



Algemene Beleids- en Bestuurszaken
Aanvraagformulier Casimir 2005 ABB
Casimir 2005 ABB Application Form

Aanvraagnummer/application number: 018.001.008

1. Aanvrager(s)/applicant(s)

a. *Hoofdaanvrager/contactpersoon/main applicant/contact person*

volledige naam/name: Dr. ir. E.J.M. Hensen

organisatie/organisation: Technische Universiteit Eindhoven
Faculteit Scheikundige Technologie
Katalyse
Den Dolech 2
5612 AZ EINDHOVEN

telefoon/telephone:
040-247 51 78

fax:

e-mail:
e.j.m.hensen@tue.nl

b. *Overige aanvragers/co-applicants*

volledige naam/name

organisatie/organisation

Prof. dr. R.A. van Santen

Technische Universiteit Eindhoven
Faculteit Scheikundige Technologie
Anorganische Chemie

2. Titel/Title

Innovaties in hydrocracking processen voor het opwerken van zware aardoliefracties naar schone brandstoffen

3. Samenvatting/Abstract

In olieraffinaderijen zijn doorbraken nodig om de zwaarste aardoliefracties om te zetten in schone, waardevolle transportbrandstoffen middels hydrocracking. Binnen deze Casimir-samenwerking zullen nieuwe kraakkatalysatoren en procesconcepten ontwikkeld worden om tot een geïntegreerde innovatie te komen.

Contactgegevens aanvragers

1. Vertegenwoordiger kennisinstelling

Prof. Dr. R.A. van Santen

Man

Hoogleraar

Technische Universiteit Eindhoven

Postbus 513

5600 MB Eindhoven

Tel.: 040-2472730

Fax: 040-2455054

E-mail: r.a.v.santen@tue.nl

Website: www.catalysis.nl

2. Vertegenwoordiger bedrijf

Prof. Dr. J.A.R. van Veen

Man

Senior Research Scientist

Shell Global Solutions International B.V.

Badhuisweg 3

6031 CM Amsterdam

Tel.: 020-630-3831

Fax: 020-630-3110

E-mail: Rob.vanVeen@Shell.com

3. Casimir-kandidaat

Dr. Ir. E.J.M. Emiel Hensen

Man

Universitair docent

Technische Universiteit Eindhoven

Postbus 513

5600 MB Eindhoven

Tel.: 040-2475178/06-17022252

Fax: 040-2455054

E-mail: e.j.m.hensen@tue.nl

Website: www.catalysis.nl

Projectplan

4. Titel projectplan

Innovaties in *hydrocracking* processen voor het opwerken van zware aardoliefracties naar schone brandstoffen

5. Samenvatting projectplan

In olieraffinaderijen zijn doorbraken nodig om de zwaarste aardoliefracties om te zetten in schone, waardevolle transportbrandstoffen middels *hydrocracking*. Binnen deze Casimir-samenwerking zullen nieuwe kraakkatalysatoren en procesconcepten ontwikkeld worden om tot een geïntegreerde innovatie te komen.

6. Beschrijving projectplan

Algemeen

Deze Casimir-samenwerking tussen de *Technische Universiteit Eindhoven* en *Shell Research and Technology Center Amsterdam* heeft tot doel om te komen tot innovaties in het *hydrocracking* proces. Het aandeel zware aardolievoedingen dat verwerkt dient te worden in raffinaderijen neemt in de nabije toekomst sterk toe. Derhalve dient het kraakproces verbeterd te worden om deze fracties om te zetten in schone, meer waardevolle motorbrandstoffen. Het onderzoeksprogramma concentreert zich op katalysatorontwikkeling in combinatie met het exploreren van nieuwe procesconcepten.

6a. Inleiding

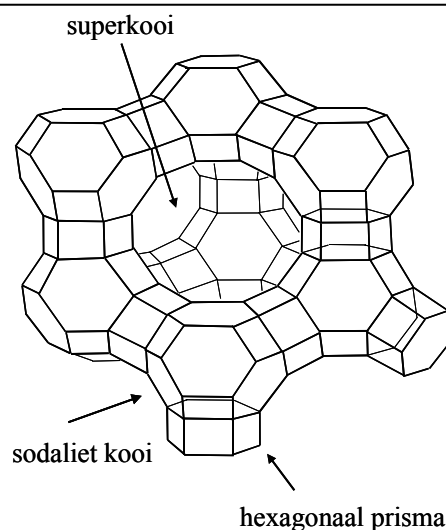
Hydrocracking (hydrogenerend kraken oftewel kraken met waterstof) is één van de belangrijkste omzettingsprocessen in een moderne raffinaderij. Zware aardoliefracties van lage (economische) kwaliteit kunnen omgezet worden in lichtere, meer waardevolle brandstoffen [Van Veen 2001]. Een belangrijke *driver* voor de toenemende wereldcapaciteit van het *hydrocracking* proces (op dit moment meer dan 200 miljoen ton per jaar in ca. 120 *hydrocracking* units) is de groeiende vraag naar transportbrandstoffen zoals diesel en kerosine [Minderhoud et al. 1999] en de noodzaak om in toenemende mate zwaardere voedingen te verwerken. Gezien de relatief hoge waterstofdrukken worden zwavel- en stikstofverbindingen in grote mate verwijderd zodat de brandstoffen ook nog eens voldoen aan de meest strenge emissienormen voor transportbrandstoffen.

Hydrocracking katalysatoren zijn bifunctioneel: ze bevatten een (de)hydrogeneerfunctie en zure plaatsen voor het kraken van koolwaterstoffen. De lange koolwaterstofketens in zware voedingen worden eerst gedehydrogeneerd tot olefines waarna ze worden gekraakt over de (Brønsted) zure functies naar kortere koolwaterstoffen. Uiteindelijk worden deze olefinische koolwaterstofproducten weer gehydrogeneerd. Selektiviteit is '*the name of the game*' in dit proces (afhankelijk van de regio meer nafta-achtige of dieselprodukt), hetgeen grotendeels bepaald wordt door de relatieve verhouding van kraak- en hydrogeneersnelheden. Voor hydrogenering worden op dit moment bijna uitsluitend gemengde NiMo/NiW sulfides gebruikt. De zure functie wordt meestal geleverd door amorf silica-alumina (ASA) of zeolieten.

Aanvraagformulier

Vermeld alle relevante informatie in het formulier. Raadpleeg steeds de toelichting!

Zeolieten zijn microporeuze (diameters < 2 nm) kristallijne moleculaire zeven opgebouwd uit tetraëders van SiO_4 en AlO_4 . Door de specifieke ordening van deze tetraëders ontstaat een driedimensionaal poreus netwerk. Voor *hydrocracking* wordt bijna uitsluitend zeoliet faujasiet (Y) gebruikt dat onder andere bestaat uit superkooien met een diameter van 11.8 \AA verbonden door *windows* met een diameter van 7.4 \AA . Door ladingscompensatie van de negatief geladen AlO_4 tetraëders worden zeolieten katalytisch actief. Wanneer de lading gecompenseerd wordt door protonen ontstaan vaste sterk (Brønsted) zure katalysatormaterialen, die koolwaterstoffen kunnen kraken.



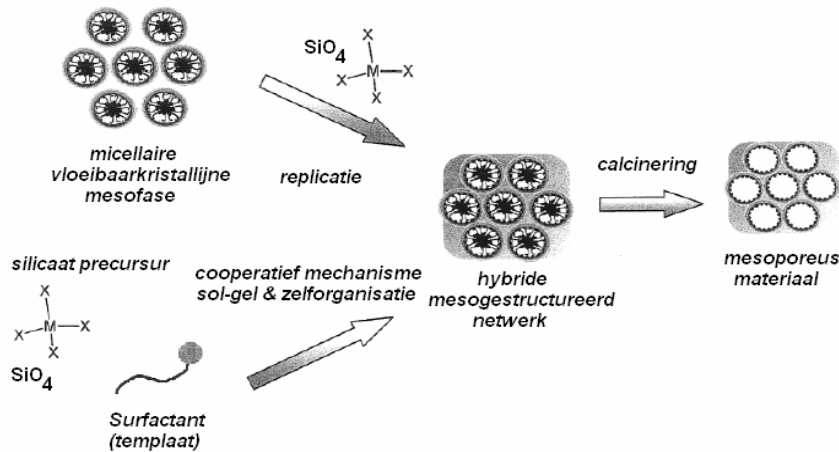
Zeoliet Y wordt het meest toegepast als zure component in *hydrocracking* katalystoren. De belangrijkste reden hiervoor is dat van de sterk zure zeolieten faujasiet de grootste poriën heeft: typische kraakvoedingen met een kookpunt van $370\text{-}600 \text{ }^\circ\text{C}$ bestaan uit molekulen die niet geadsorbeerd worden in zeolieten met een kleinere poriediameter. De beperkte poriediameter van zeolieten heeft als voordeel dat deactivering door vorming van coke-producten (voornamelijk door aromaatcondensatie) beperkt is vergeleken met zure dragers met een meer open oppervlakte zoals ASAs. Echter, de beperkte poriediameter leidt tot diffusielimiteringen van grote koolwaterstoffen hetgeen de conversie limiteert. In het meest extreme geval kunnen de grootste molekulen niet in de poriën van het zeoliet diffunderen en worden derhalve niet omgezet. In industriële katalysatoren wordt dit probleem gedeeltelijk opgelost door het modificeren van faujasiet zeoliet. De specifieke eigenschappen van dit zeoliet kunnen o.a. middels stomen, calcineren, ionwisseling en *leaching* beïnvloed worden [Scherzer 1984]. Zo kunnen voor bepaalde toepassingen de intrinsieke zuurheid, de hoeveelheid zure protonen en de porositeit geoptimaliseerd worden. De introductie van mesoporiën door stomen leidt tot verbeterde toegang van grote molekulen tot de actieve zure plaatsen.

Mesoporeuze materialen (zie kader) bieden hier wellicht nieuwe mogelijkheden. Deze materialen hebben voor katalyse interessante textuureigenschappen. Naast een gedefinieerde mesoporiestructuur bieden ze hoge specifieke oppervlaktes en porievolumes. Ondanks deze gunstige eigenschappen kunnen dit type materialen zeolieten nog niet vervangen. Ze missen daartoe de stabiliteit en zuurheid die nodig zijn in koolwaterstofconversieprocessen. De belangrijkste reden hiervoor is de afwezigheid van kristalliniteit op lokaal niveau. Zo verliest MCM-41 een groot gedeelte van zijn specifieke oppervlakte bij blootstelling aan water. De afwezigheid van kristallijne poriewanden zorgt er ook voor dat na introductie van aluminium geen of zeer weinig Brønsted zure plaatsen ontstaan. In gasolie kraakreacties blijken zulke materialen zich dan ook eerder te gedragen als amorf silica-alumina dan als zeolieten [Corma et al. 1996]. Het instabiele gedrag van deze materialen wordt voornamelijk toegeschreven aan de dunne silica wanden en onvoldoende crosslinking van het silica materiaal. Verschillende pogingen om de katalytische eigenschappen van zulke materialen te verhogen [Liu and Pinnavaia 2002] zoals het hydrofoob maken van het silica oppervlakte of het synthetiseren van materialen met dikkere silica wanden zijn maar gedeeltelijk succesvol [e.g., Chen et al. 1993; Mokaya 2000].

Aanvraagformulier

Vermeld alle relevante informatie in het formulier. Raadpleeg steeds de toelichting!

Vaste poreuze materialen kunnen worden onderverdeeld in microporeuze (< 2 nm), mesoporeuze (2-50 nm) en macroporeuze (> 50 nm) materialen. In 1992 werden mesoporeuze M41S moleculaire zeven met een geordende poriestructuur (diameter tussen 2 en 10 nm) ontdekt door Mobil [Kresge et al. 1992]. De synthese van dergelijke materialen is mogelijk door het gebruik van supramoleculaire structuren (micellen) in plaats van vormgevende molekulen (*structure directing agents* of *templates*) zoals gebruikelijk bij de synthese van zeolieten [Schüth 2001; Linssen et al. 2003].



Mogelijke mechanismes voor de vorming van mesoporeuze M41S materialen uit micellen van kationische quaternaire ammonium ionen en anionische silicaat deeltjes. De micellen dienen als een templaatt voor de vorming van het mesoporeuze materiaal. Uiteindelijk wordt het organische templaatt verwijderd door calcineren.

6b. Onderzoeksvragen

Op dit moment ligt er een belangrijke uitdaging om de huidige *hydrocracking* technologie te verbeteren zodat zwaardere voedingen omgezet kunnen worden in economisch waardevolle transportbrandstoffen. De nadruk in dit onderzoek zal liggen op het synthetiseren van verbeterde katalysatoren. Deze aanpak zal geïntegreerd worden met vernieuwing in procesconfiguraties.

Aangezien de bereikbaarheid van actieve plaatsen in zeolieten voor grote koolwaterstofmolekulen één van de belangrijkste limiteringen is van de huidige generatie katalysatoren ligt het voor de hand om zure moleculaire zeven met een hiërarchische poriestructuur, d.w.z. een combinatie van micro- en mesoporiën, te synthetiseren [Hartmann 2004]. Een voorbeeld hiervan is de *templating* van koolstof *nanotubes* met een oplossing van zeolietnanodeeltjes: het resulterende zeoliet met gedefinieerde mesoporiën vertoont een betere *performance* vertoont dan de conventionele katalysator (HZSM-5) in de alkylatie van benzene met etheen onder industriële condities [Christensen et al. 2003]. De route die we in deze Casimir-samenwerking zullen onderzoeken heeft betrekking op het aggregeren van nanogestructureerde zeoliet- en kleideeltjes tot geordende mesoporeuze materialen. De belangrijkste uitdaging ligt hier in het gelijktijdig behoud van de mesoporeuze structuur en de zuurheid.

Een principiële vraag is of primaire deeltjes met een lokaal kristallijne structuur ingebed in een mesoporeus materiaal wel net zo zuur zijn als nette kristallijne zeolieten. Als het mogelijk blijkt te zijn om dergelijke materialen zeolietachtige zuurheid te geven, dan dringt de vraag zich op of de aanwezigheid van mesoporiën essentieel is. De methodieken ontwikkeld om de wanden van mesoporeuze materialen te kristalliseren zouden immers toepassing kunnen vinden om de zuurheid van amorf silica-alumina (ASA) materialen te verhogen – dit is vooral vanuit utiliteitsperspectief van

Aanvraagformulier

Vermeld alle relevante informatie in het formulier. Raadpleeg steeds de toelichting!

belang aangezien de synthese van ASAs zonder een gedefinieerde (meso)poriestructuur wellicht goedkoper zal zijn.

Naast de bereiding van dergelijke materialen zal er ook aandacht besteed worden aan de mogelijkheden om metaalfosfides te introduceren als vervanging van de huidige sulfidische hydrogeneerfunctie. Het onderzoeken van nieuwe procesconfiguraties en het overwegen van totaal nieuwe reaktorconcepten zal geïntegreerd worden met katalysatorontwikkeling.

6c. Aanpak

Strategie

Typisch voor de gekozen onderzoeksstrategie is een aanpak waarin eerst een aantal materialen gesynthetiseerd en op hun meest belangrijke eigenschappen gekarakteriseerd worden. Voldoen ze aan de gestelde criteria dan zullen deze verder getest worden. In de bereidingsfase zal het gebruik van goedkope uitgangsstoffen en realistische syntheseroutes het uitgangspunt zijn. Dit sluit niet uit dat er experimenten uitgevoerd worden met een meer 'exotisch' karakter, die kunnen leiden tot elementaire inzichten. Daarnaast zullen vernieuwingen in procesconfiguraties onderzocht worden alsmede een inventarisatie van nieuwe technologieën voor *hydrocracking*. De onderzoekstrategie zal toegelicht worden aan de hand van het werk aan mesoporeuze materialen. Dit werk bestaat uit (i) synthese van materialen met beperkte karakterisering, (ii) voor geschikte materialen verdere karakterisering en voor de meest interessante materialen (iii) een *hydrocracking* testreactie.

(i) Synthese

We zullen trachten mesoporeuze materialen met een kristallijne wanden te synthetiseren via (supramoleculaire) aggregatie van primaire zeoliet- en kleideeltjes. Het is in principe mogelijk om een metastabiel materiaal zoals MCM-41 te transformeren in een meer stabiel zeolietachtig kristallijn materiaal [Barrer 1982]. De uitdaging ligt in het behoud van de mesoporeuze structuur. Karakterisering is in dit stadium meer gericht op de vraag of er een gunstige poriestructuur ontstaan is (XRD, N₂ sorptie) en of de materialen zuur zijn dan op een uitgebreide karakterisering van de materialen. Recente bevindingen geven aan dat protozeolitische nanoclusters (*zeolite seeds*, *zeolite nanoclusters*) geaggregeerd kunnen worden tot mesoporeuze materialen met een verhoogde stabiliteit en zuurheid [Liu et al. 2000; Zhang et al. 2001; Agúndez et al. 2003; Aerts et al. 2004]. Daarnaast kunnen mesoporeuze materialen ook gecoat worden met deze zeolietprecursors [e.g., Trong On et al. 2002]. Het stabiliseren van de mesostructuren door het aanbrengen van een tweede fase in de mesoporiën zal ook bekeken worden. Recentelijk beschreven Zhang et al. [Zhang et al. 2005] de depositie van koolstof in de mesoporiën van SBA-15 door decompositie van furfuryl alcohol waarna de wanden middels *vapor-phase transport* van de templaatomolekules [Naik et al. 2003] hergekristalliseerd werden. De resulterende materialen zijn redelijk zuur en het lijkt erop dat de wanddikte ongeveer de maat heeft van een eenheidscel van MFI zeoliet.

Een nieuwe route die onderzocht zal worden is die van aggregatie van kleine kleideeltjes tot een driedimensionaal poreus netwerk. De belangrijkste reden hiervoor is dat kleien (zie kader) in tegenstelling tot de huidige generatie mesoporeuze aluminosilikaten een intrinsieke zuurheid gelijk aan die van zeolieten vertonen. Dit is gerelateerd aan de kristalliniteit in twee dimensies van deze kleien. Een mogelijkheid die uitgebreid onderzocht zal worden is het opvouwen van deze laagjes tot materialen met poriën (*folded sheet mechanisme*) zoals voorgesteld door Inagaki [Inagaki et al. 1993]. Hierbij zullen middels methodieken als *templating* getracht worden om stabiele mesostructuren te bouwen. Deze syntheses zullen wellicht materialen opleveren die eerder gekwalificeerd kunnen worden als supermicroporeuze materialen met poriediameters tussen 10 en 20 nm.

De aanwezigheid van deze heterostructuren tussen de kleilaagjes beïnvloedt de zuurheid van de klei [Vansant en Cool 2001]. Dit zal onderzocht worden voor silica mesostructuren gestabiliseerd

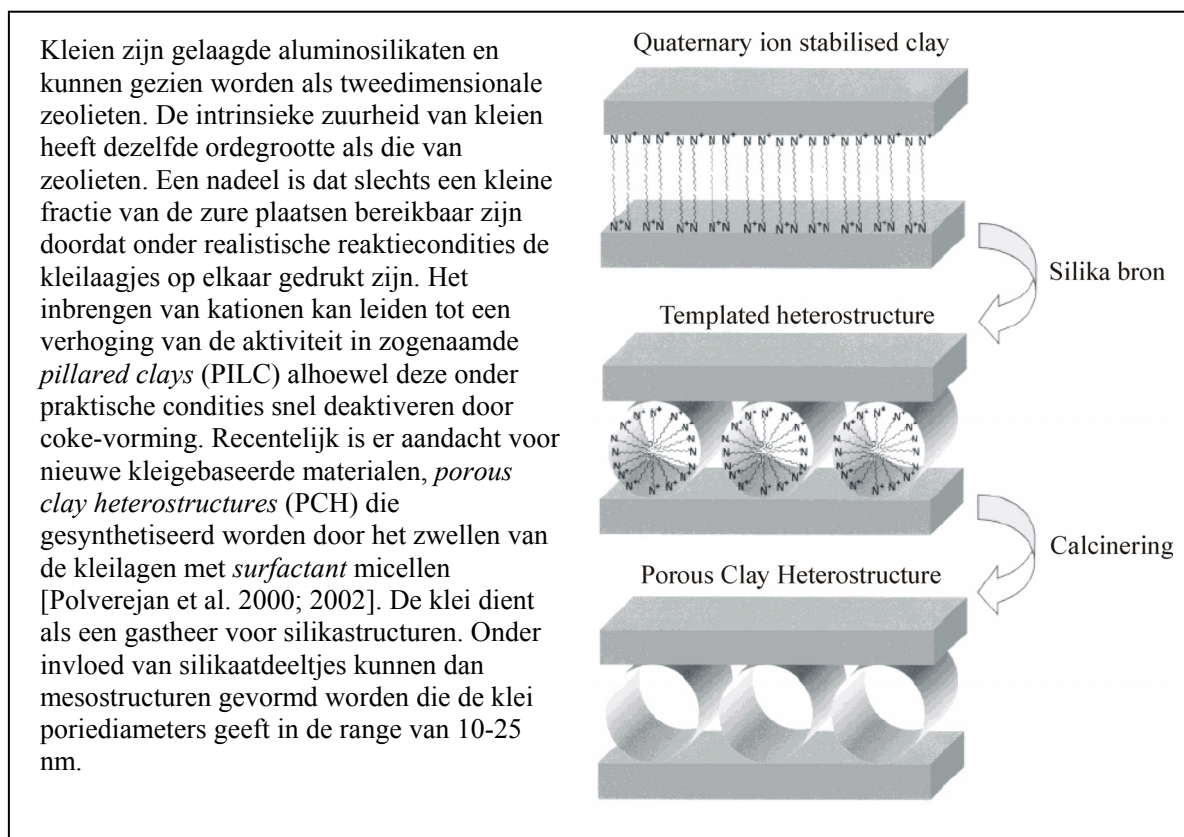
Aanvraagformulier

Vermeld alle relevante informatie in het formulier. Raadpleeg steeds de toelichting!

tussen de kleilagen. Het is bekend dat de silica wanden van de resulterende PCHs in het algemeen beter geordend zijn dan die van MCM-41 [Galarneau et al. 1995]. Dit biedt wellicht betere mogelijkheden om via introductie van zeolietnanoclusters de zuurheid te verhogen. Met andere woorden, dit beantwoordt de vraag of het mogelijk is om kleien die in twee dimensies kristallijn zijn om te vormen tot materialen met kristalliniteit in drie dimensies.

Vanuit utilisatieoogpunt zal er aandacht besteed worden aan het gebruik van goedkope uitgangsmaterialen. Zo heeft recent werk van de groep van Pinnavaia [Liu en Pinnavaia 2004] laten zien dat faujasite zeoliet nanoclusters ook gesynthetiseerd kunnen worden uit een goedkope silicabron als kaolin klei. Deze groep rapporteerde ook het gebruik van zetmeel in plaats van dure *surfactant* molekulen voor de assemblage van deze nanodeeltjes [Liu en Pinnavaia 2003], alhoewel dit wellicht niet leidt tot een materiaal met goedgedefinieerde mesoporiën.

De zuurheid zal katalytisch geëvalueerd worden via een alkaan hydroisomerisatietest die een goede indicatie geeft van de Brønsted zuurheid van de dragers. Hiertoe kunnen meerdere materialen tegelijk in een parallele reaktor getest worden. De activiteit wordt vergeleken met die van standaard faujasiet zeoliet en ASA materialen. Een belangrijk criterium zal immers zijn dat de nieuwe materialen aanzienlijk zuurder zijn dan de conventionele ASAs.



(ii) Karakterisering

Veelbelovende materialen zullen nader onderzocht worden – in dit stadium is het interessant om te weten of de aanwezige zuurheid voortkomt uit de aanwezigheid van zeolietachtige structuren in de wanden van de mesoporeuze materialen. Hiertoe wordt vaak de aanwezigheid van structurele vibraties van de *5-membered* ringen van MFI zeoliet middels IR spectroscopie gebruikt. Niettemin lijkt dit een indicatief criterium te zijn [Naik et al. 2003]. Binnen SRTCA is er een spectroscopische methode ontwikkeld die selectief de aanwezigheid van Brønsted protonen van zeolitische zuurheid aangeeft.

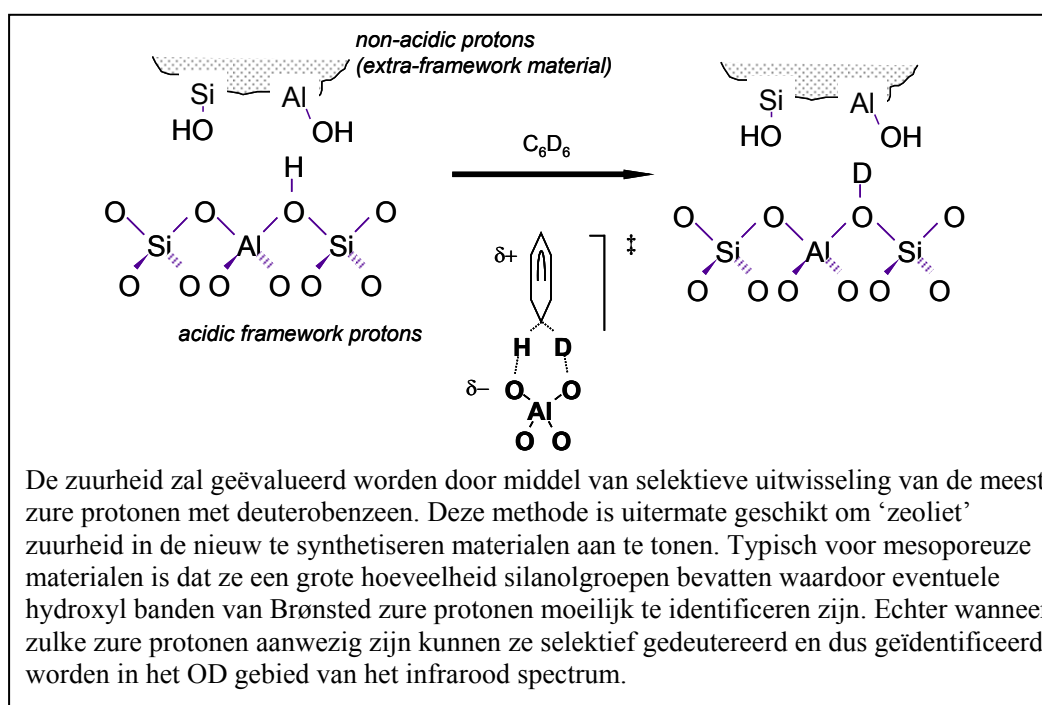
Aanvraagformulier

Vermeld alle relevante informatie in het formulier. Raadpleeg steeds de toelichting!

Daarnaast zullen er ook andere technieken aangewend worden zoals ^{27}Al NMR en Transmission Electron Microscopy (TEM) om deze materialen nauwkeurig onder de loep te nemen.

(iii) *Hydrocracking* testreactie

De katalytische *performance* van nieuwe katalytische materialen die een gunstige poriestructuur combineren met sterke zuurheid zal getest worden in een industriële *hydrocracking* reactie. Binnen SRTCA zijn faciliteiten aanwezig om onder realistische condities (echte kraakvoedingen, hoge waterstofdruk) de activiteit van kraakkatalysatoren te evalueren.



Metaalphosphides als vervanging hydrogeneerfunctie

De hydrogeneercomponent in *hydrocracking* katalysatoren bestaat uit gemengde NiMo(W) sulfides. Deze sulfides worden niet zozeer gebruikt vanwege een hoge hydrogeneeractiviteit maar eerder omdat ze een redelijke activiteit vertonen in de aanwezigheid van zwavel- en stikstofverbindingen. *Hydrocracking* reacties met zeer actieve edelmetaalkatalysatoren onder relatief schone condities laten zien dat er nog veel winst te halen is door verbetering van de hydrogeneerfunctie. Recentelijk is er uitgebreide (academische) aandacht voor de vervanging van metaalsulfide katalysatoren door metaalfosfides voor ontzwaveling en ontstikstofing [Shu en Oyama 2005; Yang en Prins 2005]. Ook in deze reacties speelt hydrogenering een belangrijke rol. Een evaluatie van de *performance* van deze nieuwe materialen in *hydrocracking* katalysatoren lijkt dus op zijn plaats. In tegenstelling tot metaalcarbides en -nitrides die initieel een hoge activiteit vertonen maar langzaam inzwavelen lijken metaalfosfides veel stabiel. Deze fosfides kunnen relatief makkelijk gesynthetiseerd worden bijvoorbeeld uit metaalzouten en $(\text{NH}_4)_2\text{HPO}_4$ [e.g., Oyama 2003]. Recente bevindingen laten zien dat er ook nog veel gewonnen kan worden door het verhogen van de dispersie van deze fosfides [Yang en Prins 2005].

Het onderzoek zal zich concentreren op de vraag of metaalfosfides (voornamelijk Mo, W en Ni) actieve hydrogeneercomponenten kunnen zijn als vervanging van metaalsulfides. Daartoe zullen zeolietgedragen metaalfosfides bereid worden. De lokatie van de hydrogeneercomponent ten opzichte

Aanvraagformulier

Vermeld alle relevante informatie in het formulier. Raadpleeg steeds de toelichting!

van de kraakfunctie is van eminent belang en er zal derhalve getracht worden om kleine metaalfosfide deeltjes in de micro- en mesoporiën van kraakzeolieten te stabiliseren. We zullen de *performance* van gemengde fosfides ook bepalen omdat we hier analoog aan sulfides synergie tussen Ni en Mo(W) verwachten. Indien de voortgang van het onderzoek aan zure meso- of supermicroporeuze materialen het toelaat zullen deze sulfides ook gecombineerd worden met deze dragers.

Procesvernieuwing

Geïntegreerde procesvernieuwing omvat naast vernieuwing en verbetering van katalysatoren ook innovatie in reactortechnologie en procesconfiguraties. Daarom is het verkennen van nieuwe *hydrocracking* reactorconcepten en integratie met scheidingsprocessen een integraal onderdeel van deze Casimir-optie.

Hydrocracking wordt typisch uitgevoerd in *single-* of *dual-stage* vastbedprocessen. In tweestapsprocessen bestaat de eerste meestal uit een voorbehandelstap (voornamelijk het verwijderen van zwavel- en stikstofverbindingen) gevolgd door *hydrocracking* in de tweede reaktor. Vaak wordt het effluent van deze twee reaktoren gefractioneerd en de zwaarste fractie dient weer als voeding voor de tweede reaktor. Het direct voeden van de tweede reaktor (*series-flow* configuratie) is ook mogelijk aangezien zeolitische katalysatoren redelijk bestand zijn tegen ammonia. Vaak wordt in *hydrocracking* complete conversie van de voeding vereist hetgeen in processen met recycle betekent dat zware molekulen zoals polynaftenen in de recycle blijven. Deze polynaftenen worden niet omgezet over zeolieten. Meer toegankelijke ASAs kunnen deze wel omzetten maar missen de intrinsieke activiteit. Hier zou een nieuw sterk zuur mesoporeus materiaal een duidelijke verbetering betekenen.

De uitdaging om de meest zware fracties met een kookpunt boven 620 °C om te zetten (de hoge reaktietemperaturen zorgen voor een verschuiving van het hydrogeneevenwicht naar de kant van aromaten dat deactivering bevordert en een minder gunstig product levert) noopt ook tot het in overweging nemen van geheel andere procesconcepten zoals *ebullated beds* waarin door continue katalysatorextractie de activiteit op peil gehouden worden.

6d. Innovatie

De innovatie in deze samenwerking ligt in het maken van nieuwe materialen met een (hierarchische) poriestructuur die voldoende zuur zijn om in combinatie met een hydrogeneercomponent grote koolwaterstoffen om te zetten in lichtere koolwaterstoffen. Door supramoleculaire aggregatie van kleine zeoliet- of kleideeltjes zal getracht worden om zure (semi)kristallijne mesoporeuze materialen te vormen. De aandacht voor aggregatie van kleine kleideeltjes geeft inzicht in de vraag of er een generalisatie mogelijk is van het werk aan zeolietnanodeeltjes. Deze methodieken kunnen ook hun toepassing vinden in het optimaliseren van bestaande zure amorfe ASA dragermaterialen.

Ook aan de kant van de hydrogenering zijn er doorbraken nodig: we zullen trachten de hoge activiteit van metaalfosfides te introduceren in kraakkatalysatoren. Daarnaast zal er ook ruimschoots aandacht zijn voor vernieuwen van procesconfiguraties, hetzij door aanpassingen van huidige configuraties danwel het overwegen van geheel nieuwe reactorconcepten.

6e. Toepassing

De toepassing van het voorgestelde onderzoeksprogramma liggen op het gebied van *hydrocracking* processen. Deze processen vormen de meest veelzijdige van de conversieprocessen in een aardolieraffinaderij. Een brede range aan voedingen van nafta to asphalt kan omgezet worden in waardevolle transportbrandstoffen. Deze processen zijn des te meer belangrijk omdat ze relatief schone brandstoffen leveren.

Recente ontwikkelingen zorgen voor een gestaag toenemende *performance* van de ASA- en

Aanvraagformulier

Vermeld alle relevante informatie in het formulier. Raadpleeg steeds de toelichting!

zeoliet-gebaseerde katalysatoren. Ook procesconfiguraties worden aangepast om de selectiviteit te optimaliseren. Echter, er is een sterke behoefte aan katalysatoren om grote molekulen die de hoogkokende fractie van aardolie vormen om te zetten. Hiervoor zijn doorbraken in de synthese van nieuwe materialen nodig. De mogelijkheid om geheel nieuwe reaktorconcepten toe te passen dient overwogen te worden wanneer in toenemende mate hoge conversie van zulke voedingen noodzakelijk wordt.

6f. Relevantie voor wetenschap, technologie en maatschappij

Aardolie zal tot ver in de 21^{ste} eeuw een belangrijke grondstof voor transportbrandstoffen blijven. Op dit moment bestaat ca. 10-25% van de aardolie uit vacuum-residu met een kookpunt boven 565 °C; deze fractie zal in de toekomst toenemen gezien de noodzaak om meer zware aardolie te verwerken. *Hydrocracking* is een belangrijk proces om aan de toenemende behoefte aan schone transportbrandstoffen te voldoen, onder meer in zwavel- en aromaatarme diesel en kerosine met een hoog *smoke-point*. Het omzetten van de zwaarste fracties noopt tot doorbraken in het *hydrocracking* proces. De noodzakelijke innovatie ligt in een combinatie van betere katalysatoren en vernieuwde procesconcepten.

In een moderne kenniseconomie is het nuttig aanwenden van fundamentele kennis (valorisatie) van groot belang. Het onderzoeksgebied rond (zure) mesoporeuze materialen is op dit moment populair; een kritische vraag die binnen deze Casimir-samenwerking gesteld wordt is hoe veelbelovend deze materialen daadwerkelijk zijn voor toepassing in commerciële processen.

6g. Meerwaarde samenwerking en kennisuitwisseling tussen bedrijf en kennisinstelling

De beoogde samenwerking heeft tot doel om te evalueren in welke mate innovatieve syntheroutes daadwerkelijk potentieel hebben om een betere industrieel toepasbare katalysator op te leveren als integraal onderdeel van *hydrocracking* proces innovatie. In academisch onderzoek wordt vaak van een verbeterde katalysator gesproken als er een materiaal gemaakt is met een hogere activiteit (conversie, reactiesnelheid). Deze activiteiten worden meestal (noodgedwongen) bepaald in modelreacties die qua condities (temperatuur, druk, reaktanten) sterk afwijken van de industriële praktijk. Vanuit industrieel perspectief is activiteit slechts één van de vele elementen die bepalen of een nieuw materiaal commercieel interessant is [Armor 2005]. Zo spelen bijvoorbeeld selectiviteit en levensduur een cruciale rol. Nieuwe materialen worden in realistische testreacties gebenchmarkt tegen industriële katalysatoren. Een andere vraag is of de bereiding van een nieuw materiaal opgeschaald kan worden van laboratorium- naar industriële schaal. In een industriële omgeving gaat het ontwikkelen van nieuwe katalytische materialen vaak samen met het opzetten van nieuwe procesconcepten.

Voor de Casimir-kandidaat leidt deze samenwerking tot appreciatie van deze industriële aanpak (geïntegreerde katalysator-reaktor-procesconfiguratie innovatie) die grotendeels afwijkt van de strategie in de academische wereld. Deze kennis is nuttig voor zijn verdere carrière, onder andere met betrekking tot acquisitie van onderzoeksgelden in samenwerking met de chemische industrie.

Op wetenschappelijk gebied biedt de samenwerking ook de mogelijkheid tot het inslaan van nieuwe richtingen in de samenwerking. Tussen deze partners (Hensen en Van Veen) wordt er al geruime tijd samengewerkt op het gebied van de ontzwavelingskatalyse. Voorts brengt deze Casimir-samenwerking expertises samen: binnen het *Laboratorium van Anorganische Chemie en Katalyse (TU/e)* is kennis aanwezig over de vorming en karakterisering van kleine zeoliet nanodeeltjes [De Moor et al. 1999; Houssin 2002]. Evaluatie van zuurheid voor kraakkatalysatoren alsmede het katalytisch testen onder industriële condities is de dagelijkse praktijk binnen *Shell Global Solutions*.

Aanvraagformulier

Vermeld alle relevante informatie in het formulier. Raadpleeg steeds de toelichting!

6h. Literatuurverwijzingen

- Aerts, A. et al., Appl. Catal. A 257 (2004) 7.
Agúndez, J. et al., Chem. Commun. (2003) 150.
Armor, J. Appl. Catal. A 282 (2005) 1.
Barrer, R.M. Hydrothermal chemistry of zeolites, Academic Press, London, 1982, p. 174.
Chen, C.Y., Burkett, S.L., Li, H.X., Davis, M.E. Microporous Mater. 2 (1993) 27.
Christensen, C.H., Johannsen, K., Schmidt, I., Christensen, C.H. J. Am. Chem. Soc. 125 (2003) 13370.
Corma, A., Grande, M.S., Gonzalez-Alfaro, V., Orchilles, A.V. J. Catal. 159 (1996) 375.
De Moor, P.P.E.A., et al. Chem. Eur. J. 5 (1999) 2083.
Galarnau, A., Barodawalla, A., Pinnavaia, T.J. Nature 374 (1995) 529.
Hartmann, M. Angew. Chem. Int. Ed. 43 (2004) 5880.
Houssin, C.J.Y. Ph.D. Thesis, Eindhoven University of Technology 2003.
Inagaki, S., Fukushima, Y., Kuroda, K. J. Chem. Soc. Chem. Commun. (1993) 680.
Kresge, C.T. et al. Nature 359 (1992) 710.
Linszen, T., Cassiers, K., Cool, P., Vansant, E.F. Adv. Coll. Interf. Sci. 103 (2003) 121.
Liu, Y., Zhang, W., Pinnavaia, T.J. J. Am. Chem. Soc. 122 (2000) 8791.
Liu, Y., Pinnavaia, T.J. J. Mater. Chem. 12 (2002) 3179.
Liu, Y., Pinnavaia, T.J. J. Am. Chem. Soc. 125 (2003) 2376.
Liu, Y., Pinnavaia, T.J. J. Mater. Chem. 14 (2004) 3416.
Minderhoud, J.K., Van Veen, J.A.R., Hagan, A.P. Stud. Surf. Sci. Catal. 127 (1999) 3.
Mokaya, R. Chem. Commun. (2000) 1891.
Naik, S.P., Chiang, A.S.T. Thompson, R.W., J. Phys. Chem. B 107 (2003) 7006.
Oyama, S.T. J. Catal. 216 (2003) 343.
Polverejan, M., Pauly, T.R., Pinnavaia, T.J. Chem. Mater. 12 (2000) 2698.
Polverejan, M., Liu, Y., Pinnavaia, T.J. Chem. Mater. 14 (2002) 2283.
Scherzer, J. ACS Symp. Series 284 (1984) 157.
Schüth, F. Stud. Surf. Sci. Catal. 135 (2001) 1.
Shu, Y., Oyama, S.T. Chem. Commun. (2005) 1143.
Trong On, D., Kaliaguine, S. Angew. Chem. Int. Ed. 41 (2002) 1036.
Vansant, E.F., Cool, P. Colloid Surf. A 179 (2001) 145.
Van Veen, J.A.R. in: 'Zeolites for Cleaner Technologies' (Guisnet, M., Gilson, J.P., Eds.), 2001, Chapter 6.
Xia, Y., Mokaya, R. (a) J. Mater. Chem. 14 (2004) 863; (b) J. Mater. Chem. 14 (2004) 3427.
Yang, S., Prins, R. Chem. Commun. (2005) 4178.
Zhang, Y., Okubo, T., Ogura, M. Chem. Commun. (2005) 2719.
Zhang, Z.T. et al. J. Am. Chem. Soc. 123 (2001) 5014.

Aanvraagformulier

Vermeld alle relevante informatie in het formulier. Raadpleeg steeds de toelichting!

6i. Werkplan

- Geef de totale projectduur aan (in maanden, max. 60 maanden): 17
- Verwachte startdatum project: 1 februari 2006
- Verwachte tijdsbesteding Casimir-kandidaat (in uren per week): 20

Jaar	Casimir-activiteiten	Bij bedrijf (uren/week)	Bij kennisinstelling (uren/week)
2005	Van .. tot ...		
2006	Van 1 februari tot 31 december	16	4
2007	Van 1 januari tot 30 juni	16	4
2008	Van ... tot ...		
2009	Van .. tot ...		

De activiteiten zijn uitgebreid beschreven bij punt 6c. In het eerste jaar zal de nadruk veelal op synthese van materialen liggen, terwijl in de laatste 6 maanden voornamelijk katalytische testreacties zijn voorzien.

→ Vermeld het totaal aantal gebruikte woorden (voor onderdelen 6a t/m 6i): ~ 3500

Begroting

7a. Begroting (in k€)

	2005	2006	2007	2008	2009	TOTAAL
Aangevraagde kosten						(max. k€160)
Casimir-kandidaat		k€ 30	k€ 16			k€ 46
Bijdrage kennisinstelling						
<i>Personele kosten:</i>						
Begeleiding (fte)		-	-			
Assistentie (fte)		-	-			
<i>Materiële kosten:</i>		-	-			
Benchfee (reis- en congreskosten)		k€ 6	k€ 3			k€ 9
Apparatuur		-	-			
Materialen		k€ 4	k€ 2			k€ 6
Opleiding						
Subtotaal bijdrage TU/e		k€ 10	k€ 5			k€ 15
Bijdrage bedrijf						
<i>Personele kosten:</i>						
Begeleiding (fte)		k€ 10	k€ 5			k€ 15
Assistentie (fte)		k€ 100	k€ 50			k€ 150
<i>Materiële kosten:</i>						
Benchfee (reis- en congreskosten)		k€ 5	k€ 3			k€ 8
Apparatuur		k€ 50	k€ 25			k€ 75
Materialen		k€ 10	k€ 5			k€ 15
Opleiding		k€ 5	k€ 2			k€ 7
Subtotaal bijdrage Shell		k€ 180	k€ 90			k€ 270
TOTAAL		k€ 220	k€ 111			k€ 331

7b. Garanderen bedrijf en kennisinstelling samen minimaal het bij NWO aangevraagde bedrag aan kosten bij te dragen?

Ja

Aanvraagformulier

Vermeld alle relevante informatie in het formulier. Raadpleeg steeds de toelichting!

7c. Zijn voor dit project andere subsidies aangevraagd bij NWO of bij andere organisaties?

Nee

Beschrijving kennisinstelling

8a. Type kennisinstelling

Technische Universiteit

8b. Betrokken onderzoeksgroep

De betrokken onderzoeksgroep is de groep rond prof. dr. Rutger van Santen binnen het laboratorium Anorganische Chemie en Katalyse van de TU Eindhoven. De kandidaat is op dit moment universitair docent in deze groep.

De reputatie van deze groep blijkt onder meer uit ca. 200 gerefereerde publikaties in de periode 2000-2005. De activiteiten van deze groep wordt gefinancierd door publieke en private instellingen waaronder NWO, FOM, STW, NRSC-Catalysis, ACTS, SenterNovem, KNAW, wetenschappelijke organisaties van andere landen (CNPq in Brazilië, DFG in Duitsland, Pakistan) en industrieën als Sasol, Total, Conecat, Shell, Idemitsu Kosan, Philips, Japan Energy. Verschillende groepsleden maken gebruik van prijzen zoals Jonge Chemici, Vernieuwingsimpuls, Spinoza en het akademiehoogleraarschap. Er zijn nauwe samenwerkingen met groepen binnen en buiten Nederland zoals het Zelinsky Institute of Organic Chemistry en het Borekov Institute of Catalysis in Rusland en het Dalian Institute of Chemical Physics in China.

8c. Beschikbare onderzoeksinfrastructuur

Binnen het laboratorium Anorganische Chemie en Katalyse is er uitgebreide onderzoeksinfrastructuur aanwezig voor synthese, karakterisering en testen van katalytische materialen.

8d. Aansluiting strategisch onderzoeksprogramma

Het centrale thema van de onderzoeksgroep van Van Santen is moleculaire heterogene katalyse. Via een geïntegreerde aanpak van experimentele en computationele studies worden getracht een moleculaire beschrijving van katalytische processen te verkrijgen. Binnen deze groep zijn theoretische chemie (Jansen/Kramer), heterogene katalyse (Hensen/Van Veen), katalysator synthese en karakterisering (Hensen/Magusin) en electrokatalyse (Koper/De Bruijn/Notten) vertegenwoordigd.

Als stimulans voor de research rond heterogene katalyse is er behoefte aan de synthese van nieuwe katalytisch relevante materialen. Het verwerven van een betere positie op dit gebied is aldus een belangrijk doel in het strategisch onderzoeksprogramma van de groep Van Santen.

8e. Verankering mobiliteit in het loopbaanbeleid voor onderzoekspersoneel

In het *human resources* (HR) beleid gaat de TU/e ervan uit dat de kwaliteit op het gebied van onderzoek en onderwijs van haar medewerkers gebaat is bij een vermogen om 'over de grenzen heen te kijken'. Deze vaardigheid is niet slechts inhoudelijk op te vatten, maar wordt juist bevorderd door een brede academische vorming en het leren omgaan met verschillende (organisatorische) omgevingen en culturen. In het HR-beleid is dit terug te vinden in de volgende accenten:

Aanvraagformulier

Vermeld alle relevante informatie in het formulier. Raadpleeg steeds de toelichting!

1. Stimuleren van het verkrijgen van ervaring buiten de instelling bij werving, selectie, doorstroom (Personal Development Plans). Dit betreft uitwisseling met het bedrijfsleven, met andere wetenschappelijke instellingen en met organisaties in het buitenland.
2. Stimuleren van uitwisseling tussen de organisaties/organisatieonderdelen op de campus ten behoeve van persoonlijke ontwikkeling en organisatieontwikkeling (interfacultair, interdisciplinair, met de onderzoeksinstituten e.d.).
3. Het bieden van een arbeidsvoorwaardelijke mogelijkheid voor een buitenlandstage o.i.d. in de vorm van een sabbatical leave.

Het stimuleren van het verkrijgen van ervaring buiten de instelling is een trend die de laatste tijd beduidend is toegenomen. Meer en meer beseffen zowel werknemer als werkgever dat een baan bij de universiteit een fase in iemands loopbaan is, daar waar men eerder de (vaste) TU/e-baan voor het leven als doel op zich beschouwde. Dit werkt door in een toename van tijdelijke contracten voor bijvoorbeeld jong talent. Andere concrete voorbeelden van de doorwerking van dit beleidsperspectief zijn:

- in principe geen werving van PhD's uit eigen gelederen.
- openstelling van Tenure Tracks (contract voor 6 jaar om te groeien naar de functie van Associate professor). In deze tracks is internationale ervaring buiten Nederland nadrukkelijke voorwaarde.
- stimuleren van wetenschappers om de werkzaamheden tijdelijk in het buitenland en met buitenlandse partners te verrichten.
- medewerkers de kans te bieden sabbatical leaves op te bouwen en te benutten voor dit doel.
- noodzaak voor het verwerven van 2e, 3e en 4e geldstromen vereisen ondernemerszin, die bij uitstek in (projecten met) het bedrijfsleven kan worden ontwikkeld.

Uitwisseling tussen organisaties op onze locatie wordt gestimuleerd door faculteitoverschrijdende ontwikkelprogramma's, zoals:

- Algemene Management Leergang (AML) voor (aankomende) managers
- Strategisch Professioneel Ontwikkelingstraject (SPOT) voor wetenschappers die aan het begin van hun loopbaan staan.

De CAO Nederlandse Universiteiten biedt de mogelijkheid tot verlofsparen voor een sabbatical leave.

→ Vermeld het totaal aantal gebruikte woorden aan (voor onderdelen 8a t/m 8e): ~650

Beschrijving bedrijf

9a. Type bedrijf

Shell Global Solutions International B.V. levert zakelijke en operationele adviezen, technische dienstverlening en expertise op het gebied van onderzoek en ontwikkeling aan de energie-industrie over de gehele wereld.

9b. Betrokken onderzoeksgroep

Binnen het assortiment aan dienstverlening en technologieën aangeboden door Shell Global Solutions voert de Exploratieve Onderzoeksgroep in Amsterdam, GSIR, voor de Shell bedrijven onderzoeksprojecten uit van exploratieve en baanbrekende aard met duurzame ontwikkeling als de

Aanvraagformulier

Vermeld alle relevante informatie in het formulier. Raadpleeg steeds de toelichting!

belangrijkste drijfveer. GSIR doet onderzoek naar een meer duurzame productie van energiedragers. Het ontwikkelen van nieuwe technologieën bestrijkt het gehele onderzoekstraject van het genereren van ideeën tot het opereren van prototypen in een commerciële omgeving.

9c. Beschikbare onderzoeksinfrastructuur

Op het laboratorium van Shell Global Solutions te Amsterdam is een uitgebreide onderzoeksinfrastructuur aanwezig. Dit betreft zowel laboratoriumruimte, proeffabrieken op diverse schalen, zeer geavanceerde meet- en analyse-apparatuur.

9d. Economisch perspectief van de aanvraag

In de wereld buiten Amerika is gasolie een gewenster produkt dan nafta – het prijsverschil in bijvoorbeeld Singapore en Rotterdam ligt momenteel zo rond 15 USD/bbl. Dit betekent dat een selektiviteitsverschuiving van 1% wof van nafta naar gasolie voor een gemiddelde *hydrocracking unit* al gauw een paar miljoen USD per jaar winst oplevert. Het ligt dan ook in de rede te veronderstellen dat, mocht de missie om een verbeterde selektiviteit te bewerkstelligen via de voorgestelde combinatie van een nieuwe zure component en een betere balans in zure en hydrogeneerfuncties eventueel in een nieuwe procesconfiguratie slagen, de extra winsten gemakkelijk in de tientallen miljoenen USD kunnen lopen.

9e. Verankering mobiliteit in het loopbaanbeleid voor R&D-personeel

-

→ Vermeld het totaal aantal gebruikte woorden aan (voor onderdelen 9a t/m 9e): ~ 250

Concept-overeenkomst mbt kenniseigendom (IPR)

10. Tekst concept-overeenkomst tussen kennisinstelling en bedrijf

De concept-overeenkomst met betrekking tot kenniseigendom tussen de Technische Universiteit Eindhoven en Shell Global Solutions International is bijgesloten in appendix A.

Beschrijving (Curriculum Vitae) Casimir-kandidaat

11a. Persoonlijke gegevens

Dr. ir. E.J.M. Emiel Hensen
Man, nederlandse nationaliteit
Geboren op 5 februari 1971 te Geleen, Nederland
Geboorteland ouders: Nederland

11b. Opleiding

TU Eindhoven
Scheikundige Technologie van 1 september 1989 tot en met 14 december 1994
Titel afstudeerscriptie: "A kinetic study of periodic trends and promotional behaviour in hydrotreating catalysts", eindcijfer: 9.

11c. Promotie-onderzoek (indien van toepassing)

TU Eindhoven, promotor: prof. dr. R.A. van Santen
Scheikundige Technologie van 1995 tot en met 2000 (promotie 4 april 2000)

Titel proefschrift: "Hydrodesulfurization catalysis and mechanism of supported transition metal sulfides"

11d. Huidige functie

Universitair docent aan de Technische Universiteit Eindhoven

11e. Voorafgaande werkervaring (indien van toepassing)

1 mei 2000 tot en met 30 september 2001

Universitair docent aan de Universiteit van Amsterdam

11f. Motivatie voor publiek-private onderzoekssamenwerking

Universiteiten vormen een steeds belangrijker wordende schakel bij de ontwikkeling van nieuwe technologieën en innovatieve producten. Het bedrijfsleven doet steeds vaker een beroep op kennisinstellingen in het realiseren van innovaties. Door deze economische ontwikkeling werkt het bedrijfsleven dan ook nauwer samen met kennisinstellingen. De complexe aard van deze samenwerkingen, met name op het terrein van valorisatie, maken langetermijnsamenwerking interessant. Naast de primaire taak van onderwijs en het verrichten van fundamenteel onderzoek wordt in toenemende mate het verwerven van andere geldstromen om toegepast onderzoek te financieren belangrijk. Een derde kerntaak van een universiteit is kennisvalorisatie richting bedrijfsleven.

Het Casimir-programma biedt voor onderzoekers uit kennisinstellingen een uitstekende mogelijkheid om actief kennis te maken met het werken in het bedrijfsleven. Door de voorgestelde uitwisseling zal het netwerk van de kandidaat verbreed worden. Het hier beschreven onderzoeksprogramma dient dan ook gezien te worden als een aanzet voor een langetermijnsamenwerking tussen de academische onderzoeker en de onderzoekers werkzaam bij de

Aanvraagformulier

Vermeld alle relevante informatie in het formulier. Raadpleeg steeds de toelichting!

industriële partner. In meer algemene zin zal de verbreding van inzichten en dan met name de appreciatie voor de industriële manier van innoveren zijn vruchten afwerpen in acquisitie van externe geldstromen. Dit heeft dan ook een duidelijke meerwaarde voor een wetenschappelijke carrière binnen een technische universiteit waarin kennisvalorisatie door actieve samenwerkingen met het bedrijfsleven steeds belangrijker wordt.

11g. Internationale activiteiten

De kandidaat heeft actieve samenwerkingen met prof. Kazansky (Zelinsky Institute of Organic Chemistry, Moskou), dr. Sychev (Dumanski Institute of Colloid and Water Chemistry), prof. Suk Bong Hong (Hanbat National University, South-Korea), prof. Can Li (Dalian Institute of Chemical Physics, China) en prof. Chao (Hsinchu University, Taiwan).

Mede-organisator van First Workshop on the Application of Microporous and Mesoporous Materials as Catalytic Hosts for Fe, Cu and Co, Scheveningen, Nederland (2005).

Mede-organisator van Roermond Conference on Catalysis (2006).

11h. Overige relevante activiteiten

Deeltijd docent aan de Katholieke Universiteit Leuven (2002-2006).

Bestuurslid Dutch Zeolite Association.

11i. Beurzen en prijzen

VENI beurs (2002) 'Towards a new energy-efficient catalytic process for the production of lower olefins from paraffin feedstock'

11j. Publicaties

Wetenschappelijke tijdschriften (gerefereerd)

1. E.J.M. Hensen, M.J. Vissenberg, V.H.J. de Beer, J.A.R. van Veen, and R.A. van Santen, 'Kinetics and mechanism of thiophene hydrodesulfurization over carbon-supported transition metal sulfides', *Journal of Catalysis* 163 (1996) 429-435.
2. E.J.M. Hensen, G.M.H.J. Lardinois, V.H.J. de Beer, J.A.R. van Veen, and R.A. van Santen, 'Hydrogen-deuterium equilibration over transition metal sulfide catalysts: on the synergetic effect in CoMo catalysts', *Journal of Catalysis* 187 (1999) 95-108.
3. E.J.M. Hensen, H.J.A. Brans, G.M.H.J. Lardinois, V.H.J. de Beer, J.A.R. van Veen, and R.A. van Santen, 'Periodic trends in hydrotreating catalysis: thiophene HDS kinetics over carbon-supported 4d transition metal sulfides', *Journal of Catalysis* 192 (2000) 98-107.
4. E.J.M. Hensen, P.J. Kooyman, A.M. van der Kraan, Y. van der Meer, V.H.J. de Beer, J.A.R. van Veen, and R.A. van Santen, 'The relation between morphology and hydrotreating activity for supported MoS₂ particles', *Journal of Catalysis* 199 (2001) 224-235.
5. M. J. Vissenberg, Y. van der Meer, E. J. M. Hensen, V. H. J. de Beer, A. M. van der Kraan, R. A. van Santen, J. A. R. van Veen, 'The Effect of Support Interaction on the Sulfidability of Al₂O₃- and TiO₂-Supported CoW and NiW Hydrodesulfurization Catalysts', *Journal of Catalysis* 198 (2001) 151-163.

Aanvraagformulier

Vermeld alle relevante informatie in het formulier. Raadpleeg steeds de toelichting!

6. P.J. Kooyman, E.J.M. Hensen, A.M. de Jong, J.W. Niemantsverdriet and J.A.R. van Veen, 'The observation of nanometer-sized entities in sulphided Mo-based catalysts on various supports', *Catalysis Letters* 74 (2001) 49-53.
7. E.J.M. Hensen, T. Tambach, A. Blik, B. Smit, 'Adsorption isotherms of water in Li-, Na-, and K-montmorillonite by molecular simulation', *Journal of Chemical Physics* 115 (2001) 3322-3329.
8. Q. Zhu, E.J.M. Hensen, B.L. Mojet, J.H.M.C. van Wolput and R.A. van Santen, 'N₂O decomposition over Fe/ZSM-5: reversible generation of highly active cationic Fe species', *Chemical Communications* (2002) 1232-1233.
9. M.V. Sychev, R. Prihod'ko, A. Koryabkina, E.J.M. Hensen, J.A.R. van Veen and R.A. van Santen, 'The application of non-hydrothermally prepared stevensites as support for hydrodesulfurization catalysts', *Studies in Surface Science and Catalysis* 143 (2002) 257-265.
10. R. Prihod'ko, M.V. Sychev, E.J.M. Hensen, J.A.R. van Veen and R.A. van Santen, 'Preparation, characterization and catalytic activity of non-hydrothermally synthesized saponite-like materials', *Studies in Surface Science and Catalysis* 142 (2002) 271-278.
11. M. Garcia-Sanchez, P.C.M.M. Magusin, E.J.M. Hensen and R.A. van Santen, 'H₂-D₂ exchange and migration of Ga in HZSM-5 and HMOR zeolites', *Studies in Surface Science and Catalysis* 142 (2002) 959-966.
12. E.J.M. Hensen, V.H.J. de Beer, J.A.R. van Veen and R.A. van Santen, 'A refinement on the notion of type I and II (Co)MoS phases in hydrotreating catalysts', *Catalysis Letters* 84 (2002) 59-67.
13. Q. Zhu, B.L. Mojet, R.A.J. Janssen, E.J.M. Hensen, J. van Grondelle, P.C.M.M. Magusin and R.A. van Santen, 'N₂O decomposition over Fe/ZSM-5: effect of high-temperature calcination and steaming', *Catalysis Letters* 81 (2002) 205-212.
14. P.J. Kooyman, J.G. Buglass, H.R. Reinhoudt, A.D. van Langeveld, E.J.M. Hensen, H.W. Zandbergen and J.A.R. van Veen, 'Quasi in situ sulphidation of CoMo/Al₂O₃ studied using high resolution electron microscopy', *Journal of Physical Chemistry B* 106 (2002) 11795-11799.
15. R. Prihod'ko, M.V. Sychev, I. Kolomitsyn, P.J. Stobbelaar, E.J.M. Hensen and R.A. van Santen, 'Layered double hydroxides as catalysts for aromatic nitrile hydrolysis', *Microporous and Mesoporous Materials* 56 (2002) 241-255.
16. P.W. de Bont, M.J. Vissenberg, E.J.M. Hensen, V.H.J. de Beer, J.A.R. van Veen, R.A. van Santen and A.M. van der Kraan, 'Cobalt-molybdenum sulfide particles inside NaY zeolite? A MES and EXAFS study', *Applied Catalysis A: General* 236 (2002) 205.
17. E.J.M. Hensen and B. Smit, 'Why clays swell', *Journal of Physical Chemistry B* 106 (2002) 12664-12667.
18. R. Prihod'ko, M.V. Sychev, I. Astrelin, K. Erdmann, E.J.M. Hensen and R.A. van Santen, 'Non-hydrothermal synthesis of trioctahedral smectites. Part I. Saponite-like materials', *Russian Journal of Applied Chemistry* 76 (2003) 700-705.
19. E.J.M. Hensen, Q. Zhu, P.C.M.M. Magusin and R.A. van Santen, 'Iron clusters occluded in zeolite ZSM-5 micropores', *Chemistry for Sustainable Development, Khimiya v Interesakh Ustoichivogo Razvitiya* 11 (2003) 31-35.
20. E.J.M. Hensen, L. Coulier, A. Borgna, J.A.R. van Veen and J.W. Niemantsverdriet, 'Silicon-wafer based models for hydrotreating catalysts', *Chemistry for Sustainable Development, Khimiya v Interesakh Ustoichivogo Razvitiya* 11 (2003) 23-30.
21. E.J.M. Hensen, V.H.J. de Beer, J.A.R. van Veen and R.A. van Santen, 'On the sulfur tolerance of supported Ni(Co)Mo sulfide hydrotreating catalysts', *Journal of Catalysis* 215 (2003) 353-357.
22. N. Kachurovskaya, G. Zhidomirov, E.J.M. Hensen and R.A. van Santen, 'Cluster model DFT study of the intermediates of benzene to phenol oxidation by N₂O on FeZSM-5 zeolites', *Catalysis Letters* 86 (2003) 25-31.
23. D.P. Sobczyk, E.J.M. Hensen, A.M. de Jong and R.A. van Santen, 'Low-temperature ammonia oxidation over Pt/g-alumina: the influence of the alumina support', *Topics in Catalysis* 23 (2003) 109-117.

Aanvraagformulier

Vermeld alle relevante informatie in het formulier. Raadpleeg steeds de toelichting!

24. M. Garcia, P.C.M.M. Magusin, E.J.M. Hensen, X. Rozanska, P.C. Thüne, R.A. van Santen, 'Characterization of Ga/HZSM-5 and Ga/HMOR synthesised by chemical vapor deposition of trimethylgallium', *Journal of Catalysis* 219 (2003) 352-361.
25. D.P. Sobczyk, A.M. de Jong, E.J.M. Hensen and R.A. van Santen, 'Activation of ammonia dissociation by oxygen on platinum sponge studied with Positron Emission Profiling', *Journal of Catalysis*, *Journal of Catalysis* 219 (2003) 156-166.
26. Borgna, E.J.M. Hensen, L. Coulier, M. de Croon, J. Schouten, J.A.R. van Veen, J.W. Niemantsverdriet, 'Intrinsic thiophene hydrodesulfurization kinetics of a sulfided NiMo/SiO₂ model catalyst: Volcano-type behavior', *Catalysis Letters* 90 (2003) 117-122.
27. E.J.M. Hensen and J.A.R. van Veen, 'Encapsulation of transition metal sulfides in faujasite zeolite for hydroprocessing applications', *Catalysis Today* 86 (2003) 87-109.
28. Borgna, E.J.M. Hensen, J.A.R. van Veen and J.W. Niemantsverdriet, 'Intrinsic kinetics of thiophene HDS over a NiMo/SiO₂ model catalyst', *Preprints of Symposia – American Chemical Society, Division of Fuel Chemistry* 48 (2003) 603-604.
29. E.J.M. Hensen, Q. Zhu and R.A. van Santen, 'Extra-framework Fe-Al-O species occluded in MFI zeolite as the active species in the oxidation of benzene to phenol with nitrous oxide', *Journal of Catalysis – Priority Communication* 220 (2003) 260-264.
30. E.J.M. Hensen, Q. Zhu, M.M.R.M. Hendrix, A.R. Overweg, P.J. Kooyman, M.V. Sychev and R.A. van Santen, 'Effect of high-temperature treatment on Fe/ZSM-5 prepared by chemical vapor deposition of FeCl₃: I. Physicochemical characterization', *Journal of Catalysis* 221 (2004) 560-574.
31. Q. Zhu, R.M. van Teeffelen, R.A. van Santen and E.J.M. Hensen, 'Effect of high-temperature treatment on Fe/ZSM-5 prepared by chemical vapor deposition of FeCl₃: II. Nitrous oxide decomposition, selective benzene oxidation to phenol and selective reduction of nitric oxide by iso-butane', *Journal of Catalysis* 221 (2004) 575-583.
32. Borgna, E.J.M. Hensen, J.A.R. van Veen, J.W. Niemantsverdriet, 'Intrinsic kinetics of thiophene hydrodesulfurization on a sulfided NiMo/SiO₂ planar model catalyst', *Journal of Catalysis* 221 (2004) 541-548.
33. R. Prihod'ko, E.J.M. Hensen, M. Sychev, I. Stolyarova, T.E. Shubina, I. Astrelin and R.A. van Santen, 'Physicochemical and catalytic characterization of non-hydrothermally synthesized Mg-, Ni- and Mg-Ni-saponite-like materials', *Microporous and Mesoporous Materials* 69 (2004) 49-63.
34. B. de Graaf, A. Adreini, E.J.M. Hensen and A. Bliet, 'Selective hydrogen oxidation in a mixture with ethene and ethane using cerium zirconium oxide', *Applied Catalysis A: General* 262 (2004) 201-206.
35. T.J. Tambach, E.J.M. Hensen and B. Smit, 'Molecular Simulations of Swelling Clay Minerals', *Journal of Physical Chemistry B* 108 (2004) 7586-7596.
36. E.J.M. Hensen, Q. Zhu, P.-H. Liu, K.-J. Chao and R.A. van Santen, 'On the role of aluminum in the selective oxidation of benzene to phenol by nitrous oxide over iron-containing MFI zeolites: an in situ Fe XANES study', *Journal of Catalysis* 226 (2004) 466-470.
37. V.B. Kazansky, I.R. Subbotina, R.A. van Santen and E.J.M. Hensen, DRIFTS study of the chemical state of modifying gallium ions in reduced Ga/ZSM-5 prepared by impregnation: I. Observation of gallium hydrides and application of CO adsorption as a molecular probe for reduced gallium ions', *Journal of Catalysis* 227 (2004) 263-269.
38. A.O. Koryabkina, A.M. de Jong, E.J.M. Hensen and R.A. van Santen, 'Diffusion of linear alkanes and their mixtures in silicalite-1', *Microporous and Mesoporous Materials* 77 (2005) 119-129.
39. Y. van der Meer, E.J.M. Hensen, J.A.R. van Veen, A.M. van der Kraan, 'Characterization and thiophene hydrodesulfurization activity of amorphous-silica-alumina-supported NiW catalysts', *Journal of Catalysis* 226 (2004) 433-446.
40. X. Rozanska, M. Garcia-Sanchez, E.J.M. Hensen and R.A. van Santen, 'A periodic density functional theory study of gallium-exchanged mordenite', *Comptes Rendus* 8 (2005) 509-520.

Aanvraagformulier

Vermeld alle relevante informatie in het formulier. Raadpleeg steeds de toelichting!

41. E.J.M. Hensen, M. García-Sánchez, N. Rane, P.C.M.M. Magusin, P.-H. Liu, K.-J. Chao and R.A. van Santen, 'In situ Ga K edge XANES study of the activation of Ga/ZSM-5 prepared by chemical vapor deposition of trimethylgallium', *Catalysis Letters* 101 (2005) 79-85.
42. Ledenev, R. Prihod'ko, I. Stolyarova, E.J.M. Hensen, J.A.R. van Veen, M. Sychev and V. Goncharuk, 'Influence of the nature of active sites on modification of several inorganic carriers by nickel acetylacetonate', *Kinetics and Catalysis*, in press.
43. E.J.M. Hensen, Q. Zhu, R.A.J. Janssen, P.C.M.M. Magusin, P.J. Kooyman and R.A. van Santen, 'Selective oxidation of benzene to phenol with nitrous oxide over MFI zeolites: 1. On the role of iron and aluminum', *Journal of Catalysis* 233 (2005) 123-135.
44. E.J.M. Hensen, Q. Zhu and R.A. van Santen, 'Selective oxidation of benzene to phenol with nitrous oxide over MFI zeolites: 2. On the effect of the iron and aluminum content and the preparation route', *Journal of Catalysis* 233 (2005) 136-146.
45. V.B. Kazansky, I.R. Subbotina, R.A. van Santen and E.J.M. Hensen, DRIFTS study of the nature and chemical reactivity of gallium ions in Ga/ZSM-5: II. Comparison of catalysts prepared by incipient wetness impregnation and by modification with trimethylgallium', *Journal of Catalysis* 233 (2005) 351-358.
46. V.B. Kazansky, I.R. Subbotina, N. Rane, R.A. van Santen and E.J.M. Hensen, 'On two alternative mechanisms of ethane activation over ZSM-5 zeolite modified by Zn²⁺ and Ga¹⁺ cations', *Physical Chemistry Chemical Physics* 7 (2005) 3088.
47. A.M. Volodin, G.M. Zhidomirov, K.A. Dubkov, E.J.M. Hensen and R.A. van Santen, 'Spin design of iron complexes in Fe-ZSM-5 zeolites', *Catalysis Today*, accepted.
48. J.B. Taboada, E.J.M. Hensen, I.W.C.E. Arends, G. Mul and A.R. Overweg, 'Reactivity of generated oxygen species from nitrous oxide over [Fe,Al]MFI catalysts for the direct oxidation of benzene to phenol', *Catalysis Today*, accepted.

Boekbijdrages

E.J.M. Hensen, 'Hydrodesulfurization catalysis and mechanism over supported transition metal sulfides', ISBN 90-386-2871-4, Eindhoven, 2000.

E.J.M. Hensen, V.H.J. de Beer, and R.A. van Santen, 'Chemistry and reactivity of transition metal sulfides in relation to their catalytic performance' in 'Transition metal sulphides: chemistry and catalysis' (Th. Weber, R. Prins, and R.A. van Santen, Eds.) p.169. Kluwer, Dordrecht, 1998.

A.M. de Jong, E.J.M. Hensen and R.A. van Santen, 'Positron Emission Tomography and Profiling' in 'In-Situ Spectroscopy of Catalysts' (B.M. Weckhuijzen, Ed.) pp. 271-292, American Scientific Publishers, California, 2004.

A.M. de Jong, E.J.M. Hensen and R.A. van Santen, 'Positron Emission Profiling study on the ammonia oxidation reaction' in 'Isotopes in Heterogeneous Catalysis' (Eds.) in press (2006).

E.J.M. Hensen, A.M. de Jong and R.A. van Santen, 'Positron Emission Profiling: a study of hydrocarbon diffusivity in MFI zeolites' in 'Science and Technology – Vol. VIII Adsorption and diffusion in zeolites' (H.G. Karge and J. Weitkamp, Eds.) in press (2006).

Andere publicaties

E.J.M. Hensen and R.A. van Santen, 'Hydrodesulfurization Catalysis', *CatTech* 3 (1998) 86.

E.J.M. Hensen, 'Katalytische omzetting van zwavelhoudende componenten in aardolie', *Chemisch Magazine*, November 1997.

E.J.M. Hensen, 'Procesontwikkeling kan veel efficiënter', Chemisch Magazine, November 1997.

Intentieverklaring loopbaanperspectief Casimir-kandidaat

12. Intentieverklaring loopbaanperspectief Casimir-kandidaat door kennisinstelling

Emiel Hensen is sinds 2001 universitair docent binnen het laboratorium Anorganische Chemie en Katalyse. Hij leidt de experimentele groep rond heterogene katalyse. Wij verwachten dat hij binnen een aantal jaren tenminste kan doorgroeien tot universitair hoofddocent. Daarbij vindt de Technische Universiteit Eindhoven het belangrijk dat hij ook buiten de eigen universiteit actief is. Op onderwijsgebied is de kandidaat als deeltijd docent op de Katholieke Universiteit Leuven aangesteld. Een verbreding van de wetenschappelijke horizon wordt als essentieel gezien voor zijn carrière richting de functie van universitair hoofddocent. De voorgestelde detachering binnen Shell Research and Technology Center Amsterdam in het kader van het Casimir-programma wordt door de Technische Universiteit Eindhoven gezien als een belangrijke stap in het vervolg van zijn carrière.

Emiel Hensen heeft na zijn promotie reeds anderhalf jaar wetenschappelijk onderzoek verricht aan de Universiteit van Amsterdam. Een verblijf binnen SRTCA zou gebruikt moeten worden om een nieuwe onderzoekslijn rond innovatieve materialen op te zetten. In meer algemene zin is kennis over de onderzoekspraktijk binnen de industrie van grote waarde voor de carrièreontwikkeling van de Casimir-kandidaat, onder meer in het kweken van ondernemerszin die essentieel is voor acquisitie van externe onderzoeksprojecten. Met name in een toepassingsgericht gebied als katalyse is dergelijke ervaring van groot belang.

Aanvraagformulier

Vermeld alle relevante informatie in het formulier. Raadpleeg steeds de toelichting!

VERKLARING

Ondergetekenden verklaren dat dit aanvraagformulier naar waarheid is ingevuld.

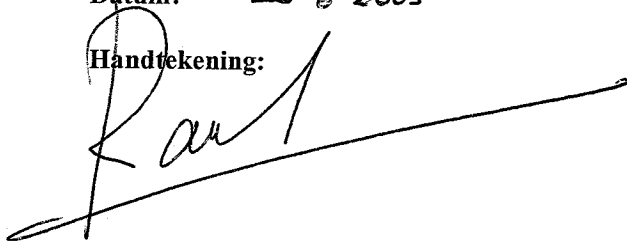
Vertegenwoordiger kennisinstelling

Naam: prof. dr. R.A. van Santen

Plaats: Eindhoven

Datum: 23-8-2005

Handtekening:



Vertegenwoordiger bedrijf:

Naam: prof. dr. J.A.R. van Veen

Plaats: Amsterdam

Datum: 25-8-2005

Handtekening:



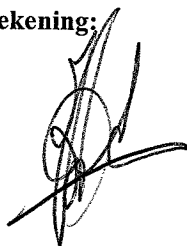
Casimir-kandidaat:

Naam: dr. ir. E.J.M. Hensen

Plaats: Eindhoven

Datum: 30-8-2005

Handtekening:



De aanvragen moeten uiterlijk 16 mei 2005 gescand en elektronisch (in pdf format) bij NWO zijn ingediend. Voor de elektronische indiening dient gebruik te worden gemaakt van het systeem Iris dat via de NWO-website toegankelijk is (www.iris.nwo.nl).

Appendix A: Overeenkomst Casimir Subsidieprogramma

Partijen

1. De Technische Universiteit Eindhoven, een publiekrechtelijke rechtspersoon krachtens artikel 2:1 lid 2 van het Burgerlijk Wetboek juncto art. 1.8 van de Wet op het hoger onderwijs en wetenschappelijk onderzoek, te dezen rechtsgeldig vertegenwoordigd door drs. E.M.G.H. Bernard MPM, directeur bedrijfsvoering van de faculteit Scheikundige Technologie, hierna te noemen de "TU/e"

en

2. Shell Global Solutions International B.V., een besloten vennootschap met beperkte aansprakelijkheid naar Nederlands Recht, statutair gevestigd te Carel van Bylandtlaan 30, 2596 HR Den Haag hierna ook te noemen het "Bedrijf"

In aanmerking nemende dat

- binnen NWO een nieuw subsidieprogramma is opgesteld, genaamd "Casimir", welk tot doel heeft de mobiliteit van onderzoekers te vergroten en meer uitwisseling van onderzoekers tot stand te brengen tussen bedrijven en publieke kennisinstellingen;
- Partijen voornemens zijn om een subsidieaanvraag in te dienen bij NWO voor het Casimir-project ten einde een onderzoeker tijdelijk op een andere plek te laten werken, waaruit nieuwe en te beschermen kennis kan voortkomen;
- volgens de subsidievoorwaarden Partijen principeafspraken moeten maken met betrekking tot de uit het Casimir-project voortvloeiende eigendomsrechten;
- Partijen thans afspraken wensen te maken met betrekking tot de uit het Casimir-project voortvloeiende kennis, alsmede de bescherming daarvan.

Zijn overeengekomen als volgt:

Artikel 1 Definities:

Casimir-Kandidaat: dr.ir. E.J.M. Hensen

Casimir-project: individueel, toegekend project in het Casimir programma 2005 van NWO.

Intellectuele Eigendomsrechten: auteursrechten, octrooirechten, handelsnaamrechten, merkenrechten, databankrechten, kwekersrechten, tekeningen- en modelrechten, chipsrechten, topografie- en halfgeleiderrechten, naburige rechten, alsmede elke andere vorm van wettelijke bescherming van teksten, modellen, tekeningen, technische voortbrengselen en vindingen.

Bestaande Intellectuele Eigendomsrechten: die Intellectuele Eigendomsrechten, die op de datum van toekenning van het Casimir-project in het bezit zijn van een partij, alsmede intellectuele eigendomsrechten die tijdens de duur van het Casimir-project onafhankelijk van en buiten het Casimir-project door een partij afzonderlijk worden verkregen of op andere wijze worden verworven.

Nieuwe Intellectuele Eigendomsrechten: Intellectuele Eigendomsrechten die binnen het Casimir-project worden aangevraagd, verleend, verkregen of op andere wijze worden verworven.

Kennis: kennis, informatie, tekeningen, specificaties, foto's, modellen, processen, procedures, voorschriften, rapporten, publicaties, artikelen, correspondenties, alsmede alle andere technische of commerciële informatie, bedrijfsinformatie onderzoeksinformatie, onderzoekresultaten, gegevens en documenten van welke aard, inclusief mondelinge informatie.

Materialen: stoffelijke zaken, zoals maar niet beperkt tot apparaten.

Bestaande Kennis en Materialen: Kennis en Materialen die op de datum van inwerkingtreding van het Casimir-project in het bezit zijn van partijen, alsmede Kennis en Materialen die tijdens de duur van deze overeenkomst onafhankelijk van en buiten het Casimir-project door partijen afzonderlijk worden verworven of ontwikkeld.

Nieuwe Kennis en Materialen: Kennis en Materialen die tijdens de looptijd van deze overeenkomst en in het Casimir-project worden verworven of ontwikkeld.

Artikel 2 Kennis en Materialen

1. Alle Bestaande Kennis en Materialen die in het kader van het Casimir-project als bedoeld in deze overeenkomst aan de wederpartij ter beschikking worden gesteld, blijven het eigendom van de verstreckende partij.
2. Alle Nieuwe Kennis en Materialen die gedurende het Casimir-project worden verworven, ontwikkeld of op andere wijze worden verkregen, zijn eigendom van de partij wiens medewerker de Nieuwe Kennis en Materialen heeft verworven, ontwikkeld of op andere wijze heeft verkregen.
3. Indien de Nieuwe Kennis en Materialen die gedurende het Casimir-project worden verworven, ontwikkeld of op andere wijze worden verkregen niet slechts aan de medewerkers van één der partijen is toe te schrijven, zijn partijen voor gelijke delen eigenaar van deze Nieuwe Kennis en Materialen.

Artikel 3 Aanvraag, eigendom en instandhouding:

1. Alle Bestaande Intellectuele Eigendomsrechten op Kennis die in het kader van het Casimir-project als bedoeld in deze overeenkomst aan de wederpartij ter beschikking worden gesteld, blijven berusten bij de verstreckende partij.
2. Alle rechten op Nieuwe Kennis en alle aanspraken op uit het Casimir-project voortvloeiende Nieuwe Intellectuele Eigendomsrechten op betreffende Nieuwe Kennis komen in beginsel toe aan
 - (i) de partij wiens medewerker deze Kennis heeft gecreëerd (hierna "Uitvinder") en deze partij is verantwoordelijk voor aanvraag, verkrijging en instandhouding hiervan; echter
 - (ii) indien het Bedrijf dat wenst, is het gerechtigd op eigen naam Intellectuele eigendom te vestigen op Nieuwe Kennis waarvan de TU/e als werkgever van de Uitvinder in kwestie de rechthebbende is onder voorwaarde dat het Bedrijf de TU/e daarvoor een marktconforme vergoeding betaalt, waarbij de TU/e zich verplicht al datgene te doen en die formaliteiten te vervullen die noodzakelijk zijn om de Nieuwe Intellectuele Eigendomsrechten te vestigen in naam van het Bedrijf, de door de TU/E hiervoor gemaakte noodzakelijke kosten zullen voor rekening komen van het Bedrijf. Teneinde de marktconforme vergoeding vast te stellen zullen partijen in gezamenlijk overleg een onafhankelijke derde benoemen die deze prijs vast zal stellen.
3. Indien aanspraken op en het eigendom van uit het Casimir-project voortvloeiende Nieuwe Intellectuele Eigendomsrechten niet aan één der partijen is toe te schrijven zijn zij voor gelijke delen eigenaar van deze Nieuwe Intellectuele Eigendomsrechten en partijen zijn gezamenlijk verantwoordelijk voor aanvraag, verkrijging en instandhouding ervan, met inachtneming van het bepaalde in artikel 4, tenzij het Bedrijf te kennen heeft gegeven enige rechthebbende te willen zijn als bedoeld in artikel 3(2)(ii).

Artikel 4 Vercommercialisering:

1. Het Bedrijf heeft het exclusieve recht om de uit het Casimir-project voortvloeiende Nieuwe Intellectuele Eigendomsrechten op Kennis op commerciële wijze te exploiteren. In het geval dat het Bedrijf niet de (enige) rechthebbende is van de Nieuwe Intellectuele Eigendomsrechten op de Kennis, heeft zij het eerste recht om op nader te bepalen voorwaarden de vercommercialiseringrechten van de TU/e te verwerven. Eén van de voorwaarden bestaat eruit dat het Bedrijf een marktconforme vergoeding zal betalen aan de TU/e.
2. Indien het Bedrijf voor de vercommercialisering van de Nieuwe Intellectuele Eigendomsrechten op de Kennis uit het Casimir-project gebruik wil maken van Bestaande Intellectuele Eigendomsrechten van de Universiteit, kan het Bedrijf een licentie verkrijgen tegen nader te bepalen marktconforme condities.
3. De marktconforme vergoeding zal door een, door partijen nader te bepalen, onafhankelijke derde partij worden vastgesteld.
4. Het is de TU/e te allen tijde toegestaan om de uit het Casimir-project voortvloeiende (Nieuwe) Kennis en/of Materialen te gebruiken voor onderwijs, onderzoek en andere wetenschappelijke doeleinden, met inachtneming van de geheimhoudingsverplichtingen inzake confidentiële Bestaande Kennis en Informatie van het Bedrijf voortvloeiende uit deze overeenkomst.

Artikel 5 Publicaties:

1. Partijen zijn gerechtigd over de resultaten van onderzoek voortvloeiende uit het Casimir-project te publiceren. De publicerende partij stelt de wederpartij in kennis van elke voorgenomen publicatie over het onderzoek. De wederpartij kan binnen 40 (veertig) dagen na ontvangst wijziging verlangen teneinde haar bedrijfsbelangen veilig te stellen.
2. Voldoet de publicerende partij niet aan een verzoek tot wijziging als bedoeld in het vorige lid, dan kan de wederpartij de publicatie gedurende ten hoogste 6 (zes) maanden ophouden door middel van een aangetekend schrijven van die strekking aan de publicerende partij.
3. In het geval de publicerende partij de TU/e is, kan de wederpartij slechts wijzigingen verlangen die geen afbreuk doet aan de wetenschappelijke integriteit van de TU/e.
4. In publicaties waarin de resultaten of andere gegevens uit het Casimir-project worden gebruikt, wordt in de betreffende publicatie naar partijen en het Casimir-project verwezen.

Artikel 6 Vertrouwelijke Kennis:

1. Alle informatie, inclusief maar niet beperkt tot (Bestaande) Kennis die partijen elkaar tijdens het Casimir-project als vertrouwelijk verstrekken alsmede alle Nieuwe Kennis, zal door de ontvangende partij als zodanig worden behandeld en niet worden geopenbaard aan derden zonder de voorafgaande schriftelijke toestemming van de verstrekende partij, echter onverminderd het recht van publicatie onder de voorwaarden als genoemd in artikel 5. Mondelinge informatie welke vertrouwelijk is verstrekt zal door de verstrekende partij schriftelijk worden bevestigd aan de ontvangende partij binnen 30 dagen na mondelinge bekendmaking.
2. Partijen zullen de vertrouwelijke informatie als bedoeld in dit artikel slechts aan die personen binnen hun respectievelijke organisatie ter beschikking stellen voor wie die Kennis noodzakelijk is om de verplichtingen voortvloeiende uit het Casimir-project naar behoren te kunnen vervullen.
3. De verplichting tot geheimhouding van informatie geldt niet of is niet langer van toepassing, wanneer:
 - de informatie algemeen bekend wordt buiten toedoen van de ontvangende partij;
 - de informatie ten tijde van de ontvangst al in het bezit van de ontvangende partij is, hetgeen desgewenst met schriftelijke documentatie aangetoond dient te worden;
 - de ontvangende partij de informatie tevens ontvangt van een onafhankelijke informatiebron, in welk geval de ontvangende partij gehouden is niet te onthullen dat zij de informatie ook heeft ontvangen van de verstrekende partij.
4. De verplichtingen onder dit artikel blijven gelden tot 6 (zes) jaar na de datum van inwerkingtreding van deze overeenkomst.

Artikel 7 Inwerkingtreding van deze overeenkomst:

1. Deze overeenkomst treedt pas inwerking na ondertekening door alle partijen en na definitieve toekenning van de subsidie van het Casimir-project door NWO.
2. In het geval Partijen besluiten om de subsidieaanvraag niet in te dienen, dan wel in te trekken, alsmede in het geval de subsidieaanvraag wordt afgewezen, wordt deze overeenkomst geacht nimmer te hebben bestaan en kunnen Partijen daaraan over en weer geen rechten ontlenen.

Artikel 8 Overige bepalingen:

1. Het is het Bedrijf niet toegestaan, anders dan na schriftelijke toestemming van het College van Bestuur van de TU/e, de naam en/of het beeldmerk van de TU/e en/of de betreffende faculteit, alsmede de namen van medewerkers, te gebruiken voor commerciële uitingen. Aan deze toestemming kunnen voorwaarden worden verbonden.
2. De TU/e zal het onderzoek naar beste vermogen uitvoeren. Zij staat niet in voor de bruikbaarheid van de verkregen resultaten of Materialen noch voor de gevolgen van het gebruik daarvan. Het Bedrijf vrijwaart de TU/e voor alle aanspraken van derden i.v.m. de resultaten of Materialen van het onderzoek.

3. Rechten en plichten uit deze overeenkomst kunnen niet worden overgedragen aan anderen, zonder de voorafgaande schriftelijke toestemming van de wederpartij.
4. Bij faillissement of surséance van betaling van het Bedrijf is de TU/e gerechtigd de overeenkomst door middel van een aangetekend schrijven aan de wederpartij met onmiddellijke ingang op te zeggen, zonder dat jegens die wederpartij enige verplichting tot schadevergoeding ontstaat. Het Bedrijf is gehouden de TU/e zo spoedig mogelijk schriftelijk op de hoogte te stellen indien hij in surséance van betaling of faillissement geraakt.
5. Op deze overeenkomst is het Nederlandse recht van toepassing.
6. Geschillen betreffende deze overeenkomst die niet door partijen tot een oplossing kunnen worden gebracht, worden voorgelegd aan de bevoegde rechter te 's-Hertogenbosch.

Aldus overeengekomen in tweevoud,

Technische Universiteit Eindhoven,
Namens het College van Bestuur

Shell Global Solutions International B.V,

drs. E.M.G.H. Bernard MPM
directeur bedrijfsvoering
faculteit Scheikundige Technologie
Datum:

Naam:
Functie:
Datum:

Ter kennisname:

Casimir-kandidaat

Dr. Ir. E.J.M. Hensen
Datum: