

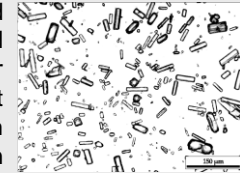


## Masterarbeit: Simulation des Kristallbruchs in Filterkuchen

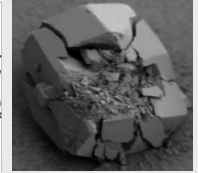
Die selektive Kristallisation von Proteinen als kombinierter Aufarbeitungs- und Formulierungsschritt stellt eine mögliche Alternative zu einem kosten- und ressourcenintensiven Chromatographieschritt im Downstream Processing dar. Neben der Herausforderung das Protein selektiv in der gewünschten Form und Größe zu kristallisieren, ist ein weiterer wichtiger Aspekt die mechanische Stabilität der Kristalle. Diese sind im Vergleich zu konventionellen Kristallen deutlich empfindlicher und können bereits bei geringen Drücken brechen. Bereits Filtrationsdrücke von wenigen bar führen für manche Kristallsysteme bereits zum Bruch, was die nachgelagerte Fest-Flüssig-Trennung deutlich erschwert. Daher ist das Bruchverhalten der Kristalle in einem Haufwerk (Filterkuchen) von besonderem Interesse. An stäbchenförmigen Lysozymkristallen erfolgte bereits die Charakterisierung des Bruchverhaltens an Einzelkristallen mit einem Nanoindenter. Ziel ist es nun anhand dieser Kennwerte in Kombination mit Kristallgrößenverteilungen realer stäbchenförmiger Lysozymkristalle das Bruchverhalten in einem Haufwerk mit der Diskreten Elemente Methode (DEM) zu simulieren.

Folgende Aufgaben stehen im Fokus:

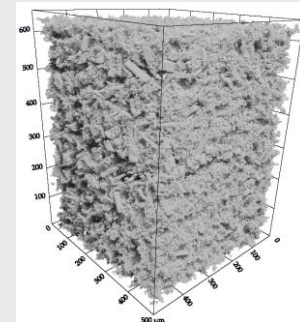
- Implementierung des Bruchverhaltens von Proteinkristallen in die DEM Software Rocky
- Aufbau der Simulationsumgebung: Partikelschüttung mit korrekter Größenverteilung, Partikelform und Porosität
- Kompression des Filterkuchens zwischen zwei Ebenen mittels externer Belastung
- Auswertung der Simulationen hinsichtlich des Bruchs von Kristallen



Proteinkristalle



Kristallbruch



µCT-Scan eines Filterkuchens

Wir können jederzeit ein persönliches Gespräch vereinbaren und dieses, oder weitere Themen unverbindlich besprechen.

**Beginn:**

**Nach Absprache**

**Kontakt:**

Marcel Schrader, M.Sc.