomedizinische Techniker/innen, Quantenphysiker/innen und Chemiker/innen wollen dieses Problem beheben: mithilfe eines Kontrastmittelkonzepts, das auf einem quantenmechanischen Effekt basiert.

Wollte ein Arzt früher feststellen, ob sein Patient z. B. die „Zuckerkrankheit“ hatte, kostete er dessen Urin. Mit dem heutigen Wissen über Krankheitsursachen hat sich auch die Diagnostik grundlegend verändert und ist um ein Vielfaches genauer geworden. Neben Laboruntersuchungen gehören nichtinvasive bildgebende Verfahren wie CT und MRT zur Routine. Aber auch diese Verfahren stoßen an ihre Grenzen – besonders, wenn es darum geht, molekulare und metabolische Veränderungen im Zusammenhang z. B. mit Krebs,

**M**agnetic resonance imaging (MRI) has meanwhile become indispensable to everyday clinical activities. Contrast media provide additional functional information, but the informational content with respect to molecular differences in various illnesses is relatively non-specific. Bio-medical engineers, quantum physicists and chemists want to remedy this problem by using the concept of a contrast-medium based on an effect from quantum mechanics.

*If in former times a doctor wanted to know if his patient had diabetes, he tasted his urine. With our modern knowledge of the causes of disease, diagnostics have changed fundamentally and become much more exact. Apart from laboratory tests, non-invasive imaging techniques, such as CT and MRI, have become routine. But according to Hermann Scharfetter from the Institute of Medical Engineering at Graz University of Technology even these techniques come up against their limits – especially when it comes to visualising molecular and metabolic changes in the context of cancer, Alzheimer's and heart disease at high resolution and sensitivity.*

**Abbildung 1:**  
Ein Forschertrio der TU Graz lässt mit einem Konzept für völlig neue Kontrastmittel authorchen: Stefan Spirk, Andreas Petrovic und Hermann Scharfetter (v. l. n. r.) vor dem Forschungs-MR-Tomografen.

**Figure 1:**  
*A research trio from Graz University of Technology attracts attention with a concept for completely new contrast media. Stefan Spirk, Andreas Petrovic and Hermann Scharfetter (from left to right) in front of the research MRI scanner.*

### **Visionary approach, international team**

*With a visionary approach from Graz which falls back on the quantum mechanical effect of so-called quadrupole relaxation, even more differentiated images of the body's interior will be made in the future. Decision-makers of the European science funding programme FET Open recognised that the idea of Scharfetter and his colleagues Andreas Petrovic and Stefan Spirk bore in itself potential for an important innovation. They are funding the Graz researchers and their*





Alzheimer und Herzerkrankungen mit hoher Auflösung und Sensitivität sichtbar zu machen, schildert Hermann Scharfetter vom Institut für Medizintechnik der TU Graz.

### Visionärer Ansatz, internationales Team

Mit einem visionären Ansatz aus Graz, der auf den quantenmechanischen Effekt der sogenannten Quadrupolrelaxation zurückgreift, sollen künftig noch differenziertere Bilder aus dem Körperinneren angefertigt werden. Entscheidungsträger/innen des europäischen Wissenschaftsförderprogramms FET Open haben erkannt, dass diese Idee von Scharfetter und seinen Kollegen Andreas Petrovic und Stefan Spirk das Potenzial zu einer bedeutenden Innovation in sich trägt: Sie fördern die Grazer Forscher und ihre internationalen Kooperationspartner/innen bis Ende 2018 mit rund 2,5 Mio. Euro. Neben den Mitarbeitern der TU Graz zählen eine polnische Quantenphysikerin, ein schwedischer Quantenchemiker, eine slowenische Materialwissenschaftlerin sowie eine Grazer Toxikologin zum Projektteam.

„Generell wollen wir krankhafte Veränderungen auf zellulärer Ebene und molekulare Signaturen von Krankheiten in vivo sichtbar machen und charakterisieren können“, erläutert der Grazer biomedizinische Techniker. Er setzt sein Fachwissen für Anwendungen zum sogenannten „Molecular Imaging“ (MI) und für die Theranostik ein, die mithilfe von bildgebenden Verfahren u. a. darüber Auskunft geben kann, ob das Therapeutikum auch korrekt am Zielort angekommen ist.

Die MRT als bildgebendes Verfahren bietet eine hohe Auflösung und einen hervorragenden Kontrast in der anatomischen Darstellung und kommt ohne schädigende ionisierende Strahlung aus. Mit ihr können hoch aufgelöste Schnittbilder des Körperinneren erstellt werden. Diese wie auch andere Werkzeuge der klinischen Bildgebung seien jedoch noch weit davon entfernt, methodisch und technisch abgeschlossen zu sein, ist der Forscher überzeugt. Die MRT arbeitet mit einem starken Magnetfeld und hochfrequenten elektromagnetischen Feldern. Damit werden die magnetischen Kernmomente von im menschlichen Gewebe reichlich vorhandenen Wasserstoffatomen für kurze Zeit aus ihrer Gleichgewichtslage ausgelenkt. Dieses bei der sogenannten Resonanzfrequenz >

international cooperation partners to the tune of 2.5 million euros up to the end of 2018. Apart from staff at Graz University of Technology, members of the project team include a Polish quantum physicist, a Swedish quantum chemist, a Slovenian materials scientist and a Graz toxicologist.

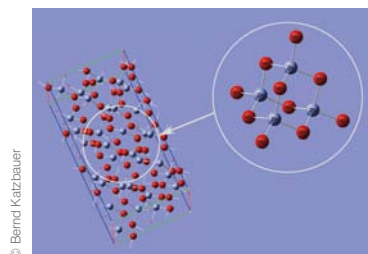
*“In general we want to make pathological changes at a cellular level and molecular signatures of illnesses visible in vivo,” explained the Graz biomedical engineer. He utilises his specialist knowledge for applications in so-called molecular imaging (MI) and theranostics which, with assistance from imaging techniques, among other things, can give information as to whether the therapeutic agent has arrived at the right destination.*

*The MRI imaging technique provides high resolution and excellent contrast in anatomical representation and works without damaging ionising radiation. It enables high-resolution sectional images of the body's interior to be made. The researcher is convinced that the development of this and other tools of clinical imaging techniques are still a long way from being technically and systematically perfected.*

*MRI works using a strong magnetic field and high-frequency electromagnetic fields. The nuclear magnetic moments of the hydrogen atoms that are found in abundance in human tissue are temporarily put out of equilibrium. This phenomenon, which occurs at the so-called resonance frequency, gives an insight into the composition and structure of tissues because the nuclei return to their original state at different speeds depending on the tissue. These differences described through the so-called relaxation times form the most important contrast mechanism of MRI.*

### Quadrupole resonance for enhancing signals

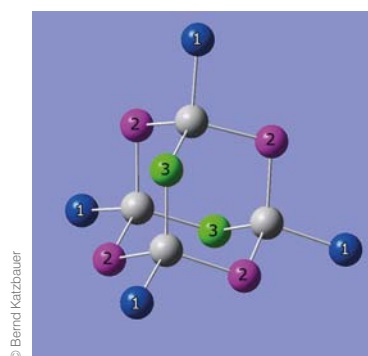
*Contrast media can alter relaxation times through their magnetic characteristics and thus increase the explanatory power of the images. “We assume that considerably more processes can be visualised using our concept than with previous substances,” says Scharfetter. According to the Graz researcher's theory, an extremely versatile contrast mechanism could be created with the help of so-called cross relaxation, which occurs in the presence of nuclei with a so-called electrical quadrupole moment and characteristic quadrupole resonance frequencies. If hydrogen nuclei enter into >*



© Bernd Katzbauer

**Abbildung 2:**  
Ein größerer Ausschnitt aus einem Kristall der Referenzsubstanz Zinkbromit ( $\text{ZnBr}_2$ ), die allerdings nicht für Kontrastmittel geeignet ist. Der gezoomte Bereich zeigt die Lage der Zink (Zn)-Atome und Brom (Br)-Atome.

**Figure 2:**  
*A large section of a crystal of the reference substance  $\text{ZnBr}_2$ , which, however, is not suitable as a contrast medium. The magnified area shows the position of the Zn and Br atoms.*



© Bernd Katzbauer

**Abbildung 3:**  
Kristallausschnitt mit drei verschiedenen eingefärbten Gruppen von Br-Atomen, die jeweils etwas andere Bindungsverhältnisse und daher etwas andere Quadrupolresonanzfrequenzen haben.

**Figure 3:**  
*Section of a crystal with three different coloured groups of Br atoms, each with slightly different bonding properties and thus slightly different quadrupole frequencies.*

auftretende Phänomen gibt Einblick in Aufbau und Struktur der Gewebe, denn die Kerne kehren je nach Gewebe verschieden schnell in ihre Ausgangslage zurück. Diese durch Relaxationszeiten beschriebenen Unterschiede bilden den wichtigsten Kontrastmechanismus für MRT.

### Quadrupolresonanz zur Signalverstärkung

Kontrastmittel können aufgrund ihrer magnetischen Eigenschaften die Relaxationszeit verändern und damit die Aussagekraft der Bilder erhöhen. „Wir gehen davon aus, dass sich mit unserem Konzept deutlich mehr Prozesse abbilden lassen als mit bisherigen Substanzen“, so Scharfetter. Nach der Theorie der Grazer Forscher könnte mithilfe sogenannter Kreuzrelaxation, die bei der Anwesenheit von Kernen mit einem sogenannten elektrischen Quadrupolmoment und charakteristischen Quadrupolresonanzfrequenzen möglich wird, ein äußerst vielseitiger Kontrastmechanismus entstehen. Treten nämlich Wasserstoffkerne in Resonanz zu den Quadrupolkernen, so beschleunigt dies ihre Relaxation, was wiederum zu einer Kontrastverstärkung führt. Der Effekt tritt allerdings nur auf, wenn die Resonanzfrequenzen der beiden Kerne gleich sind. Eine große Herausforderung wird es daher sein, die chemischen Verbindungen der Quadrupolkerne so zu designen, dass ihre Resonanzfrequenzen in der Nähe der Zielfrequenz für klinische MR-Tomografie liegen.

### Smart und sensitiv

„Unsere Idee bietet zahlreiche Möglichkeiten zur Entwicklung hochspezifischer, ‚smarter‘ Kontrastmittel“, betont Scharfetter. Das Schöne an der Quadrupolfrequenz sei, dass sie durch Veränderungen des Magnetfeldes, aber auch durch chemische Bindungen, die das elektrische Feld rund um den Quadrupolkern beeinflussen, verschoben wird. „Mit dem Magnetfeld kann man so den Effekt z. B. ein- und ausschalten. Ändert die chemische Umgebung – wie z. B. der pH-Wert – die Elektronenverteilung um den Kern, so ändert sich die Kreuzrelaxation. Damit haben wir einen Schlüssel in der Hand, um auf chemische Bindungen sensibel zu werden“, erklärt der Grazer Forscher. „Wir konzentrieren uns dabei auf metallische Quadrupolkerne mit geeigneten Resonanzfrequenzen“, schildert Scharfetter den aktuellen Stand.

Die Arbeit der nächsten Jahre umfasst das Design von quantenmechanischen und -chemischen Modellen, die simulationsgestützte Synthese der Kernkomponenten und der sie tragenden Nanopartikel, die für die Einstellung der Effizienz des Effektes wichtig sind, sowie ihre detaillierte Charakterisierung bis hin zur Erprobung des gesamten Komplexes an Zellkulturen im 3-Tesla-Hochfeld-MR-Tomografen der TU Graz. „Das alles erfordert exzellente wissenschaftliche Fachkompetenz in Bereichen der Quantenphysik, Chemie, des Biomedical Engineering bis hin zur Toxikologie und ist nur im interdisziplinären Team, wie wir es hier bilden konnten, möglich“, betont der Projektleiter. ■

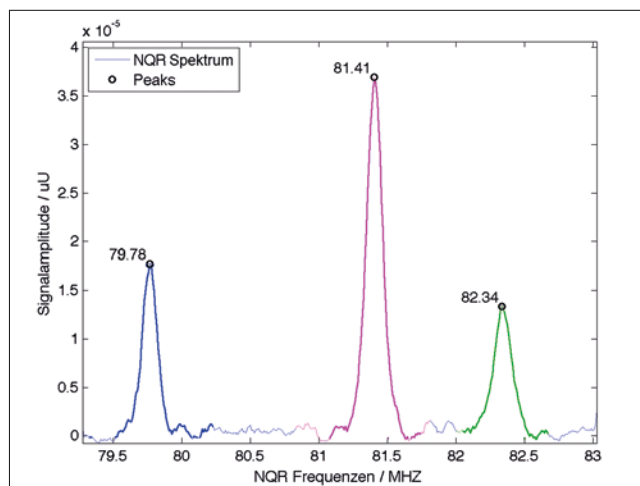


Abbildung 4:

**Quadrupolresonanz-Spektrum von Br mit den drei unterschiedlichen Peaks in den entsprechenden Farben. Die Kunst beim Kontrastmittel-Design besteht darin, die Bindungsverhältnisse so zu tunen, dass die Frequenzen die richtigen für 3-Tesla-Bildgebung sind.**

Figure 4:

**Quadrupole resonance spectrum of Br with three different peaks in different colours. The art of designing contrast media consists of tuning the bonding properties in such a way that the frequencies are exactly right for 3-Tesla imaging.**

resonance with the quadrupole nuclei, this accelerates their relaxation, which in turn leads to an enhancement of the contrast. The effect only occurs, however, when the resonance frequencies of both nuclei are the same. Designing the chemical bonds of the quadrupole nuclei so that their resonance frequencies lie in the range of the target frequency for clinical MRI will be a huge challenge.

### Smart and sensitive

“Our idea offers numerous possibilities to develop highly specific, smarter contrast media,” emphasises Scharfetter. The great thing about the quadrupole frequency is that it is shifted by alterations in the magnetic field and also by chemical bonds which influence the electrical field around the quadrupole nuclei. “You can thus switch the effect on or off by means of the magnetic field. If the chemical environment – such as, for instance, the pH value – changes the distribution of the electrons around the nuclei, the cross relaxation also changes. We thus have a key to enable us to become sensitive to chemical bonding,” says the Graz researcher. “We’re concentrating on metallic quadrupole nuclei with suitable resonance frequencies,” explains Scharfetter about the current progress.

The work of the next few years comprises the design of quantum mechanical and quantum chemical models, the simulation-aided synthesis of nuclear components and the nanoparticles that carry them, which are important for the adjustment of the efficiency of the effect, and their detailed characterisation including testing the whole complex on cell cultures in the 3-Tesla high-field MRI scanner of Graz University of Technology. “All this requires excellent scientific competence in the fields of quantum physics, chemistry, biomedical engineering and toxicology and is only possible in an interdisciplinary team like the one we’ve been able to put together here,” stressed the project leader. ■





**Abbildung 1:**  
Die bioCRACK-Pilotanlage in der OMV  
Raffinerie Wien-Schwechat.

**Figure 1:**  
The bioCRACK pilot plant in the OMV  
refinery at Schwechat, Vienna.

© J. Fitzberger, P. Pucher, N. Schwaiger, M. Siebenhofer, Chem.  
Eng. Trans. 2014, 39, DOI:10.3303/CET1439199, S. 1189-1194.

## Pflanzentreibstoff 2.0

### Biofuels 2.0

Verena Ahne

Um die CO<sub>2</sub>-Belastung der Atmosphäre durch fossile Kraftstoffe zu reduzieren, wird weltweit nach alternativen Treibstoffen gesucht. In Verfahren, die die TU Graz in Kooperation mit zwei großen österreichischen Firmen entwickelt und erprobt, kann durch Flüssigphasenpyrolyse nicht nur Zellulose, wie bei Bioethanol, sondern auch die Pyrolysekohle, die beim Umwandlungsprozess anfällt, zu Biotreibstoff umgewandelt werden.

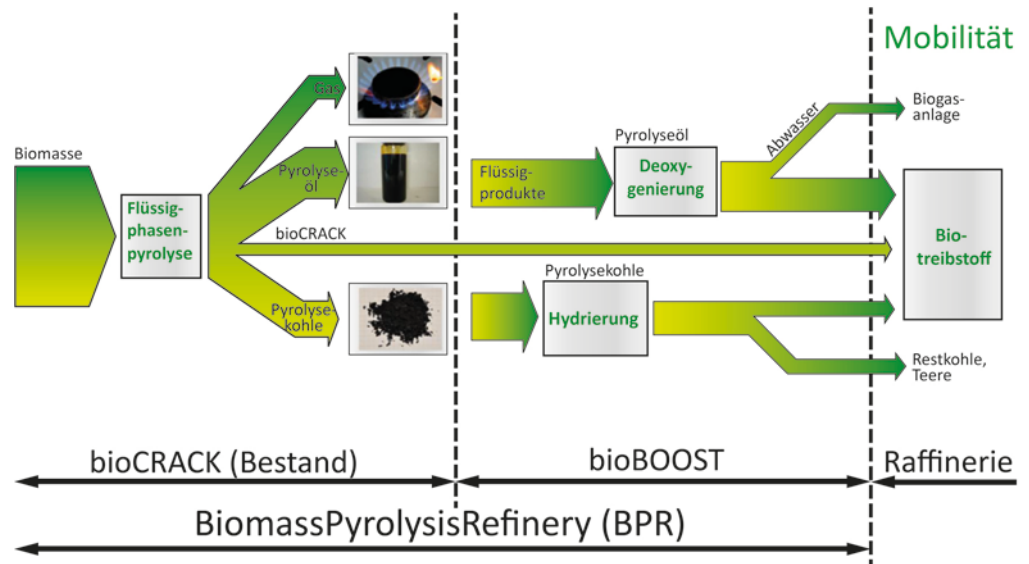
Bis zum Jahr 2020, so sieht es eine Bestimmung der EU vor, sollen zehn Prozent der im europäischen Verkehr aufgewendeten Energie aus nachwachsenden Quellen stammen. Aus Ölpflanzen gewonnene Biotreibstoffe der ersten Generation sind mittlerweile jedoch als wenig nachhaltig in die Kritik geraten: Meist steht ihr Anbau in direkter Konkurrenz zu Nahrungsmitteln und/oder treibt durch die Rodung von Primärwäldern den Klimawandel, dem sie eigentlich vorbeugen sollten, noch weiter an.

Das Gebot der Stunde ist deshalb die Entwicklung von Verfahren, die aus Abfallprodukten oder leicht- und schnellwüchsigen Nicht-Nahrungspflanzen Biotreibstoffe der zweiten Generation gewinnen. Ein möglicher Rohstoff dafür ist Lignozellulose. Dieses „Baugerüst“ von Pflanzen wurde bisher vor allem zur Produktion von Bioethanol verwendet. Doch Forscherinnen und Forscher der Technischen Universität Graz und der auf Biogas- und Biodiesel-Anlagenbau spezialisierten Firma BDI BioEnergy International AG aus Grambach bei Graz möchten einen höheren Heizwert erzielen und Holzabfälle, Stroh und andere nicht essbare Pflanzen zu Biotreibstoff umwandeln. Zusammen >

*In order to reduce the CO<sub>2</sub> pollution of the atmosphere from fossil fuels exhaust, alternative fuels are being sought worldwide. Using methods developed and tested by Graz University of Technology in cooperation with two big Austrian companies, bio-fuel is obtained through liquid-phase pyrolysis of lignocellulosic feed.*

*EU regulations stipulate that 10 percent of the energy used in transport has to come from renewable sources by 2020. Bio-fuels obtained from first generation oil plants have meanwhile come under criticism for not being sustainable enough. Usually their cultivation is in direct competition with foodstuffs and/or drives climate change even more through the clearance of primary forest – something they are supposed to prevent.*

*The development of processes which can obtain second generation bio-fuels from waste products or fast or medium-growing non-food crops is a high priority task. One eligible raw material is lignocellulose. This “scaffold structure” of plants has been up to now primarily used for the production of bio-ethanol. Researchers at Graz University of Technology and the BDI BioEnergy International AG company located in Grambach near Graz, which specialises in bio-gas and bio-diesel plant construction, want to achieve higher calorific values of fuels from lignocellulose by converting wooden waste, straw and other inedible plants into bio-fuels. Together with the Institute of Chemical Engineering and Environmental Technology at Graz University of Technology, with which BDI has been closely cooperating since the 1990s, meticulous work >*



**Abbildung 2:**  
**BiomassPyrolysisRefinery – Das**  
**Biomasseverflüssigungskonzept der BDI.**  
*Figure 2:*  
*Biomass pyrolysis refinery: the biomass*  
*liquefaction concept of BDI.*

mit dem Institut für Chemische Verfahrenstechnik und Umwelttechnik der TU Graz, welches mit dem BDI seit den 1990er-Jahren eng kooperiert, wurde und wird deshalb an verschiedenen Möglichkeiten der Biomasseverflüssigung – der sogenannten Flüssigphasenpyrolyse – getüftelt. Zurzeit läuft dazu das vierte FFG-geförderte Projekt in Folge.

### Aus Pflanzen wird Flüssigkeit

„Allgemein erklärt, wird bei der Pyrolyse ein Ausgangsmaterial, zum Beispiel Holz, ohne Sauerstoff bei Temperaturen zwischen 300 und 600 Grad thermochemisch verflüssigt“, erklärt der Chemieingenieur Nikolaus Schwaiger, der an der TU Graz und für die Firma BDI arbeitet. Dabei entstehen einerseits Gase, die abgeschieden und wie Erdgas zur Energiebereitstellung verwendet werden. Andererseits bilden sich flüssige und feste Zwischenprodukte, die weiterbehandelt werden müssen.

In Graz wurde ein eigenes Verfahren – das von BDI patentierte BioCRACK-Verfahren – entwickelt und von 2012 bis 2014 in einer Pilotanlage bei der OMV in Schwechat im großen Maßstab mit Fichtenholz, Hartholz, Weizenstroh und der „zukünftigen Energiepflanze“ Miscanthus getestet. „Es haben alle ziemlich gut funktioniert. Weizenstroh war vielleicht etwas schwieriger; aber die Ergebnisse bei der Verflüssigung von Miscanthus sind in jeder Hinsicht beeindruckend.“ So hatte das Schilfgras beispielsweise einen besonders niedrigen Aschegehalt, was bedeutet, dass es besser und mit weniger Rückständen verflüssigt werden kann.

„Für den bei der Pyrolyse benötigten Wärmeträger verwenden wir ein Zwischenprodukt der Erdölraffinerie“, erklärt Schwaiger, „und zwar ‚Vacuum Gas Oil‘ (VGO), das wir auf ca. 350 bis 400 Grad aufheizen. In dieses VGO lassen sich etwa 15 Prozent des biogenen Kohlenstoffs – das sind sieben Pro-

has been carried out on various possibilities of biomass liquefaction by liquid-phase pyrolysis. The project has been funded by the Austrian Science Fund (FFG).

### Liquid fuels from plants

“Explained roughly, pyrolysis is a process in which a starting material, for instance wood, is thermochemically liquefied at temperatures between 300 and 600°C without oxygen,” explains chemical engineer Nikolaus Schwaiger, who works at Graz University of Technology as well as BDI. During liquid phase pyrolysis gaseous effluent is produced, separated, and used for energy conversion. On the other hand, liquid and solid intermediate products are formed and upgraded to suffice the standards for transportation fuels.

A special process – the “BioCRACK” process – has been developed at Graz and patented by BDI. It was tested between 2012 and 2014 in a pilot plant at OMV in Schwechat on a large scale using spruce wood, hard wood, wheat straw and the “energy plant of the future” Miscanthus. “Everything worked rather well. Wheat straw was perhaps a bit more difficult, but the results with the liquefaction of Miscanthus were impressive from every aspect.” Miscanthus grass, for example, has a very low ash content, which means that it can be more easily liquefied with less residue.

“For the heat carrier necessary for the pyrolysis we use an intermediate product from oil refineries,” explained Schwaiger, “Vacuum gas oil (VGO), which we heat up to approx. 350 to 400°C. Some 15 percent of the biogenic carbon can be directly converted, corresponding with seven percent of the biomass.” The fuel produced from VGO and biomass already contains a significant amount of bio-fuel.



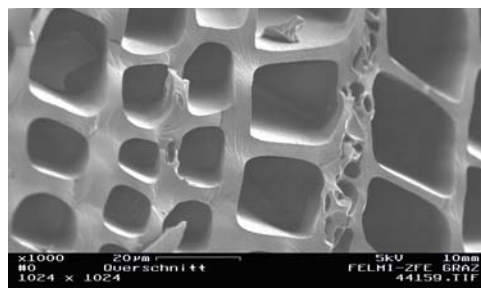
zent der Biomasse – gleich einmal direkt hineinpressen.“ Sprich der in Folge produzierte Treibstoff (Diesel oder Benzin) enthält bereits einen gewissen Anteil Biokraftstoff.

#### Aus der Flüssigkeit wird Dieseltreibstoff

Doch es entstehen noch zwei weitere flüssige Komponenten, die weiterbehandelt werden müssen, um als Treibstoff nutzbar zu sein: einerseits das wässrige Flüssigphasenpyrolyseöl, das aus den sauerstoffreichen, wasserlöslichen organischen Verbindungen der Biomasse und aus Reaktionswasser besteht – es muss von Sauerstoff und Wasser befreit werden („Hydrodeoxygenierung“) –, andererseits BioCRACK-Öl, das nur noch destilliert und hydriert werden muss, bevor damit ein normaler Motor betrieben werden kann. In kleineren Versuchen in Graz kombinierten Schwaiger und sein Team diese beiden Öle und gewannen daraus erstmals weltweit einen Dieseltreibstoff.

„Wir können derzeit 18 Prozent der Biomasse verflüssigen, wobei der Gesamtprozess noch nicht optimiert ist: 20 Prozent des Ausgangsmaterials – wie bei der Bioethanol-Produktion – wären auch bei der Flüssigphasenpyrolyse möglich“, so Schwaiger. Der biogene Kohlenstoffanteil des Vorzeigediesels lag bei 28 Prozent. Würden derartige Werte auch in einer Großanlage erzielt, wäre das tatsächlich ein großer Schritt Richtung Nachhaltigkeit von Treibstoffen und ein wesentlicher Schritt auf dem Weg zur Gesamtpflanzennutzung. Im Oktober 2014 und im Februar 2015 erschienen zwei Publikationen über das neuartige Verfahren im prestigeträchtigen Journal „Green Chemistry“.

Noch wesentlich höhere Werte wären zu erzielen, würde auch die Kohle weiterverarbeitet, die bei Pyrolyseverfahren immer als fester Bestandteil anfällt. Biokohle, fachsprachlich „Biochar“ genannt, ist ein Abfallprodukt und wird üblicherweise verbrannt. Doch der enthaltene Kohlenstoff wird so nicht optimal ausgenutzt. Deshalb suchte das Team in Graz nach einem Verfahren, um die Kohle ebenfalls zu verflüssigen. Im Labor gelang das durch die Beimengung von Tetralin. „Dass wir auch Feststoffe aus dem Pyrolyseprozess zu hohen Umsätzen verflüssigen können, ist weltweit einzigartig“, ist Schwaiger hörbar stolz. Und hofft nun auf reges Interesse seitens der Industrie. ■



© Hermand Schöthner – FELMI

**Abbildung 3:**  
**Gebildete Biochar aus der**  
**Flüssigphasenpyrolyse.**

**Figure 3:**  
**Bio-char formed from**  
**liquid-phase pyrolysis.**

#### Diesel fuel from liquid phase pyrolysis oil

*During pyrolysis two liquid products are formed which as also need an upgrade to suffice fuel quality demands. From aqueous liquid-phase pyrolysis oil, which is composed of oxygen-rich, water-soluble organic compounds from biomass, oxygen and water have to be removed (hydrodeoxygenation). BioCRACK oil, which has to be distilled and hydrogenated before a combustion engine can be run on it. In bench scale experiments, Schwaiger and his colleagues demonstrated conversion of the liquid product phases to obtain a diesel like fuel.*

*“Currently we can liquefy 18 percent of the biomass, although the entire process hasn’t been optimised yet. According to Schwaiger 20 percent conversion of the feed material is expected through liquid-phase pyrolysis. The biogenic carbon content of the produced diesel like pyrolysis oil is about 28 percent. If such values were achieved in a large scale, this would be a huge step in the direction of sustainability of fuels and an important milestone on the way to complete plant utilisation. In October 2014 and February 2015, two papers about this novel process were published in the prestigious journal Green Chemistry.*

*Even higher conversion values could be achieved if the carbon residue from pyrolysis could be liquefied too. Bio-coal, or to use its technical term “bio-char”, is a waste product of liquid phase pyrolysis, and it is usually incinerated. Incineration is a sub-optimal utilization of biochar. For this reason the Graz team looked for a method to also liquefy the carbon. This has been achieved in laboratory scale with the hydrogenating solvent tetralin. “The ability to liquefy solids from the pyrolysis process in high volume quantity is unique,” says Schwaiger, not without a certain pride, as he expects keen interest from industry. ■*

#### Literatur/Reference:

Schwaiger N., Elliott D.C., Ritzberger J., et al. (2015) Hydrocarbon liquid production via the bioCRACK process and catalytic hydroprocessing of the product oil. Green Chem. doi: 10.1039/C4GC02344G.

Pucher H., Schwaiger N., Feiner R., et al. (2015) Biofuel production from liquid phase pyrolysis oil: A two-step HDO process. Green Chem 17:1291–1298. doi: 10.1039/C4GC01741B.

# Neue Materialien aus der Quantenwelt *Novel Materials Created in the Quantum World*

Wolfgang E. Ernst, Werner Schandor

**D**ie Schatten werfen Objekte“, soll der Essayist Karl Kraus einmal über das Verhältnis zwischen Vision und Realität geäußert haben. Kraus' Bonmot trifft auch das junge Forschungsfeld der topologischen Materialien mit ihren außergewöhnlichen Eigenschaften. Ihre Besonderheit: Sie wurden mathematisch aus Konzepten der Quantenmechanik vorhergesagt, ehe sie im Labor hergestellt und experimentell nachgewiesen werden konnten.

Während alle Materie aus Atomen aufgebaut ist, können die Atome in unterschiedlicher Weise angeordnet sein, was bei Verwendung der gleichen Atomsorte zu völlig verschiedenen Materialeigenschaften in Hinblick auf Festigkeit, elektrische Leitfähigkeit oder Magnetismus führen kann. Konzepte zur Beschreibung einer Anordnung von Objekten liefert die Mathematik in den Gebieten Geometrie und Topologie. Physiker erkannten, dass die Topologie eine ausgezeichnete Grundlage zur Beschreibung und Vorhersage quantenphysikalischer Eigenschaften liefert. So konnte der US-Physiker Charles L. Kane 2005 die Möglichkeit von topologischen Isolatoren vorhersagen – von Materialien, die im Inneren als elektrische Isolatoren fungieren, während sie an ihrer Oberfläche die widerstandslose Leitung elektrischer Ladungen ermöglichen. 2007 wurde der erste topologische Isolator an der Universität Würzburg realisiert.

Eine andere Sorte sogenannter Quantenmaterialien basiert darauf, dass gezielt zusammengesetzte Nanoteilchen oder -cluster total unterschiedliche Eigenschaften gegenüber makroskopischen Materialstücken der gleichen Elementkombination aufweisen können.

**S**hadows throw objects“, the essayist Karl Kraus reputedly once said about the relationship between vision and reality. Kraus' witticism also applies to the young research field of topological materials and their unusual features. Their peculiarity is that they were mathematically predicted from concepts in the quantum world before they were produced in the laboratory and experimentally proved.

Although all matter is made of atoms, atoms can be organised in different ways, which means that the same kind of atoms can lead to completely different material properties of strength, electrical conductivity and magnetism. Mathematics supplies the concepts to describe an arrangement of objects in the fields of geometry and topology. Physicists have recognised that topology provides an excellent basis for describing and predicting quantum mechanical properties. By using topology, the US physicist Charles L. Kane was able to predict the possibility of topological insulators in 2005 – materials which act in their interior as electrical insulators, but which at the surface enable the resistanceless conduction of electrical charges. The first topological insulator was realised at the University of Würzburg in 2007.

Another kind of so-called quantum material is based on the fact that nanoparticles or nanoclusters which have been intentionally composed in a particular arrangement can demonstrate totally different properties compared to macroscopic pieces of material of the same combination of elements. “We've just attempted to put together a cluster of



„Wir versuchen soeben, einen Cluster aus einigen hundert Atomen zusammenzusetzen, der eine besonders hohe Magnetisierbarkeit ermöglicht“, sagt Wolfgang Ernst, Leiter des Instituts für Experimentalphysik an der TU Graz.

### Zweckfreies Spiel mit Gleichungen als Ausgang

„Quantenmaterialien haben ihren Ursprung in dem zunächst zweckfreien Spiel mit Gleichungen der Quantenmechanik“, sagt Wolfgang Ernst: „Ihre experimentelle Umsetzung könnte uns den Weg ebnen zu neuen Anwendungen wie der Speicherung oder Verarbeitung von Quanteninformation, widerstandsfreien elektrischen Bauelementen und vielem mehr.“ Bis die neuen atomaren Nanocluster mit den erstaunlichen Eigenschaften für bestimmte Anwendungen nutzbar gemacht werden, werden wohl einige Jahre vergehen. Einstweilen gilt es, das Wissen um diese Materialien zu vertiefen. Das geschieht in internationalen Forschungsnetzwerken, an denen sich auch das Team um Wolfgang Ernst beteiligt.

### Forschungsschwerpunkte und internationale Kooperationen

Am Institut für Experimentalphysik der TU Graz werden inhaltlich zwei Schwerpunkte verfolgt:

1. Die Herstellung gezielter Nanoclusterstrukturen in supraflüssigen Heliumtröpfchen. Um die unregelmäßige thermische Bewegung der Atome zu unterbinden, werden bei tiefsten Temperaturen (0,4 Kelvin) aus einzelnen Atomen und Molekülen neue kalte Aggregate erzeugt und diese mit massen- und laserspektroskopischen Verfahren analysiert. Den Grazern gelang auf diese Weise die gezielte Bildung eines Core-Shell-Nanomaterials, bei dem ein Kern aus Goldatomen mit Silberatomen ummantelt wurde oder umgekehrt. In Kooperation mit dem Institut für Elektronenmikroskopie und Nanoanalytik (FELMI-ZFE) werden die neu erzeugten Strukturen mit atomarer Auflösung sichtbar gemacht (Abbildung 1). >

*several hundred atoms, which should bring about an especially high magnetic moment,” says Wolfgang Ernst, head of the Institute of Experimental Physics at Graz University of Technology.*

### Playing around with equations out of curiosity

*“Quantum materials have their origin in playing around with equations of quantum mechanics without a specific aim,” explains Wolfgang Ernst. “Their experimental implementation could pave the way to new applications, such as storing or processing quantum information, resistanceless electrical components, and many more.” But it may take a few years before new atomic clusters with astonishing properties can be turned into use for specific applications. In the meantime it is necessary to deepen our knowledge about these materials. This is done in international research networks in which the team around Wolfgang Ernst is participating.*

### Research goals and international cooperations

*At the Institute of Experimental Physics of Graz University of Technology, two topics are pursued in this area:*

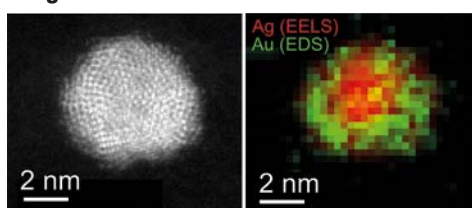
*1. The production of tailored nanocluster structures in superfluid helium droplets. In order to reduce the internal thermal motion of the atoms, new cold aggregates are created at extremely cold temperatures (0.4 Kelvin) from single atoms and molecules and analysed using mass and laser spectroscopic methods. In this way, the Graz scientists have successfully managed the controlled formation of a core-shell nanomaterial with a core of gold atoms covered by a silver atom layer – and vice versa. In cooperation with the Institute of Electron Microscopy and Nanoanalysis (FELMI-ZFE), the newly created structures were imaged with atomic resolution (Figure 1). >*

### Abbildung 1:

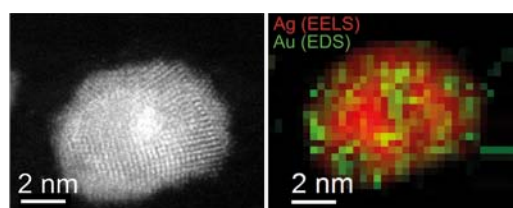
**Elektronenmikroskopieaufnahmen (FELMI-ZFE) speziell zusammengesetzter Nanocluster, Ausmaße ca. 5 nm: links die atomare Gitterstruktur und elementspezifische Markierung eines Single-Core-Clusters (innen Silber, außen Gold); rechts ein Dual-Core-Cluster (zwei Silberzentren, Gold außen und als „Trennwand“).**

**Figure 1:**  
*Electron microscopy images (FELMI-ZFE) of specially composed nanoclusters of approximately 5 nm size. Left: the atomic lattice structure and element-specific labeling for a “single core” cluster (silver inside, gold layer outside). Right: a “dual core cluster with two interior core areas of silver and an exterior shell and internal “separating wall” of gold.*

### Single core



### Dual core



© FELMI-ZFE

2. Das Institut für Experimentalphysik ist ein beliebter internationaler Forschungspartner, wenn es um die Messung der Oberflächeneigenschaften von topologischen Isolatoren geht. In diesem Forschungszweig kooperiert das Team um Wolfgang Ernst schon seit geraumer Zeit mit Giorgio Benedek an der Universität Milano-Bicocca im Rahmen des Universitätennetzwerks „Physics and Chemistry of Advanced Materials“ sowie mit Salvador Miret-Artés vom Institut für Mathematik und Fundamentalphysik des spanischen Wissenschafts- und Forschungsrates.

2. The Institute of Experimental Physics is a popular international research partner when it comes to measuring surface properties of topological insulators (TI). In this branch of research, Wolfgang Ernst's team has been cooperating for some time with Giorgio Benedek at the University of Milano-Bicocca in the framework of the Physics and Chemistry of Advanced Materials university network and with Salvador Miret-Artés from the Institute of Mathematics and Fundamental Physics of the Spanish Science and Research Council.

Neu vereinbart wurde im Frühjahr 2015 auch eine Kooperation mit dem Max-Planck-Institut für chemische Physik fester Stoffe in Dresden, das unter der Leitung von Claudia Felser eine der führenden Einrichtungen für die Herstellung neuer Quantenmaterialien ist. „Die Methode der Heliumatomstreuung erlaubt die gezielte Anregung von Oberflächenschwingungen und die gleichzeitige Vermessung der Elektronenladungsverteilung an der Oberfläche, eignet sich also besonders für die Untersuchung der für TI-Oberflächen charakteristischen Merkmale“, sagt Wolfgang Ernst. In Graz kann die Energie der Gitterschwingungen (Phononen) oberflächenspezifisch gemessen werden, und daraus wiederum können Aussagen über Kopplungsmechanismen zwischen Elektronen und Phononen in den neuartigen Quantenmaterialien getätigt werden.

A new cooperation agreement was signed in 2015 with the Max Planck Institute for Chemical Physics of Solids which, headed by Claudia Felser, is one of the leading institutions for the production of new quantum materials. „The method of helium atom scattering allows the specific excitation of surface vibrations and the simultaneous measurement of the electron charge distribution at the surface. It is thus particularly suitable for investigating the characteristic features of TI surfaces,“ continues Ernst. In Graz, the energy of lattice vibrations (phonons) can be measured highly surface specific, and from this, conclusions can be drawn about coupling mechanisms between electrons and phonons in the novel quantum materials.

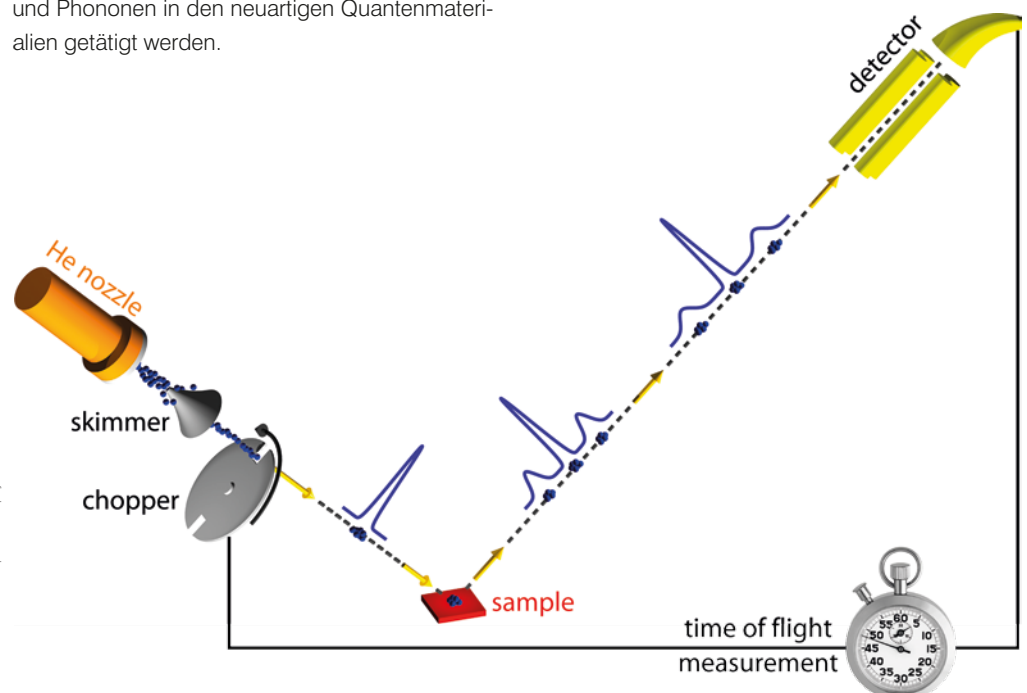
**Abbildung 2:**

Ein kurzer Puls von Heliumatomen aus einer Düse tastet die Oberfläche des interessierenden Materials ab. An die Oberfläche abgegebene oder von ihr aufgenommene Energiequanten manifestieren sich in der Geschwindigkeitsverteilung der reflektierten Heliumatome und werden in einer Flugzeitmessung sichtbar.

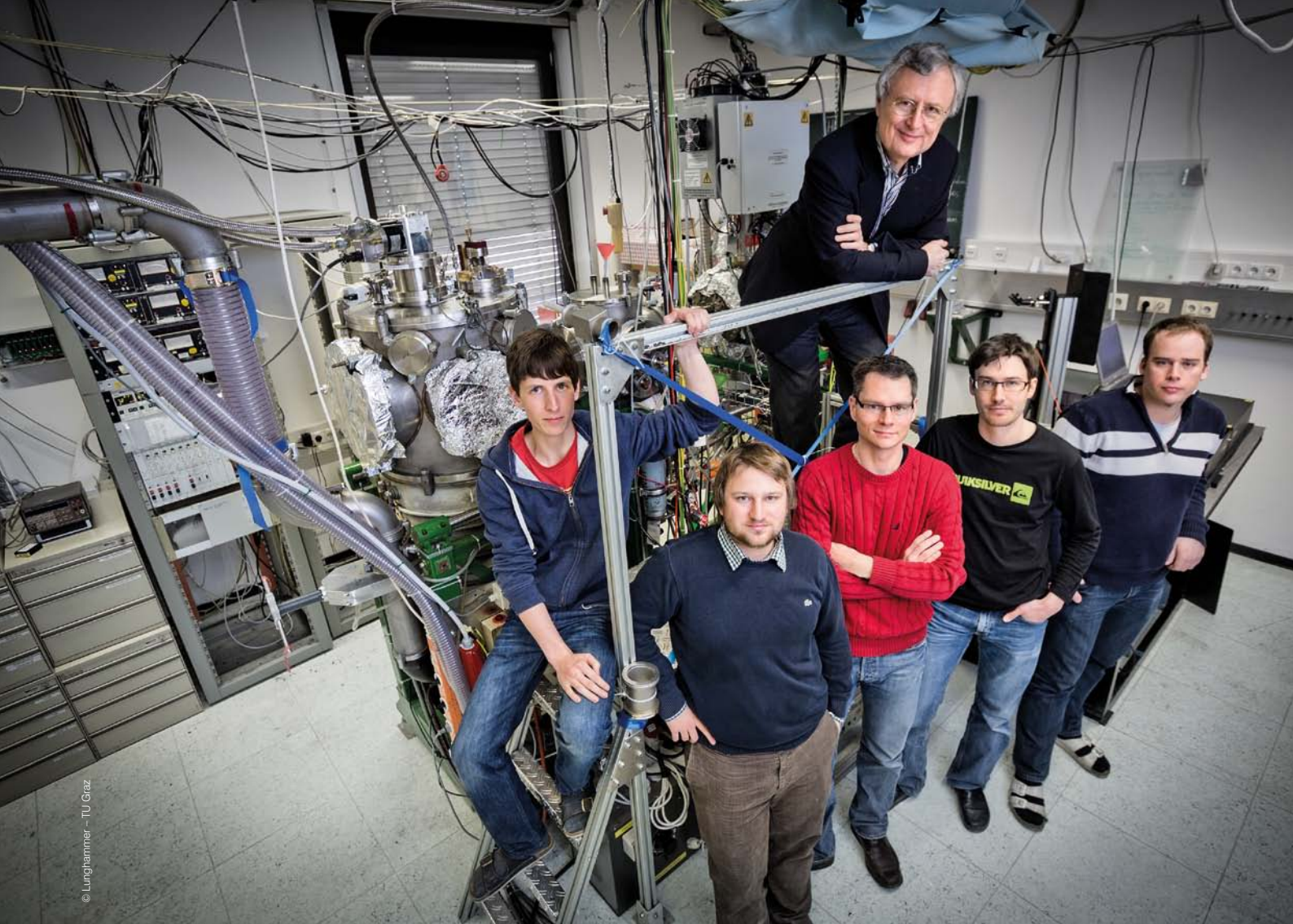
**Figure 2:**

A short pulse of helium atoms from a nozzle scans the surface of the material to be examined. Energy quanta emitted or absorbed at the surface manifest in the speed distribution of the reflected helium atoms and can be visualized in a time-of-flight measurement.

© Institut für Experimentalphysik







© Lungenhammer – TU Graz

### Zukunftsmusik Anwendungen

In welcher Weise die physikalischen Erkenntnisse eines Tages ihre Umsetzung erfahren, ist noch nicht abzuschätzen. Eines der großen Anwendungsthemen der modernen physikalischen Forschung ist der Quantencomputer, durch den man hofft, die Informationsverarbeitung zu revolutionieren. Oftmals ist die praktische Umsetzung physikalischer Erkenntnisse nicht genau voraussehbar, meint Ernst und verweist zum Beispiel auf die Suche nach immer besseren Zeitnormalen, einer Zeitmessung höchster Präzision, der wir als direkte Folge unser heutiges GPS-Ortungssystem verdanken. In diesem Sinn wird man vielleicht erst in 20 Jahren sehen, welche praktischen Anwendungen die Quantenmaterialien finden werden.

Die Arbeiten wurden vom Land Steiermark und der EU im Rahmen eines EFRE Projekts gefördert. ■

### Applications envisaged for the future

*One of the big application topics of modern physics research is the quantum computer, which is hoped to revolutionise information processing. Wolfgang Ernst thinks that the practical implementation of fundamental physics research is often not accurately predictable and he refers to the example of the search for increasingly better time standards – a measurement of time of the highest precision – something to which we owe as a direct result the GPS positioning system. With this in mind, it may perhaps take another 20 years before we will be able to see all the practical applications of quantum materials.*

*The research was supported by the Province of Styria and the European Union within an ERDF project. ■*

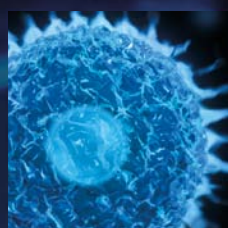
**Abbildung 3:**  
**Die Forschergruppe des Instituts für Experimentalphysik an ihrer Clustermaschine.**

**Figure 3:**  
**The group of researchers at the Institute of Experimental Physics with their cluster machine.**

**Film zum Thema/See also the movie on APS-TV:**

[http://www.websedge.com/videos/aps\\_tv\\_2015/#/advancing\\_materials\\_research](http://www.websedge.com/videos/aps_tv_2015/#/advancing_materials_research)





Advanced  
Materials Science



Human &  
Biotechnology



Information,  
Communication &  
Computing

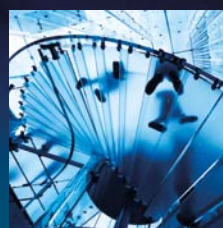
## FOE

Fields of  
Expertise

Mobility & Production



Sustainable Systems



Bilder: © istockphoto.com

Die fünf Fields of Expertise sind Kompetenzbereiche, die zu einzigartigen Markenzeichen der TU Graz im 21. Jahrhundert werden sollen. Gestärkt werden die Fields of Expertise durch thematisch neue Professuren und Investitionen sowie intensive Zusammenarbeit mit Industrie und Wirtschaft in Form von zahlreichen gemeinsamen Beteiligungen an wissenschaftlichen Kompetenzzentren und Forschungsnetzwerken. Kooperationen mit wissenschaftlichen Partnereinrichtungen wirken als weiterer Motor zum Erfolg.

*Five Fields of Expertise will become distinctive hallmarks of Graz University of Technology in the 21<sup>st</sup> century. They will be strengthened by new professorships in new areas and investments as well as intensive co-operation with business and industry in the form of numerous shared participations in competence centres and research networks. Cooperations with scientific partner institutes represent a further dynamo to success.*