

1. Raziskovalna organizacija (*Research organisation*):

Univerza v Ljubljani, *Fakulteta za kemijo in kemijsko tehnologijo*

2. Ime in priimek mentorja (*Name and surname of a mentor*):

Igor Plazl

3. Področje znanosti iz šifranta ARRS (*Primary research field*):

2.02 Kemijsko inženirstvo (Chemical engineering)

4. Kontaktni e-naslov mentorja (*Contact of a mentor*):

igor.plazl@fkkt.uni-lj.si

5. Kratek opis programa usposabljanja (*Short description of the program*):

SLO

V zadnjem obdobju se pojavlja veliko znanstvenih prispevkov na temo prednosti mikrofluidne tehnologije in nanofluidne tehnologije. Novi koncepti kot so kontinuirno vodenje procesov, pretočna kemija, intenzifikacija procesov itd., so postali globalni trendi pri načrtovanju in razvoju novih okolju prijaznih tehnologij. Nadzirani in ponovljivi procesni pogoji na nano/mikro nivoju pa zaradi svojih specifičnih lastnosti pogosto zahtevajo tudi nižje nivoje modeliranja od makroskopskega. Poleg globljega razumevanja procesnih mehanizmov, je potrebno razviti nove pristope, tehnike in programska orodja, ki bodo omogočali učinkovit in natančen opis dogajanja v nano/mikro sistemih. Tako načrtovane in optimizirane mikro procesne enote v integriranem sistemu mikrosistemske tehnologije, je potrebno potem prenesti iz »laboratorija na čipu« v realno industrijsko okolje. Čeprav ne obstaja splošna rešitev za množico različnih procesov, pa obstaja splošen pristop na osnovi konceptov povečevalnih kriterijev: »scale-up/scale-out/numbering-up«, ki skupaj z uporabo validiranih modelnih napovedi in s pomočjo uporabe novega koncepta »procesnih oken«, omogočajo hiter in učinkovit prehod v realno industrijsko okolje.

Raziskovalno delo doktorskega kandidata bo vključevalo študije in razvoj kemijskih in biokemijskih procesov na mikro nivoju z upoštevanjem koncepta specifičnih povečevalnih kriterijev in optimizacije na osnovi modeliranja. Teoretični opis transportnih pojavov in kinetike na mikro nivoju bo zajemal razvoj koncepta in uporabo večnivojskega modeliranja ("multiscale modeling"). Večnivojsko modeliranje združuje obstoječe in nove numerične metode in pristope modeliranja različnih, predvsem (bio)katalitskih procesov z namenom premostiti široka območja na časovni in krajevno dimenzijski skali., ki jih povezujejo številni procesi različnih znanstvenih disciplin ov v znanosti in inženiringa materialov. Večnivojsko modeliranje lahko torej ključno prispeva k učinkovitemu razvoju in optimizaciji mikroreaktorske tehnologije kemijskih in biokemijskih procesov z molekularnega in mikro nivoja [1].

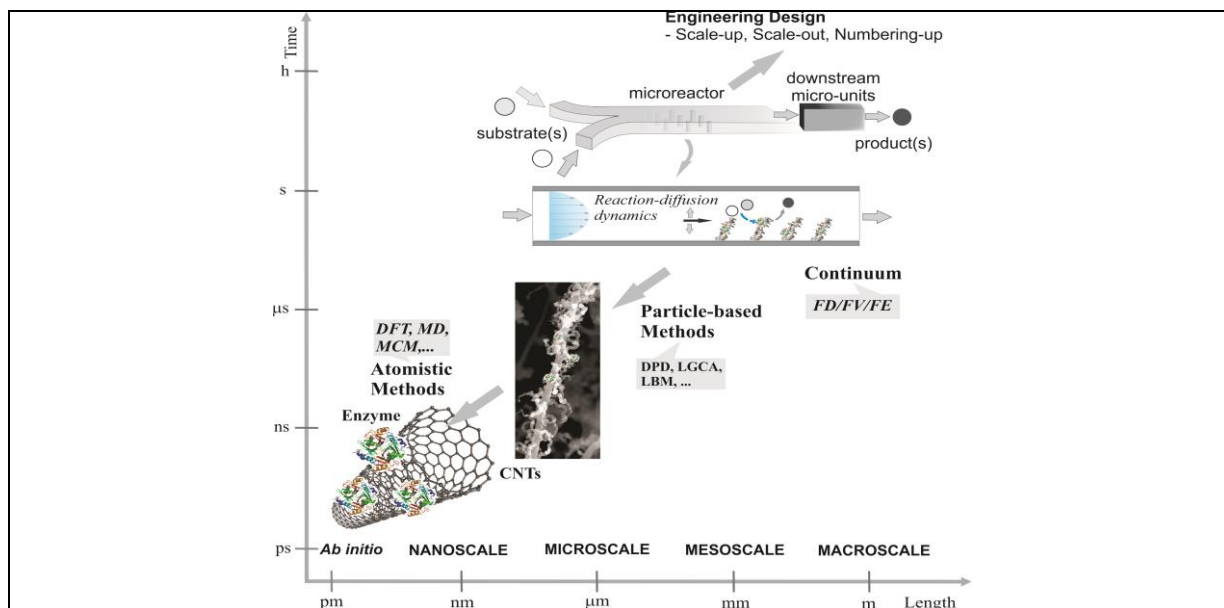


Figure 1. Koncept večnivojskega modeliranja [1].

Reference:

1. Wohlgemuth, R., Plazl, I., Žnidaršič-Plazl, P., Gernaey, K.V. and Woodley, J. M. Microscale Technology and Biocatalytic Processes – Opportunities and Challenges for Synthesis, *Trends Biotechnol.*, **2015**, 33: 302-314.

ANG

Numerous excellent publications in the last two decades demonstrated the advantages of microfluidic devices for very efficient performing of chemical and biochemical processes at controlled and repeatable conditions. New concepts such as continuous processing, flow chemistry, high-throughput screening, and process intensification, have been established in order to open novel pathways in process design and engineering. Besides, a number of highly innovative and systematic approaches, protocols, tools, and strategies has currently being developed in both industry and academia, all to minimize the gap between research and industry, and to define a smooth transfer of (bio)chemical processes to the industrial environment. To meet these challenges, we must advance the field from (bio)catalyst discovery to (bio)catalytic microprocess design. This will require not only a new level of understanding of reaction mechanisms and transport phenomena at the micro scale, but also the development of relevant computational tools [1].

The research work of doctoral candidate will include the studies and the development of microscale bioprocess based on scale-up/scale-out/numbering-up concept in combination with modeling-based optimization. Theoretical description of transport phenomena and the kinetics at the micro scale will be discussed together with the presentation of multiscale modeling concept. Multiscale modeling combines existing and emerging methods from diverse scientific disciplines to bridge the wide range of time and length scales that are inherent in a number of essential phenomena and processes in materials science and engineering. Multiscale modeling may help to design and optimize microsystems technology for chemical and biochemical processes from a microscopic point of view [1].

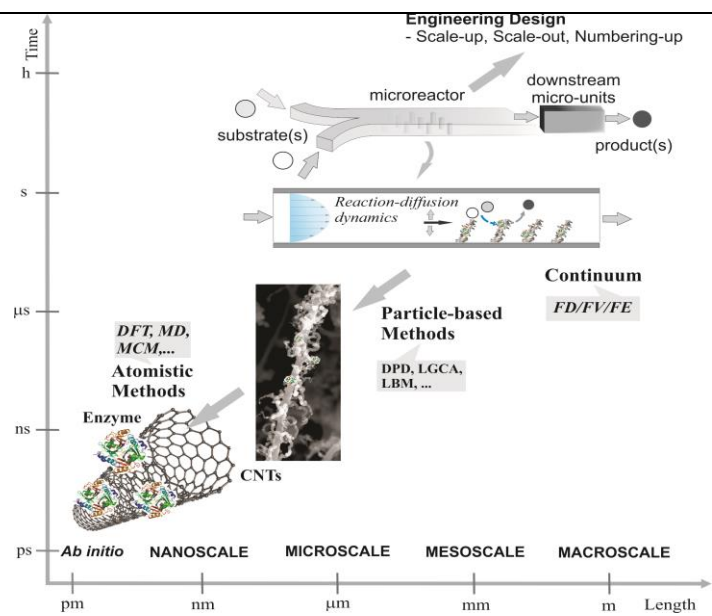


Figure 2. Multiscale modeling approach [1].

References:

1. Wohlgemuth, R., Plazl, I., Žnidaršič-Plazl, P., Gernaey, K.V. and Woodley, J. M. Microscale Technology and Biocatalytic Processes – Opportunities and Challenges for Synthesis, *Trends Biotechnol.*, 2015, 33: 302-314.