SICORP EU final summary

"Development of New Materials for the Substitution of Critical Metals"

Project acronym	NOVACAM
Project title	Novel cheap and Abundant Materials for
	catalytic biomass conversion
Coordinator of the EU part of the	Emiel Hensen
project (company/organization)	(Eindhoven University of Technology)
Coordinator of the Japanese part of	Wataru Ueda
the project (company/organization)	(Kanagawa University)
Project period	Sept.1, 2013 – Feb.28, 2017
(Start date – End date)	
Project website	www.novacam.eu

Consolidated public summary in English

Title of the project

Novel cheap and abundant materials for catalytic biomass conversion

Catchy title of the project

Developing catalysts for tomorrow's chemical transformations

Objective and Issue

NOVACAM is a joint EU-Japanese project with the goal to develop novel technology to enable the substitution of critical metals in industrial catalysts. Industrial use of biomass feedstock is at an early stage and presents an opportunity to develop the next generation of catalysts that is based on abundant elements. Catalysts are one of the six major uses of critical metals. Many industrial heterogeneous catalysts have been developed empirically, such that the role of critical metals in affecting catalyst performance is not clearly understood yet.

The overarching objective of the project is to construct an innovative science base of novel catalytic technologies to enable the conversion of lignocellulosic biomass to useful and valuable organic chemicals, polymers, and transportation and heating fuels.

The underlying science will develop and demonstrate new principles for achieving excellent catalytic properties by control and manipulation of the composition and structure of solid catalysts made from abundant materials. NOVACAM aims to develop innovative catalysts by applying a "catalysis by design" approach, integrating the complete chain of knowledge from fundamental research to proof of concept.

NOVACAM develops catalysts using non-critical elements for the conversion of biomass to chemicals and fuels and targets to establish a solid basis for knowledge-based catalytic technology involving cheap and abundant elements. The focus is on lignocellulosic biomass as it will be possible to supply chemicals without adversely impacting land and other resources which are needed for food production. Specifically, NOVACAM uses a "catalysis by design" approach to formulate the requirements for inorganic catalyst systems to speed up different steps relevant to upgrading of biomass. These nanoscale insights are then used to develop novel catalysts based on abundant elements and validated in three proofs of concept studies at laboratory scale to convert cellulose/sugar feedstock into fuels and chemicals. In this way, the extensive knowledge base acquired in catalysis research will be employed to design novel inorganic catalytic systems.

NOVACAM brings together seven academic partners, Eindhoven University of Technology (The Netherlands), Kanagawa University (Japan), Cardiff University (United Kingdom), Instituto Technologia Quimica (Spain), Hokkaido University (Japan), Tokyo Institute of Technology (Japan) and Chiba University (Japan), who combine excellence in catalysis research with a long-standing tradition in mission-driven research in collaboration with industry. Knowledge Transfer Network is UK's innovation network and responsible for dissemination, exploitation and training within the NOVACAM consortium.

The work in NOVACAM is organized in two technical work packages, complemented by two work packages dedicated to dissemination, exploitation and training and to project management. The work plan is structured around developing the basic chemistry that underlies proof of concepts. The outcomes of the project are a combination of new knowledge in the catalysis domain and proof of concepts in which lignocellulosic biomass is converted into valuable products by novel processes that do not rely on noble metals.

Through the intensive collaboration between EU and Japanese partners and the "Catalysis by Design" approach, new chemistry has been developed in the area of

biomass upgrading. The gained insights are currently being explored in a proof of concept setting concerning three principle routes:

- 1. Upgrading of cellulose to γ -valerolactone (GVL) by novel non-noble catalysts
 - a. Identification of non-critical metal catalysts based on Cu, Fe and Ni and combinations thereof for the vapor or liquid phase hydrogenation of levulinic acid to GVI
 - b. Exploration of support effects on non-critical metal catalysts to boost the activity in levulinic acid hydrogenation.

2. Upgrading of sugars to platform molecules

- a. Novel catalytic chemistry has been developed for the conversion of cellulose and glucose into platform chemicals. New catalytic materials include phosphated titania, cheap bulk oxides and tailored Lewis-acid base compounds. The mechanism of the underlying chemistry was resolved by a combination of quantum-chemical calculations and in situ spectroscopy.
- b. Novel crystal structured metal oxide catalysts with molecular nanowire form and with porosity have been developed on the basis of group V and VI elements.
- c. A new catalyst for the oxidative dehydrogenation of lactic acid has been developed.

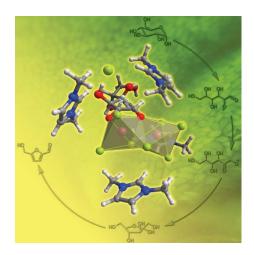
3. Aqueous phase reforming for hydrogen generation

a. The catalytic activity of doped graphenes has been evaluated for the aqueous phase reforming of glycerol, being the B-doped G the most active catalyst in the series.

The project outcomes are derived from the complementary expertise in the field of innovative catalyst research between the academic partners. With the coordinated cooperation, the two consortia shared the same goals, building on each other's expertise through exchange of academic personnel and joint project meetings, conferences and webinars. Especially, the exchange of young researchers such as PhD students, postdocs and young staff members has a positive effect on their development.

NOVACAM led to a high level of scientific output: more than 30 papers were published in peer-reviewed scientific publications, many of which were joint between EU or Japanese groups and several joint EU-Japanese. The number of conference

contributions is higher than 50; participation in these conferences proved to be important to enhance the contact between the project partners. The project has also led to 6 PhD theses, 3 at the EU and 3 at the Japanese side.



Caption: NOVACAM develops catalysts using non-critical elements for the conversion of biomass to chemicals and fuels and targets to establish a solid basis for knowledge-based catalytic technology involving cheap and abundant elements.

Short descriptive: The NOVACAM project is a fundamental research project coordinated by Eindhoven University of Technology in the EU and by Kanagawa University in Japan. It associated 8 partners. The project started on 01.09.2013 and lasted 42 months. EU grant amounted to €1,786,842.00 and JST grant amounted to ¥191,892,000.

Consolidated public summary in Japanese

研究課題名

バイオマス変換のための普遍元素触媒

<u>キャチフレーズ</u>

新固体触媒開発一明日の化学変換のために

研究概要

NOVACAM は、工業触媒で多用される希少元素を代替する新しい技術を開発することを目的とした日本-EU の合同研究プロジェクトである。バイオマス原料を工業利用

する動きに連動して普遍元素を基剤とした次世代触媒を生み出す取り組みである。希少元素は触媒分野で 6 番目に多く使われ、その機能の高さを利用して多くの工業触媒が成立してきたが、本プロジェクトでは革新的な触媒技術創出を進め、普遍元素基盤の触媒を生み出す。これによりリグノセルロースの様なバイオマスを価値ある有機化合物、高分子、燃料へと変換できるようにする。これを達成するために必要な基本科学は固体状態の触媒の元素構成や構造を制御することにあると考え、そのための新しい原理を構築する。すなわち NOVACAM は「触媒作用設計」で触媒に構成元素的革新を起こし、この基本を概念実証につなげる。

NOVACAMは、普遍元素についてのこれまで培われた触媒化学知識を基本に新たな方法論を投入し、バイオマス、特にリグノセルロースを対象に化学変換する触媒を開発する。リグノセルロースのようなバイオマスを選択する理由は環境や食料に影響が少ないバイオ資源であるためである。しかしながら、これを反応物とする場合、その化学的特質から複数の反応段階を経て目的の生成物に至るため、触媒には様々な機能を保有することが求められる。NOVACAMはそれゆえ「触媒作用設計」を必要とする。すなわち、バイオマス変換による化学物質や燃料合成の鍵となる反応を3種類に別け、それぞれに普遍元素間のナノスケールでの協働をもとにした新規触媒を生み出す。このようして展開される普遍元素触媒は他の多くの化学反応へと応用されることになる。

NOVACAM は、7 学術機関、すなわち日本側から神奈川大学、東京工業大学、千葉大学、北海道大学、そして EU 側からアイントホーベン工科大学(オランダ)、カーディフ大学(英国)、化学技術院(スペイン)が共同参画してできており、触媒研究の知識と経験を結集し、企業の意見を取り入れながら研究を進める体制となっている。加えて、広報、人材開発、研修を目的に英国の機関の参画を得ている。

NOVACAM は、2つの研究パッケージと2つの広報、マネージメントパッケージを 擁している。前者は概念実証の基礎となる触媒物質化学を展開するもので、これによ り希少元素を使わない新しいリグノセルロースバイオマス利用プロセスを実現するた めの新しい触媒化学と概念実証の総体を生み出すことを狙っている。

強力で活発な日本-EU パートナー間での研究協力を通して、以下の 3 つのバイオマス利用触媒のための新しい化学が成果として生まれ、概念実証に向けた取り組みが進んでいる。

- 1. 普遍元素触媒によるセルロースから v-バレロラクトン合成
 - a. 普遍元素の典型である Cu、Fe、Ni の混合金属触媒の開発とレブリン酸の気相、液相水素化による γ-バレロラクトンの高収率合成
 - b. Cu、Fe、Ni の混合金属触媒と担体相互作用による活性向上効果
- 2. 糖のプラットフォーム分子への変換

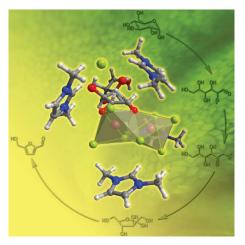
- a. セルロースやグルコースをプラットフォーム分子に変換する新規触媒化学を 開発した。触媒はリン酸により表面修飾された酸化チタンが代表格で、普遍元素の集積効果が出ていて、水中で働く。他に、表面酸—塩基ペア導入を意図した複合酸化物が挙げられる。触媒の性能解析を量子化学計算や表面吸着物質解析により進め、触媒の高性能化を図った。
- b. V族 VI 族の元素から全く新しい複合酸化物分子状ワイヤー構造物や新規細孔 構造を持った金属酸化物を創出し、プラットフォーム分子合成用の新しい固体 触媒へと展開した。
- c. 乳酸を酸化脱水素する複合酸化物を見いだした。

3. 水中リフォーミングによる水素合成

a. グリセロールをモデル反応物とした水中リフォーミングによる水素合成に対してホウ素をドープしたグラフェン (炭素) 触媒を開発した。

これらのプロジェクト成果は日本-EU の触媒研究者が補完的に研究協力した結果の 賜物である。また、同じゴールを目指し、研究者の相互訪問、共同会議、ウェビナー を頻繁に持ち、加えて若い PhD 学生やポスドク、スタッフが相互に移動し、それぞれ で研究実施するなどの結果が生み出したものである。

NOVACAM は、高い学術レベルの成果を発表している。それは高いレベルの学術雑誌で30報以上の発表に及び、そしてその多くが国際共著ないしは国内間研究者共著である。会議発表は50以上に及び、また会議参加はプロジェクトに参画する研究者間の協力をさらに促進した。プロジェクト期間中、日本、EU 双方でそれぞれ3名、合計6名の博士が誕生した。



図表題: NOVACAM は、普遍元素からなる触媒を構築する新たな基本方法論を展開し、バイオマス、特にリグノセルロースをプラットフォーム分子に化学変換する触媒を開発する。

プロジェクト概要: NOVACAM プロジェクトは日本側北海道大学(当初)とアイントホーベン工科大学(オランダ)間で成案させ、2013年9月1日に開始し、最終的に8機関が参画して、42ヶ月間活動を実施した。