

Gehonoreerde projecten **Chemical Conversion, Process Technology & Synthesis**

Multi-scale Chemical Imaging of Multi-component Catalyst Materials: New Opportunities to Understand Catalytic Activity and Related Deactivation Phenomena of Ziegler-Natta Catalysts
B.M. Weckhuysen / Universiteit Utrecht

Bij de industriële productie van polymeerketens worden katalysatoren van het type Ziegler-Natta gebruikt, waarvan de werking nog niet goed begrepen is. Wij willen in dit onderzoeksproject de meest recente en krachtige methodes uit de levens- en materiaalwetenschappen gebruiken om inzicht te verwerven in de structuur en werking van Ziegler-Natta katalysatoren.

Electrochemical, catalytic and process engineering aspects of gas-forming electrolysis
M. Koper / Unilever

Elektrochemische processen krijgen hernieuwde aandacht vanuit de chemische industrie, gezien duurzame opwekking van elektriciteit toeneemt en tot (periodieke) daling van de stroomprijs leidt. Opslag en gebruik van duurzame elektriciteit is niet alleen essentieel is voor balans in het elektriciteit netwerk, maar biedt ook nieuwe kansen voor economisch rendabele elektron gedreven chemische processen. De onderzoeksgroepen van Marc Koper (U Leiden) en Guido Mul en Detlef Lohse (U Twente) gaan samenwerken met Akzo Nobel, Shell, Magneto Special Anodes en Elson technology om de efficiëntie, selectiviteit en duurzaamheid van elektrochemische processen te verbeteren, met focus op processen waarbij gassen zoals waterstof, zuurstof en chloor worden gevormd.

SynCat at DIFFER: Electricity to Chemistry, Catalysis for Energy Storage
M.C.M. van de Sanden / FOM Instituut DIFFER

Door de snelle groei van 'groene' elektriciteitsproductie ontstaat er behoefte om chemische processen te ontwikkelen die gebruikmaken van elektriciteit in plaats van fossiele grondstoffen. Bijvoorbeeld in de opslag van de tijdelijke stroomoverschotten inherent aan fluctuerende energiebronnen zoals windturbines en zonnepanelen, in de vorm van zonnebrandstof. Dit proces om van stroom, water en CO₂ benzine te maken is gebaseerd op elektrochemie of plasma-chemie in combinatie met katalyse, omdat bij elke stap een goede katalysator onontbeerlijk is. Optimalisatie van katalysatormaterialen vraagt gedetailleerd begrip van oppervlakteprocessen die een rol spelen. Het Nederlands instituut voor fundamenteel energieonderzoek DIFFER, de afdeling toegepaste natuurkunde van de Technische Universiteit Eindhoven en het onderzoekbedrijf Syngaschem BV bundelen hun krachten op het gebied van elektrochemie, katalyse, oppervlakte reacties, spectroscopie en plasmafysica om groene stroom efficiënt om te kunnen zetten in vloeibare koolwaterstofmengsels met een hoge energiedichtheid.

Chemistry of Light-induced degradation - A feasibility study

M.R. van Bommel / UvA

Heel veel chemische verbindingen zijn gevoelig voor licht. Dit kan een voordeel zijn, bijvoorbeeld als (UV) licht gebruikt kan worden voor waterzuivering. In veel gevallen is het een nadeel. Voedsel, zoals groente, verliest zijn kleur onder invloed van licht en vitamines kunnen verdwijnen. Kleurstoffen die zijn gebruikt bij het vervaardigen van kunstobjecten kunnen letterlijk verbleken, waardoor de esthetische waarde grotendeels verloren kan gaan. In dit COLD project wordt een apparaat gebouwd waarmee het mogelijk is om heel snel en heel efficiënt de invloed van licht te kunnen bestuderen in veel verschillende situaties. Met dergelijke apparatuur kunnen we bijvoorbeeld onderzoeken welke stoffen stabiel zijn, welke (mogelijk giftige) verbindingen worden gevormd.

Metal Initiators for Controlled Emulsion Polymerization

B.J. Deelman / Universiteit Utrecht

Radikaalpolymerisatie is een veel toegepaste methode om belangrijke kunststoffen, harsen en andere hoog moleculaire stoffen te produceren. De sturing van deze reactie en daardoor de controle over de materiaaleigenschappen van het product laat echter in veel gevallen nog te wensen over. Dit heeft te maken met de hoge reactiviteit van de groeiende polymeerketen die resulteert in ongewenste terminatiereacties. In dit project wordt getracht met metaalverbindingen de groeiende polymeerketens te stabiliseren zodanig dat terminatiereactie geen kans krijgen en er nauwkeurige controle over het molecuulgewicht mogelijk wordt. De beoogde goede controle van het polymerisatieproces maakt het mogelijk om nieuwe materialen met betere eigenschappen te maken.

Modeling Ion Diffusion during Preparation to Improve Catalyst Selectivity

M. Louwerse / Universiteit Utrecht

Industriële katalysatoren verbeteren door middel van fundamentele modellen
De Universiteit Utrecht en Inovyn gaan samenwerken om mogelijk de bereiding van een industriële katalysator te verbeteren door gebruik van fundamentele modellen op atomaire schaal. Vinylchloride monomeer (VCM), de grondstof voor polyvinylchloride (PVC), wordt onder andere geproduceerd door oxychlorinatie van etheen. Deze reactie wordt gekatalyseerd door koperchloride en heeft een hoge selectiviteit. Toch is een nog hogere selectiviteit een belangrijk doel van onderzoek aan deze reactie, vanwege de enorme omvang van de wereldwijde PVC productie. Dit project is gebaseerd op een idee om deze selectiviteit te verbeteren door een specifieke verandering van de nanoscopische structuur van de katalysator, die bereikt zou kunnen worden door de preparatie aan te passen. Door middel van fundamentele modellen op deze schaal zal de beweeglijkheid van de betreffende ionen bestudeerd worden onder verschillende omstandigheden. Met deze diepgaande kennis zal vervolgens een verbeterd recept voor de katalysator-preparatie worden opgesteld en tenslotte zal het effect op de selectiviteit getest worden in het industriële lab. De kennis die verworven wordt in dit project kan ook bijdragen aan het oplossen van andere technische aspecten van deze reactie. Bovendien is het concept om fundamentele modellen op atomaire schaal toe te passen op de subtiele processen tijdens de preparatie van katalysatoren en daarmee echte industriële katalysatoren te verbeteren van groot wetenschappelijk belang.

Towards Structure-Activity-Morphology Relationships in Ziegler-Natta Catalysis

B.M. Weckhuysen / Universiteit Utrecht

Ziegler-Natta katalysatoren worden wereldwijd gebruikt voor de productie van polyetheen. Het blijkt dat een ongewenste morfologie van het gevormde polyetheen poeder verkregen wordt wanneer deze katalysatormaterialen bewaard worden in aanwezigheid van vocht en warmte. Dit onderzoeksproject probeert met behulp van microscopische en spectroscopische technieken fundamenteel inzicht te verwerven in de verouderingschemie van Ziegler-Natta polymerisatiekatalysatoren.

New Insights in the Working Principles of tri-ethyl boron as co-catalyst in Cr/SiO₂ Phillips catalysis
B.M. Weckhuysen / Universiteit Utrecht

Phillips katalysatoren zijn erg belangrijk in de chemische industrie omdat ze gebruikt worden om plastics, zoals polyetheen, te maken. De eigenschappen van deze plastics worden niet enkel bepaald door de preciese samenstelling van de polymerisatiekatalysator, maar ook door de manier waarop de katalysatormaterialen geactiveerd worden. In dit onderzoeksproject wordt fundamenteel nieuw inzicht verworven hoe een boor-houdende component invloed heeft op oppervlakte chroom atomen, die de actieve fase van een Phillips-type katalysator vormen. Hiertoe worden een aantal geavanceerde karakteriseringstechnieken gebruikt, waaronder Röntgen microscopie.

Non-oxidative Coupling of Methane via Plasma Catalysis
L. Lefferts / UTwente

Plastics als polyetheen (plastic zakjes, en veel meer) maken uit goedkoop aardgas? De technologie is er maar is nogal omslachtig en duur omdat het met een omweg moet. Daarom is proces in een enkele stap lang gekoesterde wens maar ondanks alle pogingen werkt dat onvoldoende om een fabriek te kunnen bouwen. Dit project gaat de vraag beantwoorden of een combinatie van plasma chemie en katalyse een oplossing is.

Structure sensitivity of supported nickel catalysts for (de)hydrogenation of alkanes and alkenes
E.J.M. Hensen / TU Eindhoven

Katalysatoren zijn essentieel voor de chemische industrie, bijvoorbeeld om aardgas te verwaarden naar allerlei nuttige tussen- en eindproducten. Normaliter geldt dat hoe kleiner de deeltjes zijn, hoe groter hun oppervlak en hoe actiever ze zijn als katalysatoren. Echter, dergelijke deeltjes krijgen speciale eigenschappen als ze kleiner worden dan ongeveer 10 nanometer. Om beter katalysatoren te ontwikkelen voor de toekomst is het nodig om precies te begrijpen hoe het katalytische gedrag afhangt van de grootte van de nanodeeltjes.

A holistic catalysis and reaction engineering approach to methane dehydroaromatization into chemicals
E.J.M. Hensen / TU Eindhoven

Aardgas, de schoonste van fossiele brandstoffen, zal in de komende decennia een grote rol spelen in onze energievoorziening. Daarnaast is het belangrijk om uit aardgas op een economische wijze aromaten te maken. Dit project ontwikkelt optimale katalysatoren voor nieuwe reactorconcepten die de directe omzetting van aardgas in benzeen mogelijk moet maken.

Synthesis of catalytic metallic and bimetallic nanoparticles by cathodic corrosion
M. Koper / Universiteit Leiden

Nieuwe nanodeeltjes voor selectieve chemische reacties. De Universiteit Leiden en BASF Nederland gaan samenwerken om een nieuwe methode voor het maken van katalytische nanodeeltjes, zoals ontwikkeld aan de Universiteit Leiden, toe te passen voor selectieve chemische conversies die van belang zijn voor de business van BASF Nederland.

Bio-based rheology modifiers for coatings

J.H. van Esch / TU Delft

Organic rheology modifiers for solvent based coatings are superior to inorganic rheology modifiers with respect to coating production, application and appearance, and moreover, they have the advantage that they are biodegradable and can be produced from renewable resources. These organic rheology modifiers are made by a self-assembly process of organic molecules into organic fibrous dispersions, which involves the lengthy and energy-consuming thermal annealing of semi-crystalline powder into crystalline fibers, requiring narrow process conditions. This tedious fabrication process under stringent conditions severely limits adaptation to specific applications and customer requests, and also enforces centralized production of the fibrous dispersions to guarantee product quality. The objective of this project is to develop a new approach for a scalable and local production of fibrous dispersions as rheology modifier from biomass feedstock, while preserving the rheological profile of the product. We propose to formulate and produce organic powders with a glassy, amorphous state, by orthogonal self-assembly of partially incompatible components that are readily synthesized from biomass feedstock. Solvent assisted annealing of these multicomponent amorphous powders is expected to be a spontaneous process and will lead directly to interpenetrating networks of different fibrous assemblies, each formed from one of the components. The annealing of amorphous powder into crystalline fiber dispersions will be facilitated thermodynamically and kinetically, thus allowing for a faster, more robust, and more flexible production process. Moreover, the rheological performance of multicomponent fibrous dispersions surpasses those of single fibrous dispersions, while the multiple component nature offers greater freedom for formulation.

Innovation by Product and Process Design: For life sciences & health, energy conversion & storage, circular economy

P.J.L. Swinkels / TU Delft

Process design methodology and tools have been successfully applied to strengthen the innovation power and commercial success of the Dutch (bio)chemical process industries. Coupled with world-class research the combination of design and research can quickly lead to the most promising candidates that ultimately make it to a success. In that context, University two-year post-MSc PDEng programmes have been successful in educating and training top-level MSc graduates to top-designers for positions in companies, where they contribute in the key phases of process innovation, especially in the oil & gas, bulk and specialty chemicals and environmental processes. PDEng cooperation projects between University and industrial partners are a perfect way to use the latest knowledge in designing and developing novel products and processes, to recruit, train and educate (international) top talent and provide them with employment in the innovative sectors in Dutch industry. Design of products and the design of processes for the life sciences, health, energy conversion & storage and products has had less of attention. It is in these areas where product and process innovations and the innovation power of the Dutch industries can be further strengthened.

Smart design of emergency relief systems

C. van der Geld / TU Eindhoven

Het doel van het project is het modelvorming van complexe processen die kunnen voor doen bij polymerisatie reacties en in veiligheidssystemen voor de opslag van chemicaliën. Alleen met goede voorspellingen kunnen ongecontroleerde, zgn runaway, reacties worden voorkomen. Er zijn drie facetten die elk dermate complex zijn dat ze nader onderzoek behoeven. Het eerste is meervoudig choken, dat is sonisch worden, van stroming in leidingsystemen met meercomponent-systemen. Het tweede is het voorspellen van grensvlakvorming bij grote massatransporten tijdens runaway. Het derde is het omzetten van de fundamentele kennis vergaard in het eerstgenoemde facet in een concreet ontwerp van een veiligheidssysteem.

Ontwikkeling Elektrochemische Reiniging Waswater Rookgassen
S. van Loo / ECN

Als onderdeel van de nat-chemische reiniging van rookgassen, worden rookgassen door een gaswasser geleid. Zure componenten worden uit de rookgassen gewassen, en het zure waswater wordt geneutraliseerd met sterk alkalische grondstoffen. Het hierbij gevormde residu bestaat uit een filterkoek dat voornamelijk uit gips bestaat en dat zwaar verontreinigd is. Deze filterkoek wordt in Nederland gestort. Het overgebleven behandelde water bevat veel zout en mag niet worden niet geloosd. In nauwe samenwerking tussen een kennisinstituut en industrie wordt een innovatief membraanelektrolyse (ME) proces ontwikkeld waarmee het mogelijk wordt om zoutzuur (HCl) uit zout indampwater terug te winnen en daarnaast het verbruik van alkalische grondstoffen sterk terug te dringen.

Catalytic pyrolysis of methane to ethylene and aromatics
L. Lefferts / Utwente

We kennen allemaal aardgas als energie bron. Maar aardgas kan ook worden gebruikt om chemicaliën en uiteindelijk b.v. kunststoffen te maken, met veel meer waarde. De bestaande methoden zijn relatief ingewikkelde en duur. Wij gaan een katalytische methode onderzoeken om dit in een enkele stap voor elkaar te krijgen.

Metal Organic Framework catalysts for the gas phase direct synthesis of Methanol from Methane
J. Gascon / TU Delft

Essence of the project: Katalysatoren versnellen chemische reacties. De onderzoekers gaan een nieuwe generatie van synthetische katalysatoren ontwikkelen die methaan direct kunnen omzetten in vloeibaar methanol, waardoor natuurlijke hulpbronnen efficiënt gebruikt worden om brandstoffen en chemicaliën te produceren. Enzymen, de meest uitgelezen katalysatoren, zijn de inspiratiebron.

Photography inspired activation of natural gas
G. Mul / UTwente

Dit voorstel onderzoekt of het mogelijk is door toepassing van een metaal halide (chloride of bromide) en licht, methaan te activeren tot een methyl halide, waarbij een klein metaal deeltje onstaat. Met bestaande technologie kan de methyl halide worden gekoppeld tot halogeen vrije grotere moleculen waarbij broomzuur of zoutzuur het bijproduct is. De onderzoekers anticiperen dat dit broomzuur of zoutzuur het metaaldeeltje kan omzetten in metaal halide, en zo de katalytische cyclus kan sluiten.

Bridging the pressure and materials gaps in methanol steam reforming
I.M.N. Groot / Universiteit Leiden

Toepassing van brandstofcellen als aandrijving voor auto's blijft lastig wanneer de brandstof een zeer explosief gas is, nl. H₂. Wij onderzoeken daarom hoe H₂ aan boord van de auto kan worden geproduceerd uit de vloeistof methanol, CH₃OH. Middels hoge- en lagedruk experimenten aan verschillende typen modelkatalysatoren onderzoeken wij hoe de structuur van Cu en Pd-gebaseerde katalysatoren de productie van CO-vrij waterstof uit methanol bepaalt.

Promoter and poison effects in heterogeneous catalysis: Novel tools to shed fundamental insight
I.M.N. Groot / Universiteit Leiden

Many characterization techniques used in catalytic studies cannot perform at the conditions of the chemical industry (i.e. high pressures and temperatures). Hence, new technologies need to be developed to study the structure-activity relationship of heterogeneous catalysts under these conditions. We will develop two novel technologies. One is the development of operando scanning probe microscopy integrated with a flow reactor. To overcome the major drawback of limitation to either STM or AFM, we will develop an instrument in which both techniques can be used simultaneously, thereby combining the structural information of AFM with the electronic structure information of STM. In addition to obtaining structural information of the catalyst surface, chemical information about all species present at the surface is very valuable. Vibrational techniques as infrared and Raman spectroscopy are able to do this. However, their resolution is currently limited to the (sub)micrometer scale whereas STM and AFM give topological information on the nanoscale. Therefore, we will develop infrared and Raman spectroscopy able to provide chemical information on the nanoscale under industrial conditions. The industrially relevant reaction we will investigate is Fischer-Tropsch synthesis, i.e. the production of hydrocarbons from hydrogen and carbon monoxide, thereby creating clean transportation fuels. The interaction between the catalyst surface and the reactants plays a crucial role in the local morphology and chemical composition of the catalyst, which is relevant for its activity, selectivity, and stability. Being able to follow how the reactants influence the morphology and chemical composition allows for catalyst improvement by rational design.

Stofoverdracht in waterelektrolyse
Deen / TU Eindhoven

Waterstof gemaakt uit groene elektriciteit is een veelbelovende energiedrager. Dit voorstel betreft een uitbreiding van een project dat onlangs is gestart: Alkaliflex. Alkaliflex heeft tot doel de flexibiliteit en productiviteit van bestaande alkalische waterelektrolyse in kaart te brengen en te komen met voorstellen tot verbetering. Deze verbetering is nodig om de kosten van groene productie van waterstof (momenteel ongeveer 3 euro/kg) concurrerend te maken met die van het grijze alternatief (stoomreforming, ongeveer 1.5 euro/kg). In Alkaliflex zullen zogenaamde CFD (computational fluid dynamics) simulaties van stofoverdracht in verschillende onderdelen van het industriële proces worden uitgevoerd. Een zeer belangrijk onderdeel van deze simulaties is de modellering van de vorming van waterstof bellen aan de elektrodes. De modellering van dit onderdeel is verre van triviaal en het is de verwachting dat de uitkomst van de CFD simulaties in Alkaliflex zullen afhangen van de keuze van de CFD methode en/of het CFD pakket. Een doel van dit parallelle voorstel is om m.b.t. de waterstofoverdracht van de elektrode naar de bellen verschillende CFD methodes en pakketten met elkaar te vergelijken en zo tot een betere wetenschappelijk onderbouwing te komen van de simulaties die in Alkaliflex zullen worden uitgevoerd.

Aromaten uit garnalen doppen

R.J.W.M. Deuss / RUG

Aromaten uit garnalen doppen

Met het oog op een duurzame chemische industrie moet deze switchen van fossiele grondstoffen naar hernieuwbare. In dit opzicht zijn vele plantaardige en dierlijke grondstoffen zeer interessant, zeker als dit afvalstromen betreft van de voedsel sector die zelf geen waarde hebben als voedsel of voer. Het omzetten van dit soort grondstoffen naar hoogwaardige chemische producten is daarom ook een van de speerpunten richting een biobased economie. In dit project werken de Universiteit Groningen en Bedrijf X samen aan de productie van chemicaliën uit rest afval van de visindustrie. Hier zijn grote hoeveelheden chitine in de vorm van garnalen doppen beschikbaar. Chemisch gezien is chitine een zeer interessant biopolymeer. Het bestaat uit een stikstofhoudend monomeer N-acetylglucosamine, een stikstofhoudend koolhydraat. Chitine kan daardoor gebruikt worden voor traditionele koolhydraat dehydratatie naar populaire biobased chemicals zoals 5-hydroxymethylfurfural (HMF) of levulinezuur (LA). Recent is ook de productie van stikstofhoudende derivaten zoals 3-acetamido-5-acetylfuran (3A5AF) beschreven, wat interessant is als platform chemical voor een stikstofhoudende hernieuwbare chemische producten. Recent zijn in de chemische literatuur een aantal manieren beschreven om vanuit furanen als HMF (en dus effectief vanuit biomassa via cellulose) C6-aromaten te synthetiseren. Ook stikstofhoudende C6-aromaten zoals aniline zijn een erg belangrijke grondstof voor veel chemische producten en daarom is een route vanuit hernieuwbare grondstoffen naar dit soort producten erg gewild. Het hoofddoel van dit project is dan ook het ontwikkelen van een chemische route van chitine naar C6-aromaten via 3A5AF waarbij de unieke stikstof-functionaliteit in dit koolhydraat behouden blijft in het eindproduct.

Noble-metal/zeolite bifunctional catalysts with ultra-low metal loading

K.P. de Jong / Universiteit Utrecht

Edelmetalen zijn zeer schaars maar spelen een cruciale rol in moderne technologie zoals elektronica en katalysatoren. Het ontwerpen van katalysatoren met precisie op de schaal van nanometers geeft nieuwe mogelijkheden om met minder edelmetaal toch effectieve katalysatoren te maken.

New insights in the working principles of tri-ethyl boron as co-catalyst in Cr/SiO₂ Phillips catalysis

B.M. Weckhuysen / Universiteit Utrecht

Phillips katalysatoren zijn erg belangrijk in de chemische industrie voor het maken van heel wat plastics, zoals polyetheen. De eigenschappen van plastics en de manier waarop de katalysator, die polymeren maakt, werkt worden niet enkel bepaald door de chemische samenstelling en structuur van de katalysator, maar ook door de manier waarop deze geactiveerd wordt. Het doel van dit onderzoeksproject is om nieuwe fundamentele inzichten te verwerven over de invloed van boorhoudende co-katalysatoren als activator op de actieve fase van de Phillips-type katalysator met behulp van geavanceerde spectroscopische en microscopische technieken. Vervolgens is het van belang om deze bevindingen te koppelen aan fysische eigenschappen, zoals katalysator activiteit en de inductie-periode. Hierdoor ontstaat een beter begrip van het mechanisme van Phillips-type katalysatoren verkregen kan worden. Mogelijkerwijs kunnen deze fundamentele inzichten resulteren in nieuwe, efficiëntere, methodes van katalysator activatie alsook in (nieuwe) routes naar nieuwe polyetheen materialen.