

## Danske perspektiver indenfor Røntgen- og neutronstrålingsområdet.

### Elementer til en strategi på vej mod 2025

#### Baggrund for strategi rapporten

For at forstå egenskaberne af avancerede materialer og biologiske systemer er det nødvendigt at opnå et detaljeret kendskab til systemernes struktur og dynamik på alle relevante længdeskaler, herunder ikke mindst den molekylære. Dette er en nødvendig forudsætning for de teknologiske og videnskabelige fremskridt, som danner grundlaget for nye, funktionelle materialer eller farmaceutiske produkter. To slagkraftige teknikker fra forskerens værktøjskasse til dette formål er røntgen- og neutronstråling. Begge teknikker er inde i en dramatisk udvikling i disse år, hvor nye muligheder hele tiden opstår på grund af store tekniske fremskridt, både i kilderne, i deres instrumentering og i dataanalysen. Danske forskergrupper er helt i front på området. Der er en stor og voksende brugerbase i Danmark, hvor i skrivende stund 500 forskere er afhængige af disse teknikker for deres forskning. Derudover er der adskillige af de danske grupper, der ikke kun benytter teknikkerne som et værktøj, men medvirker til at sætte dagsordenen for den tekniske udvikling inden for deres område.

Det er for kostbart for Danmark at opføre egne faciliteter af denne art. Derfor hviler de danske forskergruppers succes på et velfungerende internationalt samarbejde, der sikrer grupperne adgang og medindflydelse, både på de internationale faciliteter og på de større landes nationale faciliteter. Adgangen til internationale faciliteter sikres gennem medlemskaber som forhandles på Regeringsniveau. P.t. er Danmark på neutron området medvært for opbygningen af European Spallation Source (ESS) i Lund, og medlem af Institut Laue-Langevin (ILL) i Grenoble. På Røntgen-området er vi partnere i European Synchrotron Radiation Facility (ESRF) i Grenoble og European X-FEL (XFEL.EU) i Hamborg. Disse er alle på verdensplan førende faciliteter.

Derudover har de danske forskergrupper indgået separate aftaler med to af de absolut bedste nationale laboratorier, MAX IV i Lund og PSI i Villigen, i Schweiz. Mod at vi bidrager med viden, udstyr og personale får vi en generel adgang til de to faciliteter, hvilket er afgørende både for at kunne imødekomme den store efterspørgsel og for at uddanne næste generation af forskere. I alle tilfælde gælder, at måletid på faciliteterne opnås gennem en åben konkurrence med peer review, så kun den bedste videnskab får adgang.

To tidligere strategier for området blev udarbejdet i hhv. 2004 og i 2011. Siden den sidste er udkommet, har der været en hastig udvikling både på den danske og den internationale scene:

- ESS er gået ind i konstruktionsfasen med et dansk bidrag på ca 2 Mia. Kr. En lang række aktører, herunder ministeriet, regioner, Dansk Industri og universiteter har været engageret i en diskussion om hvordan vi kan maksimere udbyttet af denne satsning mht. forskning, industriel udnyttelse og vækst i samfundet. Dette har ledt til udarbejdelsen af en [National strategi for ESS indsatsen](#). Denne foreslår bl.a. oprettelsen af 5-7 ESS fyrtårne.
- Den største brugerskare er fortsat tilknyttet brugen af synkrotroner til frembringelse af Røntgenstråling. Et nyt acceleratorkoncept har ført til opførelsen af MAX IV i Lund (indviet i 2016) med stærkt forbedrede specifikationer. Konceptet har efterfølgende ledt til planer om opgradering af næsten af alle synkrotroner, herunder ESRF i 2020.

- Forhåbningerne til fri-elektron laser teknologien som en ny Røntgenkilde er indfriet. På den baggrund opføres der nu verden over dedikerede kilder. I Europa drejer det sig om SwissFEL, der blev åbnet ultimo 2016, og ikke mindst [XFEL.EU](#), der fra indvielsen i 2017 og mange år fremover vil være den førende facilitet. Med disse faciliteter åbnes der et helt ny forskningsfelt.

## Omfang af og formål med strategi rapporten

Det primære formål med strategien er at optimere den danske brug af de internationale faciliteter inden for neutron, hård Røntgen og XFEL områderne. Den opdaterer den nuværende strategi med særlig fokus på at

- Fremskrive brugen af diverse teknikker og faciliteter indtil 2025
- Prioritere blandt mulige internationale medlemskaber
- Anbefale de mest effektive aktiviteter rettet mod adgang til andre faciliteter i udlandet
- Sikre, at danske grupper via instrumentudvikling, data analyse centre mm fortsat kan være med til at sætte dagsordenen inden for området
- Sætte rammerne for disse muligheder og sikre det økonomiske grundlag, som muliggør at de danske forskere også i fremtiden holder sig i front

Vi håber, at rapporten vil tjene til at strukturere og kvantificere den løbende debat med ministeriet om bl.a. medlemskaber, ESS medværtskab og følgeforskning.

På Røntgensiden er der en afgrænsning til ikke at omfatte brugen af UV-stråling og særlig blød Røntgenstråling, motiveret bl.a. af ønsket om en klar grænseflade til [ASTRID-II](#) på AU. Andre nationale brugerfaciliteter såsom 3D imaging centeret på DTU inddrages heller ikke.

Strategien forholder sig videre primært til den akademiske brug af de internationale faciliteter. Der er en naturlig politisk bevågenhed omkring den industrielle brug, som vokser i disse år, og hvor nye initiativer tjener til at nedbryde de barrierer, der har været. En evt. udredning af disse perspektiver vil kræve en særskilt rapport, med et andet panel.

## DANSCATT og det nuværende forbrug



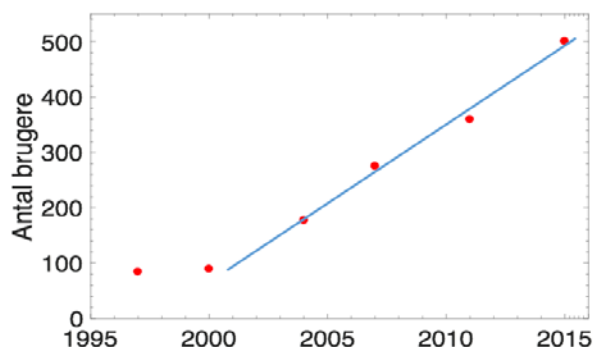
*DANSCATTs årsmøde 2016 havde over 200 deltagere, heraf langt hovedparten studerende og yngre forskere*

De danske synkrotronstrålingsbrugere var i perioden 1996-2007 samlet i instrumentcenteret DANSYNC, mens neutronbrugerne i 2001-2007 var samlet i det daværende DANSCATT instrumentcenter. Fra og med 2008 har begge grupper været samlet i DANSCATT, hvilket såvel videnskabeligt som organisatorisk har vist sig at være en klar fordel. DANSCATT er fra starten af 2013 overgået fra at være et center under FNU til at blive finansieret fra ministeriet. Samtidigt er XFEL aktiviteterne vokset og er blevet integreret i miljøet.

DANSCATT's formål er at muliggøre og optimere de danske anvendelser af de internationale neutron og Røntgenstrålings forskningsinfrastrukturer. Herunder

- at facilitere adgangen til faciliteterne ved at sikre rejsemidler til at udføre forsøg på disse, når måletiden er blevet allokeret baseret via peer review.
- at facilitere adgangen til vitale internationale forskningsinfrastrukturer, hvortil der ikke betales et nationalt medlemsbidrag, via "in kind" bidrag
- at skabe synlighed, fælles vision og eksternt repræsentation, som muliggør at danske interesser med hensyn til måletid, og udvælgelse af beamlinier og instrumenter på faciliteterne tilgodeses bedst muligt.
- at sikre et stærkt netværk mellem de danske brugere, inkluderende industrien.
- at virke som et kontakttled til ministeriet i relation til løbende strategiske diskussioner.

DANSCATT havde ultimo 2015 tilknyttet 501 forskere, fordelt på 110 lektorer og professorer, 95 post docs, 167 PhD studenter, 99 M.Sc. studerende samt 30 TAP'er. Disse fordeler disse sig på et meget bredt udsnit af de teknisk, naturvidenskabelige og sundhedsvidenskabelige discipliner. Brugermiljøerne står særlig stærkt indenfor materialefysik, materialekemi og især struktur-biologi med ca. 150 brugere. I 2016 blev der publiceret ~240 artikler i peer reviewed journaler og bøger. Udviklingen i det samlede danske brugermiljø er illustreret på figuren til højre. Tallene er konsistente med en lineær udvikling over de sidste 14 år, svarende til en tilgang af 30 nye brugere per år. De sidste par år har stigningen været 50 brugere/år, svarende til 10%.



Synkrotron	#rejser	Neutron facilitet	#rejser	Fri-elektron laser facilitet	#rejser
MAX-lab, S	176	SINQ, CH	74	LCLS, US	27
ESRF, Fr	110	ILL, Fr	51	SACLA, JP	3
DESY/ EMBL, D <sup>1</sup>	86	LLB, F	16		
SPring-8, JP	32	ISIS, UK	14		
Diamond, UK	32	SNS, US	13		
SLS, CH	24	BER-II	12		
APS, US	23	FRM-II	12		
Andre <sup>2</sup>	53	Andre <sup>2</sup>	19		
<b>Total 2015</b>	<b>536</b>	<b>Total</b>	<b>211</b>	<b>Total</b>	<b>30</b>
<b>Total 2014</b>	<b>481</b>		<b>84</b>		<b>15</b>

Fordelingen af anvendelsen i 2015 er angivet i tabellen herover – i enheder af antal målrejser<sup>3</sup>. Der differentieres mellem synkrotron, neutron og fri elektron røntgenlaser målinger og mellem de vigtigste infrastrukturer. Den kommercielle brug er ikke medtaget. Markeret med blå er de faciliteter, hvor Danmark er partner eller har indgået en generel samarbejdskontrakt.

<sup>1</sup> Danske strukturbiologer får via medlemskab i EMBL tilgang til målinger på synkrotronen PETRA-III.

<sup>2</sup> Andre synkrotron kilder: BESSY, SOLEIL, Elettra, ANKA, CHESS, ALS, CLS, KEK, og ALBA. Andre neutron kilder: J-PARC, ANSTO, NIST, og BNC.

<sup>3</sup> Det egentlige forbrug af måletid er generelt lidt højere, da visse rejser ikke registreres. Men antallet af rejser er den parameter, der er lettest at monitorere for DANSCATTs sekretariat.

Den danske anvendelse af ESRF og ILL er præget af en høj succesrate mht. ansøgninger og deraf følgende overforbrug. Medlemskabet sikrer af de danske forskere får dækket de fleste rejseudgifter. Placeringen af MAX-lab i Lund (nu erstattet af MAX IV) og SINO på PSI øverst i tabellen vidner om et udtalt behov for samarbejdskontrakter med relevante nationale kilder til supplement af de internationale medlemsskaber. Der var i 2016 ingen fri elektron hård Røntgen-kilder i Europa og kun ganske få på verdensplan. Det er på den baggrund imponerende, at de danske forskere allerede har placeret sig i fronten internationalt.

Internationale reviews har ved flere lejligheder dokumenteret at styrken og kvaliteten af den danske forskning inden for området såvel som vores videnskabelige produktivitet er signifikant højere end i andre Europæiske lande, både generelt og set i forhold til størrelsen af vort bidrag. Der er blevet peget på organisationen i DANSCATT og den danske styrkeposition indenfor metodeudvikling som medvirkende årsager.

## **Forskningsindsatsen 2017-2025**

Brugergrupperne kan groft taget deles ind i tre hovedgrupper: den biologiske strukturforskning, materialeforskningen, og nye områder som medicin, arkæologi mm.

### **Strukturbiologi**

Biologiske molekylers tredimensionelle struktur og dynamik danner grundlaget for alle livsprocesser, og indsigt i disse udnyttes i bl.a. lægemiddelforskning og bioteknologi. Biologiske molekyler adskiller sig fra andre materialer ved at være sammensat af overvejende lette atomer i meget store, fleksible molekyler i vandigt miljø, hvilket gør eksperimentelle studier og fysisk-kemisk modellering meget udfordrende. Røntgenstudier som især makromolekylær krystallografi (MX) og småvinkelspredning (SAXS) har over årtier udgjort hjørnesten i strukturbiologisk forskning, og har været båret af adgang til europæiske synkrotronstrålingsfaciliteter. Dette vil fortsætte med uformindsket styrke. MAX IV synkrotronen vil snart udgøre en central facilitet for danske brugere lige som Petra-III i Hamborg - begge i geografisk nærhed, hvilket er af betydning for bl.a. landtransport af sensitive prøver og umiddelbar tilgængelighed. ESRF vil opretholde en central strategisk betydning i udvikling af nye metoder og teknologier med stærke bidrag fra bl.a. EMBL laboratorier og nationale/private konsortier. Ligeledes vil øvrige faciliteter såsom Diamond nær Oxford, Soleil nær Paris, BESSY i Berlin, og Swiss Light Source nær Zürich have stor betydning som supplerende/komplementerende udbud af måletid, metoder og teknologier. Synkrotron-faciliteter er i stigende grad automatiserede, hvilket gør det muligt at måle på teste væsentligt flere prøver end tidligere og dermed markant at øge omfanget, detaljeringsgraden og præcisionen i strukturbiologi. Desuden tillader det fjernbetjent adgang, som også øger tilgængeligheden. Dog vil avancerede eksperimenter af unik karakter, såsom tilkobling af laserkontrolleret fotoaktivering af tidsopløste, biokemiske processer, fordrer direkte adgang og længere ophold på synkrotronstrålingsfaciliteter.

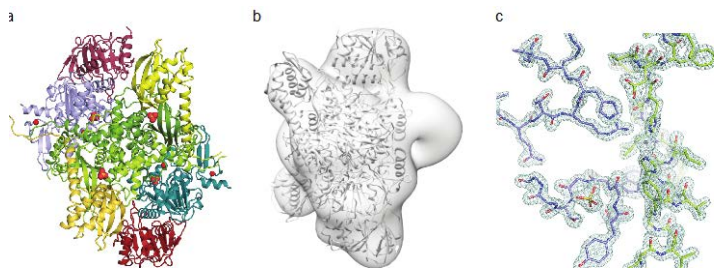
XFEL.EU åbner for helt nye muligheder for studier af biologiske molekylers struktur dynamik. Det får givetvis stor videnskabelig og strategisk betydning. European XFEL har en dedikeret biologi infrastruktur etableret gennem XBI brugerkonsortiet, som kan anvendes af danske forskere på basis af passende "scientific cases". XFEL kilder i USA, Schweiz og Japan vil også kunne få betydning for konkrete projekter.

Undersøgelserne med Røntgen komplementeres i stigende grad af især cryo-elektron mikroskopi (cryo-EM), og faciliteter som ESRF og Diamond udbyder adgang til cryo-EM på lignende vilkår som synkrotronstråling, dvs. med kvalificerende, præliminære studier. Dette understøttes af bl.a. INSTRUCT medlemskab (under ESFRI), og facilitetsadgang og infrastruktur i EU regi under Horizon 2020 (iNEXT). Det vil på fordelagtig vis også kunne rummes i nationale strategier, hvor fx Danmark kan understøtte danske brugere ved adgang til nyetablerede, danske faciliteter i Aarhus og København (EMBION forslaget på roadmap).

Med ESS i horisonten vil der i de kommende år opstå et stigende behov for adgang til neutronkilder. Neutronkrystallografi på ESS-NMX instrumentet forventes at opnå stor produktivitet i dansk strukturbiologi, i akademisk såvel som privat sektor, til udredning af bl.a. enzymatiske mekanismer og termostabilitet og til

udvikling af lægemidler. Det forventes endvidere at neutronbaseret småvinkelspredning (SANS) og reflektometri (NR), både på ILL og det kommende ESS vil forblive essentielle teknikker, suppleret af mere specialiserede neutronbaserede teknikker til at se på dynamik i relevante tidsvinduer og længeskalaer af biologiske systemer.

Neutronstudier i strukturblogi vil udvikle sig i tæt synergi med især røntgenstudier, EM, Nuclear Magnetic Resonance (NMR), Atomic Force Microscopy (AFM), og fluorescensmikroskopi/spektroskopi. Original, ny forskning på cellulære strukturer og deres dynamik, hvor disse synergier kan udnyttes på unik vis gennem ESS kildens verdensførende specifikationer, bør ansøres, da det potentielt udgør en meget værdifuld niche i strukturblogisk forskning.



*Eksempel på studie: Phosphonatlyase enzymkomplekset nedbryder kulstof-fosfor bindinger og er centralt for nedbrydning af organisk fosfat og bl.a antibiotika. Komplekset består af flere sammenkoblede enheder. Strukturen er bestemt ved en kombination af synkrotron arbejde og elektronmikroskopi. a) og b) viser den overordnede struktur af komplekset studeret med hhv. Røntgen og elektroner, mens c) viser en detalje omkring et reaktionscenter i komplekset. Fra Seweryn et al. & Brodersen, Nature 2015.*

## Materialeforskningen

En stor del af de teknologiske fremskridt inden for såvel hårde som bløde materialer er knyttet til udviklingen af nye avancerede materialer med specielle egenskaber. Disse udvikles på basis af en dyb og mange-faceteret forståelse af materialernes struktur og funktion. Brugen af de internationale neutron og Røntgen-faciliteter er på nuværende tidspunkt blevet et særdeles vigtigt og bredt anvendt værktøj. Internationale såvel som danske strategirapporter peger da også på betydningen af disse faciliteter som en integreret del af løsningen på en række samfundsproblemer, herunder smart og grøn energi, klima, forurening, transformativ digitale teknologier, forbedring af produktiviteten og teknologier til sundhedssektoren. Videre har faciliteterne en vigtig rolle at spille i relation til nye såkaldt disruptive teknologier, såsom 3D printning og kvante-computing.

Indenfor de næste 10 år vil ibrugtagningen af ESS, tilgængeligheden af fri elektron laser Røntgen kilder og opnormeringen af synkrotronkilderne til "ultimate storage rings" hver for sig få stor betydning for bruger miljøerne. Tilsammen vil de tre nye komplementære faciliteter i Lund og i Hamburg have en transformativ karakter. Vi vil ikke bare radikalt kunne forbedre opløsningen og hastigheden af eksisterende målemetoder. I tillæg vil et nyt landskab af muligheder åbne sig, med nye brugermiljøer, nye teknikker, og nye brugsmønstre, herunder mail-in og robotassisterede tilgange til meget store forsøgsserier. Fra dansk side er et gennemgående tema en vision om at studere 'real materials under real conditions in real time'.

Den nationale ESS strategi<sup>4</sup> prioriterer oprettelsen af fyrtårnsmiljøer, som med afsæt i ESS kan sikre den nødvendige kapacitetsopbygning på områder af strategisk betydning. Fyrtårnene skal sikre videnskabelig

---

<sup>4</sup> Udformet af et panel med medlemmer fra forskningsministeriet, AU, KU, DTU, TI, DI, Innovationsfonden, Region Hovedstaden, Københavns Kommune, EVM, Novo, Arla Food, og Haldor Topsøe.

excellence, brobygning til dansk forskning og erhvervsliv og tjene til at give synlighed til den samlede danske indsats. Indenfor materialeområdet peges der i rapporten på fire mulige fyrtårnsmiljøer. Disse præsenteres herunder som eksempler på bredden og højden i den danske forskning

- *Imaging af hårde materialer.* Hårde materialer som metaller, funktionelle keramikker, byggematerialer eller materialerne i den danske undergrund er alle opbygget hierarkisk med strukturer på mange længdeskalaer. En stor forskningsmæssig udfordring handler om at forstå og manipulere materialernes struktur på alle de forskellige skalaer. Hidtil er udvikling og optimering af de hårde materialer i stor udstrækning sket gennem en dyr og langsommelig trial-and-error proces med gentagen syntese, forarbejdning og test på slutproduktet. Det ville være en fundamental game changer at kunne optimere nye materialer ved hjælp af computermodeller. For at kunne opstille og teste sådanne modeller er det afgørende at kunne 'se' ind i materialerne, i 3D, under de processer, de virker i. Ved at kombinere ESS og MAX IV, bliver det muligt at lave sådanne film af materialernes indre liv på de relevante længde- og tidsskalaer. Miljøet er involveret i DanMAX beamlinien og det lokale 3D imaging center.
- *Polymerer og 'bløde' materialer.* Disse udgør en stor gruppe af materialer med meget brede anvendelsesmuligheder. De omfatter både naturlige biopolymerer, der f.eks. indgår i planter og papir, og syntetiske stoffer som for eksempel polystyren, der findes i en række plast- og isoleringsmaterialer. Afgørende for forskningen på dette område er at kunne afkode strukturen af de biologiske materialer for derved at kunne udvikle nye funktionelle materialer med attraktive egenskaber. ESS vil med en unik følsomhed over for brintatomer blive et afgørende redskab til at afkode de molekylære nanostrukturer og deres dynamik. Fokus vil derfor være på at forstå sammenhængen mellem polymer-molekylers kemi og molekylære struktur, og molekylernes respons på mekaniske og elektriske påvirkninger. Et vigtigt anvendelsesområde er selv-ansamlende molekyler, herunder medicinske bærermaterialer til additiver og alt fra motorolie til tandpasta, hvor funktionen er, at materialet ikke er for letflydende.
- *Magnetisme og korrelerede elektronsystemer.* Forskningsfeltet beskæftiger sig med undersøgelse af grundlæggende kvantemekaniske effekter i materialer. Et vigtigt fokuspunkt er fysikken bag kvantecomputere. Et andet fokuspunkt er magnetismes afgørende indflydelse på funktionaliteten af en række materialer, såsom høj-temperatur superledere - der har potentiale til at revolutionere energi-, transport- og sundhedssektorerne - og multiferroiske og magnetoelektriske materialer, der forventes at lede til ny IT-teknologi. Et sidste fokuspunkt er undersøgelser af nye ferromagnetiske materialer og nanopartikler baseret på lettilgængelige grundstoffer som mangan og jern, som alternativ til sjældne jordarter. Neutronspredning er af afgørende betydning for at belyse alle disse emner, da neutroner giver unik information om et givet materiales strukturelle og dynamiske magnetiske egenskaber. Miljøet er desuden ledende partner i konstruktionen af ESS spektrometeret BIFROST.
- *Hårde materialers atomare struktur.* Den rumlige opbygning af atomerne i et molekyle bestemmer de kemiske bindinger, der skaber mange af materialernes egenskaber og dermed deres unikke funktioner. Røntgen- og neutron krystallografiske teknikker er helt afgørende værktøjer til at forstå blandt andet energimaterialer såsom termoelektriske materialer til at genindvinde spildvarme, solceller til at høste solenergi, hybrid-magneter til omdannelse af bevægelsesenergi til elektrisk energi, batterier til lagring af energi fra ikke-konstante energikilder (vind, sol, vand), eller brændselsceller og elektrolyseceller. ESS og MAX IV åbner helt nye muligheder for at undersøge disse funktionelle materialer under realistiske driftsbetingelser eller at følge kemiske reaktioner, mens de sker. Miljøet står bag de kommende DanMAX og Heimdal beamlines, som bliver verdensførende til materialekrystallografiske studier på atomar skala med unikke nye muligheder for at studere 'real materials in real time under real conditions'.

## Nye områder

Anvendelsen af de store analytiske infrastrukturer har historisk bredt sig fra fysik over kemi og biologi til efterhånden at være relevante for alle teknisk og naturvidenskabelige discipliner. Det forventes, at denne tendens til inddragelse af nye discipliner vil fortsætte. Nogle af vækstområderne vil ikke have samme tradition for eksperimentel forskning, hvilket kan give nye udfordringer for eksempel mht. data analyse. Et par eksempler på mulige vækst områder:

- *De danske museer* har et åbenlyst behov for digitalisering af samlingerne. I samarbejde med 3D imaging centeret søger en række af disse at etablere sig mht. en strategisk indsats indenfor Røntgen og neutron imaging.
- *Den kliniske forskning* stiller særlige krav om nærhed og tilgang.
- Den fremtidige Røntgen fri elektron laser samfund forventes i væsentligt udstrækning at involvere forskere fra nye områder såsom femtosekund kemi, ”warm condensed matter” og atom/molekylfysik baseret på avanceret brug af lasere.

## Strategi for neutronområdet

Det danske medværtsskab af ESS gør det naturligt, at den samlede strategi for området bygges op om ESS. Ministeriet publicerede i 2015 ”ESS som drivkraft for fremtidens vækst. Strategi for den danske ESS-indsats”. I foråret 2017 er denne fulgt op af en [ESS handleplan](#), med bl.a. følgende anbefalinger

- En kapacitetsopbygning på neutronområdet fra ca 120 brugere i 2015 til ca det tredobbelte i 2025.
- Oprettelse af 5-7 internationalt ledende fyrtårnsmiljøer inden for områder af strategisk betydning. Et katalog over mulige fyrtårn indgår i handleplanen.

Til at understøtte kapacitetsopbygningen er KU, DTU og AU p.t. partnere i ØKS Interreg projektet: ESS& MAX IV: Cross Border Science and Society, hvor arbejds pakken [MAX4ESSFUN](#) har til formål at styrke uddannelsen af unge forskere i anvendelsen af neutroner og synkrotron stråling. Inden for en treårig periode (2015-2018) vil dette medfinansiere 88 PhD-uddannelser på de danske universiteter. Videre er de danske, svenske og norske ministerier gået i samarbejde med NORDFORSK om et 60 MNOK "Nordic Neutron Science Program" (NNSP). Dette består af et fagligt netværk, PhD stipendier, samt en PhD skole. Der forventes 6-7 PhD stipendier til hvert land.

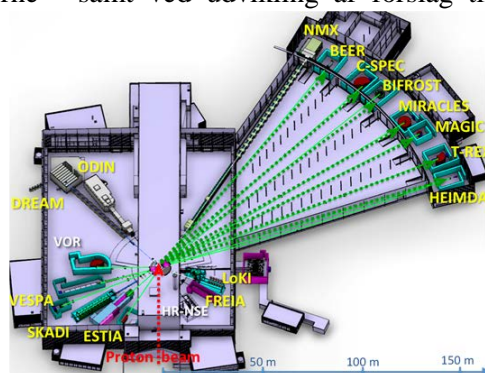
Herunder gives først en opdatering mht. den danske indsats på ESS, og en præsentation af vort mulige fremtidige engagement på det tre andre væsentlige kilder: ILL, PSI og ISIS. Baseret på dette gives et estimat (heroisk skøn) over det danske forbrug - samlet og fordelt på faciliteter - i hele perioden 2017-2025.

## ESS

ESS vil producere de første neutroner i 2020, blive åbnet for generelle brugere i 2023 og have 15 ud af 22 instrumenter operationelle i 2025. ESS vil på alle områder blive verdens førende forskningsfacilitet til forskning i hårde, bløde og biologiske materialer ved brug af neutronstråler. Den umiddelbare nærhed giver videre danske forskere en stor fordel ved transport af for eksempel følsomme biologiske prøver eller kompliceret udstyr.

Et stærkt engagement i ESS fra dag 1 er afgørende for at maksimere det videnskabelige udbytte og sikre at de danske forskningsinteresser prioriteres. De danske forskere har derfor gennem hele perioden for tilblivelsen af ESS, fra idegrundlag til den nuværende konstruktionsfase, deltaget aktivt i diskussioner om teknik og prioritering, ved medlemskab af forskellige udvalg og kommissioner relateret til ESS, ved deltagelse i ESS konferencer - som for eksempel IKON møderne - samt ved udvikling af forslag til instrumentering.

På nuværende tidspunkt er der truffet beslutning om 15 instrumenter, jf. figuren til højre. Disse dækker i alt væsentligt de danske ønsker. Ud af de 15 er der et dansk aftryk på 8, hvilket især skyldes et forbilledligt samarbejde med forskere fra PSI, hvor ideer har kunnet blive testet og dokumenteret med brug af SINQ kilden. Det er besluttet at den tekniske udvikling og opbygning af ESS-instrumenterne HEIMDAL og BIFROST vil ske med dansk ledelse, medens det videnskabelige program for udnyttelsen af MIRACLES



instrumentet er ledet fra Danmark.

Danske forskere er også involveret i forslag til design af prøve omgivelser, og er i den forbindelse allerede involveret i specifikke ESS opgaver.

Data Management og Software Centret, DMSC, i København er sammen med danske og udenlandske universiteter og forskningslaboratorier i gang med at udvikle software og hardware til kontrol, analyse og visualisering af de eksperimenter, der skal udføres på ESS. Dansk ekspertise på dette område, samt placeringen i København, giver store muligheder for, at danske forskere ansættes eller på anden måde samarbejder med DMSC om de bedste softwareløsninger for ESS. Dette arbejde skal prioriteres højt i de nærmest kommende år, således at databehandling og visualisering ikke bliver en begrænsende faktor for effektiv start af ESS faciliteten.

Til sikring af kontinuert opbygning af stærke danske forskningsmiljøer til udnyttelse af ESS og MAX IV, bør de danske universiteter i de næste år øge udnyttelsen af adjungerede forskere fra ESS og MAX IV, og udvikle planer for flere fælles-ansættelser ved danske universiteter og ESS/MAX IV.

## **ILL**

ILL er verdens mest kraftfulde reaktor-baserede neutron kilde. Siden 2014 har Danmark været medlem af ILL igennem konsortiet TRANSNI, som ud over Danmark består af Sverige og Belgien. Kontrakten mellem TRANSNI og ILL løber til udgangen af 2018. Det danske bidrag er på 7 MDKK per år, hvilket giver de danske forskere ret til i alt 0.71% af den samlede måletid uddelt via ILL's peer review system. (Det vil sige cirka 30 dage ud af 4000 instrument-dage per år). Kontrakten giver også Danmark ret til én PhD student, betalt af ILL. Derudover har danske forskere i samarbejde med ILL ansatte mulighed for at foreslå yderligere PhD projekter i forbindelse med en årlig ansøgningsfrist. I skrivende stund er 1 dansk-indskrevet PhD student i gang med sit projekt, og yderligere 3 studenter starter deres PhD projekter i efteråret/vinteren 2017/18. TRANSNI kontrakten giver desuden mulighed for udstationering af personale og studenter på ILL, hvilket allerede er blevet udnyttet af danske grupper, som dermed opnår værdifuld erfaring, samt en stærkere tilknytning til ILL's videnskabelige stab. Endelig skal det nævnes, at 2 danske forskere nu sidder i ILL's review komiteer, og at en dansk industrial liason officer er identificeret.

I perioden 2014-2016 har danske forskere og studenter været med i ansøgninger om i alt 603 dage, hvoraf 312 dage er blevet tildelt. Når man korrigerer for deltagelse af udenlandske samarbejdspartnere svarer dette til cirka 2 % af den samlede årlige måletid på ILL, hvilket er ca tre gange mere end Danmark betaler for. Projektforslagene er indsendt af 76 forskellige personer fra 18 forskellige institutter og 2 virksomheder. De danske brugere tilkendegiver generelt stor tilfredshed med brugen af ILL. Instrumenterne og bemanningen er af høj kvalitet. Muligheden for fælles ansøgninger om neutron- og røntgen måletid på henholdsvis ILL og ESRF er specielt attraktiv for forskere med interesse i biologiske emner og bløde materialer. Alt i alt sætter det danske miljø stor pris på medlemskabet af ILL, og har et stærkt ønske om at dette fortsættes.

Ministeriet har i 2017-2018 bevilget 1.5 MDkr til udstationering af en post doc på ILL, til at styrke forskningen indenfor et område af strategisk betydning for ILL. De danske miljøer har foreslået projekter og kandidater. I skrivende stund er ILLs ledelse i færd med at prioritere disse. Der forhandles om, hvorvidt denne satsning vil kunne sikre et uændret dansk aktivitetsniveau på ILL uden forhøjelse af medlemsbidraget.

## **PSI**

I 2001 overførtes to instrumenter (SANS-II og RITA-II) fra den nu lukkede DR3 reaktor på Risø til SINQ neutronkilden. I perioden 2002-2016 har DANSCATT – samt i perioder RISØ/DTU eller KU - finansieret instrumentansvarlige postdocs ved de to instrumenter til gengæld for en procentdel af den totale måletid. For nærværende har DANSCATT kun været i stand til at finansiere en post doc, hvilket har sikret de danske brugere adgang til måletid svarende til 30% af RITA-II instrumentet. I perioden 2015-2016 er DANSCATT finansieringen blevet suppleret af EU-Cofund midler, så der også kunne stationeres en DANSCATT post doc på diffraktometeret DMC til gavn for de danske aktiviteter indenfor strukturel kemi.



Aftalen med PSI ses som meget fordelagtig. PSI står for de fleste neutron målerejser overhovedet, jf. tabellen på side 3. Aftalen gør det muligt, at danske brugere kan operere som såkaldt superbrugere med indflydelse på instrument- og softwareopdateringer og mulighed for eksperimenter med avancerede prøveomgivelser, hvoraf nogle har været medfinansieret med penge (bevilget fra Carlsberg) eller arbejdskraft fra Danmark. Måletiden er blevet anvendt på forskningsprojekter fra KU, AU, DTU, SDU og RUC.

Aftalen med PSI har haft en meget positiv indvirkning på undervisningen på kandidat- og Ph.d.-niveau i forbindelse med neutronspretningskurser på KU og DTU. Siden 2001 har i omegnen af 200 studenter deltaget i øvelser på RITA-II, SANS-II og DMC, ligesom ~40 PhD studerende har anvendt RITA-II og/eller SANS-II i deres studium. Af disse er 9 nu ansat på lektor-niveau på KU, AU og DTU.

Den massive danske tilstedeværelse på PSI har ydermere givet basis for etablering af fælles forskningsprojekter med PSI-ansatte og andre schweiziske forskere. PSI og andre institutioner i Schweiz har medfinansieret et par håndfulde danske Ph.D. studerende inden for neutronspretning. Endvidere er miljøer fra Danmark blevet inviteret med i en større EU-ansøgning om et Ph.D. netværk, ledet af PSI. Sidst, men ikke mindst, har den danske kontakt til PSI dannet basis for, at de danske og schweiziske miljøer er indgået i et tæt samarbejde omkring design af instrumentering til ESS. Dette førte til tre instrumenter, der nu er accepteret til konstruktion: ESTIA, BIFROST og HEIMDAL.

Samarbejdet med PSI og de schweiziske neutronsprede har således været yderst frugtbart, det har kunnet foregå for meget få tilførte midler, og det har udløst langt flere penge i eksterne bevillinger end denne investering. Der er derfor et stort ønske fra dansk side om at kunne forsætte samarbejdet.

## ISIS

En af de vigtigste neutronkilder i Europa er ISIS (UK). I modsætning til andre europæiske kilder anvender ISIS time-of-flight teknikker, meget lig dem, der vil blive anvendt på ESS. ISIS har de seneste 10 år kraftigt udvidet sin instrumentpark og er nu i videnskabelig produktivitet næsten sammenlignelig med ILL. Blandt danske grupper er ISIS kun anvendt i begrænset omfang. Dette skyldes i høj udstrækning, at den danske tradition på området mere peger i retning af konstant-stråle teknikker, som på PSI, og ILL. I Sverige har man aktivt arbejdet på at ændre dette mønster, og med kraftig støtte til samarbejde og instrumentudvikling samt et egentligt medlemskab har man forøget den nationale brug af ISIS til at være lige så stor som på ILL.

## Behov for adgang til måletid

Det er som nævnt en del af den danske strategi for udnyttelsen af ESS, at det danske neutron brugermiljø vokser fra 120 primo 2015, til ca. det tredobbelte ultimo 2025<sup>5</sup>. Finansieringen forventes især at komme fra fyrtårnsbevillingerne, som stadig ligger lidt ude i fremtiden. Vi forventer derfor, at tilvæksten først for alvor tager fart i 2019, men dernæst accelerer kraftigt. Konkret estimerer vi, at der vil være 210 neutronsprede primo 2021 og 300 ultimo 2025.

Imidlertid forudses der på såvel Europæisk som internationalt plan en mangel på måletid i årene indtil ESS kører 100%. The European Strategy Forum on Research Infrastructures (ESFRI) konkluderer således i et [white paper](#) fra September 2016 at "the clear consequence of all conceivable scenarios that we foresee is that there will be a marked reduction in availability of scientific measuring capability using neutron beams in the coming year". Der arbejdes på at udbedre problemet, men det er f.eks. usikkert hvor længe ILL vil fortsætte med at operere og under hvilke betingelser for partnerlandene. Med den markante danske kapacitetsforøgelse in mente – herunder behovet for træning og introduktion af nye grupper – er der et klart behov for politisk bevågenhed omkring dette emne.

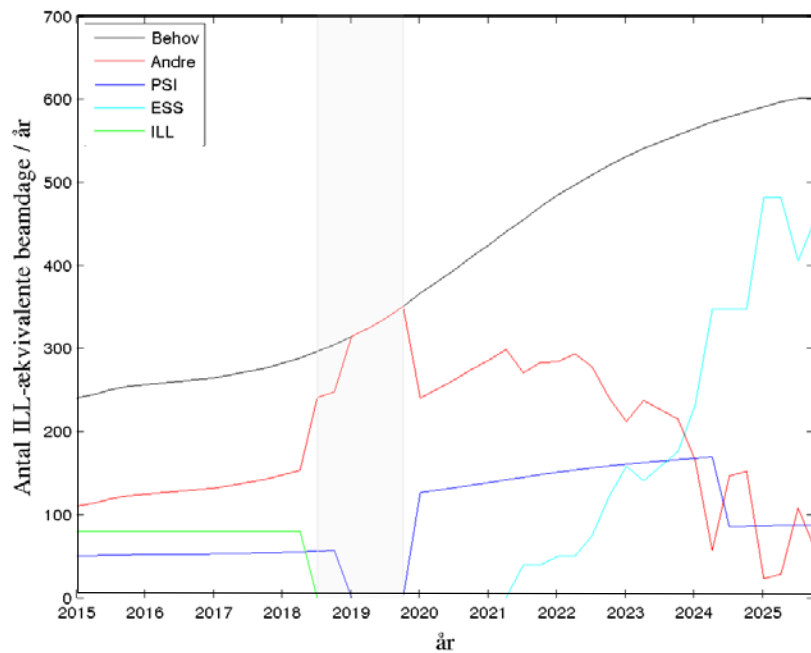
Vi vil i det følgende give et estimat af størrelsen på den danske neutron indsats i perioden frem til 2025. Dette er baseret på en række antagelser:

---

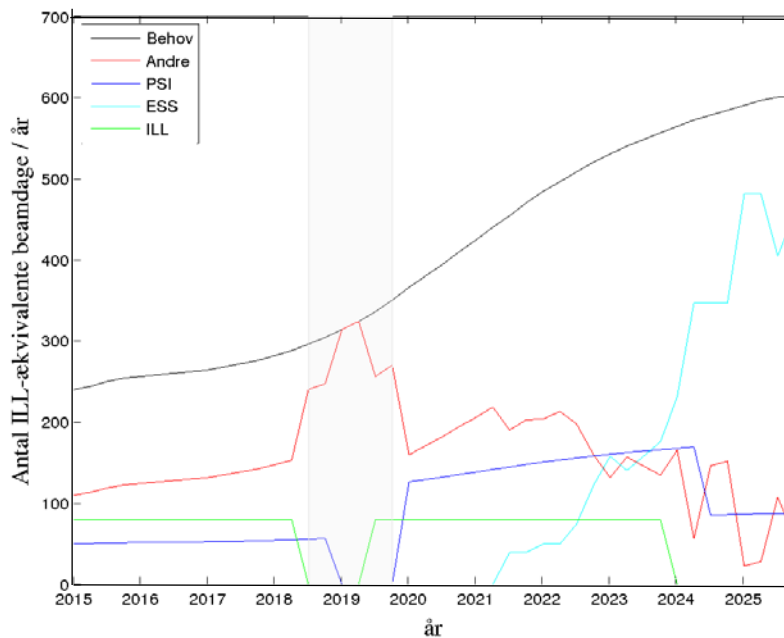
<sup>5</sup> Miljøets størrelse er i ESS handleplanen og i dette afsnit om ESS defineret som antallet af personer (studerende og forskere), der har publiceret ved brug af neutroner mindst 2 gange på 5 år.

- Antallet af måledage for et givet projekt vil variere afhængigt af kildens styrke. Mere intense kilder medfører imidlertid ikke en tilsvarende reduktion i måletid, da konkurrence-niveauet naturligt fører til mere avancerede ansøgninger (og bedre forskningsresultater). Vi vil anvende en skalering baseret på, at eksperimenter på ILL i gennemsnit erfaringsmæssigt er ca. tre gange kortere end på PSI, mens kilden er ca. 10 gange kraftigere. Dette estimat – en faktor 3.3 - understøttes af at forholdet mellem procent andelen af det samlede antal neutron publikationer og antallet måledage er hhv. 0.38 for ILL og 0.14 for PSI. Med en tilsvarende faktor 10 i forskel på ydeevne mellem ESS og ILL får vi ved at bruge samme skalering, at 1 ESS dag svarer til 3.3 ILL dage.
- Den sidste halvdel af dansk måletid er p.t. spredt udover neutronkilder i hele verden. Vi vil igen tillade os at vurdere værdien af denne måletid ud fra antallet af artikler. 21% af de danske artikler er baseret på brug af kilder som i kvalitet kan måle sig med ILL (ISIS, SNS, J-PARC, HFIR), mens 10% er lavet på kilder med lidt lavere ydeevne end ILL (NIST og FRM-2), og 17% er lavet på kilder med ca. samme ydeevne som PSI. Baseret igen på forholdsregning, sætter vi måletid på større kilder ækvivalent med ILL, på mindre kilder ækvivalent med PSI, mens måletid på kilder med ydeevne mellem PSI og ILL bliver sat til at modsvare 2/3 af tiden på ILL.
- Det gennemsnitlige aktivitetsniveau per gruppe og den gennemsnitlige gruppestørrelse per neutronprojekt er uændret i de næste 10 år. Dette betyder, at behovet for ILL-ækvivalente måledage vil være direkte proportionalt med miljøets størrelse. Ved sammenligning med perioden 2012-2016 fører dette til, at hver forsker/student i miljøet i gennemsnit behøver 2.0 ILL-ækvivalente beam dage per år.
- I 2020 vil ingen ESS instrumenter være i drift, og antallet af måledage er derfor nul. I 2025 vil ESS operere med 160 dage på i alt 15 instrumenter. Dette svarer til en dansk andel på 120 måledage, eller 400 ILL-ækvivalente dage. Imellem 2021 og 2025 anvendes en fremskrivning af ESS's forventede accelerator styrke, antal måledage, og antal instrumenter i brugerprogrammet. Endvidere antages, at for de tre danske instrumenter (BIFROST, HEIMDAL, og MIRACLES) vil 20% af måletiden i indkøringsperioden kunne anvendes til videnskabelige formål af dansk interesse. Derfor vil den danske brugbare måletid på ESS i årene 2024 og 2025 være lidt større end de beregnede 400 ILL-ækvivalente måledage årligt.
- Den markante brug af PSI – herunder ikke mindst til undervisning - er betinget af en fortsættelse af aftalen om in-kind bidrag. Vi antager, at denne aftale fortsætter uændret til og med 2023, og derefter fortsætter på ca. 50% formindsket niveau. Vi beregner forbruget som summen af et konstant led (der relaterer direkte til in kind bidraget) og et led, der vokser med størrelsen af det danske miljø (begrænset af styrken i det danske ansøgninger). I 2016 er de to led lige store. Derudover vil vi tage højde for, at PSI kilden efter en opgradering i 2019 vil være 5 gange mere intens, og derfor regnes til klassen af faciliteter, hvor en beamdag er ækvivalent til 2/3 ILL dage.

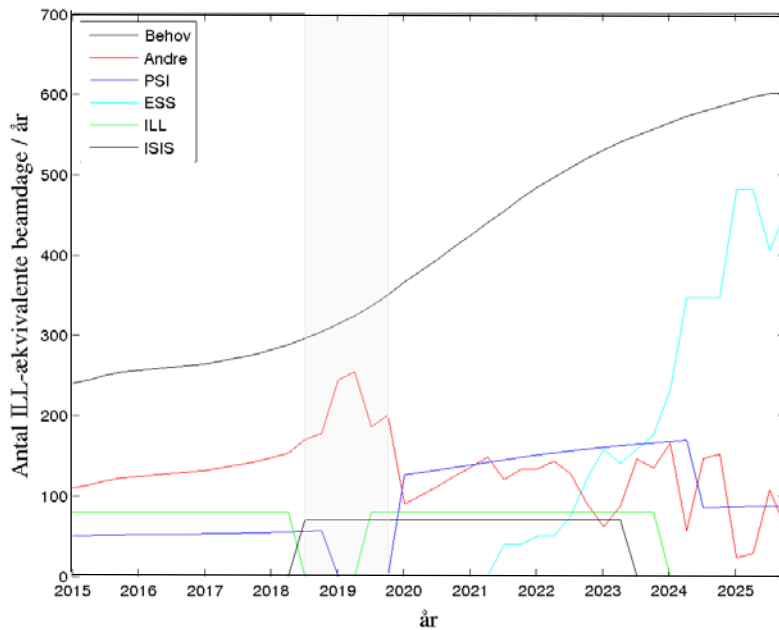
Med disse antagelser har vi fremskrevet brugen af måletid i tre scenarier. Disse er illustreret grafisk herunder



Scenarie 0: Uændret situation mht. medlemsskaber. Danmark ophører med at være medlem af ILL ved udløbet af kontrakten i 2019. Det totale behov er angivet med den sorte kurve. Forbruget af PSI, ILL og ESS er angivet med hhv. blå, grøn og cyan. Det fremgår at brugen af ”andre kilder” (rød) må mere end fordobles for at dække behovet i perioden 2018-2024. Det bemærkes at PSI er nedlukket i 2019.



Scenarie 1: Fornyet kontrakt med ILL. Scenariet er identisk med scenarie 0 bortset fra at vi antager at medlemsskabet af ILL fornyes og at der er *politisk muligt at fastholde det nuværende niveau på 80 måledage/år*. Det bemærkes at ILL er nedlukket i perioden oktober 2018 til august 2019. Det fremgår at brugen af ”andre kilder” (rød) må næsten fordobles for at dække behovet i perioden 2018-2024.



**Scenarie 2: Fornyet kontrakt med ILL og medlemskab af ISIS.** Scenariet er identisk med scenarie 1 bortset fra at vi antager at Danmark i perioden 2018-2022 er medlem af ISIS. Dette ville være parallelt til strategien i Sverige, som også er medlem af begge faciliteter. Det svenske ISIS medlemskab beløber sig til ca. 1 M€år, og for dette opnås 160 dages måletid. Sondringer indikerer at et medlemskab på tilsvarende betingelser kan være muligt. Brugen af ”andre kilder” (den røde kurve) er i dette scenarie reduceret til det nuværende niveau. Det bemærkes at ISIS er en time-of-flight maskine, så forsøg her vil i særlig grad understøtte og forberede den danske neutron samfund på ESS.

Mht brugen af ”andre kilder” er der en tre-dobbelt udfordring:

- En række kilder lukker indenfor de næste 10 år, jf. ESFRIs white paper.
- De andre europæiske lande vil være i en tilsvarende situation, så dette vil være sælgers marked.
- De mest kraftfulde befinder sig oversøisk (SNS, J-PARC, HFIR, ANSTO). Rejseudgifterne er markant højere end for rejser indenfor Europa, og for de fleste grupper vil det være en forudsætning at disse kan refunderes af DANSCATT.

I ligevægtsperioden efter 2025 giver vores estimer, at behovet for måletid er 600 dage, hvilket dækkes med 400 dage på ESS, 100 på PSI, og 100 på andre kilder. Dette forekommer at være en sund fordeling på forbruget, idet kun en mindre del af måletiden opnås ved kilder, hvor der ikke er klare aftaler, og hvor dansk mulighed for adgang på længere sigt ikke er garanteret.

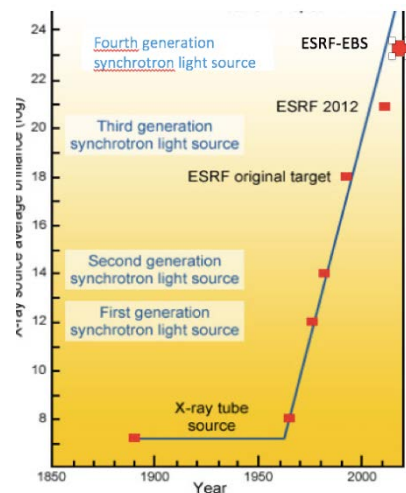
## Strategi for synkrotronområdet

Siden 1980’erne har intensiteten af den tilgængelige synkrotronstråling udviklet sig nærmest eksplosivt. Som det fremgår af figuren herunder til højre<sup>6</sup> er brilliansen<sup>7</sup> steget med en faktor 10 ca. hvert fjerde år. Dette medførte at Røntgenstråling fik et langt bredere anvendelsesområde, at brugersamfundet følgelig voksede radikalt, og at der som følge af efterspørgslen konstant blev opført nye faciliteter. Væksten i DANSCATT’s brugerkreds i figuren på side 3 er en direkte konsekvens af denne udvikling.

<sup>6</sup> Modificeret fra ESRF slide.

<sup>7</sup> Brilliansen er er mål for intensiteten af den brugbare del af strålen, for en definition se [her](#)

Med indvielsen af MAX IV i 2016 indledtes et nyt kapitel. Efter at svenskerne med succes demonstrerede en ny accelerator teknologi har langt hovedparten af de eksisterende faciliteter indledt et kapløb om at udskifte deres kilder med nye, inspireret af MAX IV. Som et eksempel på brilliansen af disse nye ”ultimate storage rings” er performance for ESRFs upgrader, Extremely Brilliant Source (med opstart i 2020) indtegnet på figuren til højre. Det fremgår at den historiske vækst i performance fortsætter tilnærmelsesvist uforandret inden for synkrotron området i de næste 10 år. Alt andet lige giver det anledning til en forventning om en fortsat vækst i brugermiljøets størrelse og udbredelse af metoderne til nye discipliner. Imidlertid er væksten i antallet af nye faciliteter tilnærmelsesvist stoppet – MAX IV er f.eks. en erstatning for den tidligere MAX II facilitet.



Andre tendenser der må forventes at påvirke brugen af synkrotronstråling i væsentlig grad er

- Brugen af robotter og standardiseret data analyse vil i endnu højere grad muliggøre dels optagelsen af meget store data sæt på tusindvis af prøver, dels mail-in services.
- Data analyse er ved at blive en flaskehals inden for imaging. På enkelte beamliner bliver op mod halvdelen af forsøgene i dag ikke publiceret fordi brugere mangler værktøj til at håndtere data.

En mulig disruption, med potentiale til at ændre forudsætningerne for brugen af synkrotronstråling, er fremkomsten af nye laboratorie baserede kilder. Disse har været annonceret i en årrække med forhåbning om at de kunne overtage mange standardopgaver. Det er vores vurdering, at de stadig er så langt fra markedet, at de ikke vil få nogen signifikant betydning i de næste 10 år.

Strategien tager udgangspunkt i adgang til de to faciliteter ESRF i Grenoble og MAX IV i Lund. De to supplerer hinanden fortrinligt, idet MAX IV er optimeret til brug for 5-25 keV Røntgenstråler, mens ESRF-EBS fokuserer på den hårde Røntgenstråling over 25 keV. MAX IV er en regional kilde, med unikke muligheder for opbygning af aktiviteter målrettet danske interesser, undervisning og store synergi muligheder for de danske universiteter. ESRF vil også i det næste årti være verdens ”bedste” synkrotron og drivkraften i udviklingen af området. Det bemærkes at de fleste vest-europæiske lande har en tilsvarende to-strengt strategi med medlemskab af ESRF og en eller evt flere nationale/regionale kilder.

## MAX IV

Med bygningen af MAX IV synkrotronen får Danmark verdens stærkeste røntgenkilde i mellemenergiområdet i sin umiddelbare nærhed. MAX IV er den foreløbige kulmination på mange års synkrotronaktiviteter i Lund, hvor den hidtidige synkrotron MAX-lab blev lukket med udgangen af 2015. Danske forskere har i mange år været storbrugere af MAX-II, blandt andet gennem den dansk-svensk byggede beamline Cassiopeia, der gav privilegeret adgang til faciliteten. De seneste år har danske forskere typisk fået op til 15% af måletiden på MAX-II på trods af, at faciliteten er svensk finansieret. Brugen har dog i alt væsentligt været centeret omkring to beamlinier med hård røntgenstråling til diffraktion: Cassiopeia og 7-11.

Den netop åbnede MAX IV er også en ren svensk facilitet til en konstruktionspris på ca 4 milliarder kroner. Svenskerne har foreløbig finansiering til at bygge 14 ud af 25 mulige beamlines på de to ringe på MAX IV anlægget, og kapaciteten overstiger de svenske behov. Der er derfor et svensk ønske om, at de andre skandinaviske lande engagerer sig. Der er dog stor forskel på de danske og svenske brugermiljøer, hvor svenskerne traditionelt har fokuseret på spektroskopi, mens danske styrkepositioner er indenfor diffraktion og imaging. Det er derfor reelt kun få af de beamlinier, der er under opførelse, der umiddelbart har dansk interesse.



MAX IV med indikation af bevillingsgiverne til den danske beamlinie, DanMAX.

Til at imødekomme det danske behov er et dansk konsortium med deltagelse af over 70 forskere i gang med opbygningen af en dansk beamlinie, DanMAX. Beamlinien vil stå færdig i 2019 og vil indeholde to instrumenter til materialeforskning: et til imaging og et til pulverdiffraktion. Begge instrumenter har fokus på at kunne studere ”real materials in real time under real conditions”. Dette kræver en sideløbende stærk udvikling af nye faciliteter til *in situ* eller *in operando* studier hvor data optages mens materialer fremstilles eller mens de er i drift. De danske forskere vil forestå driften af DanMAX, i praksis ved udstationering af to personer fra AU og to fra DTU. Der er underskrevet en kontrakt, der sikrer danske forskere prioriteret måletid, og samtidigt giver dem mulighed for at søge måletid på alle instrumenter på lige fod med alle andre forskere. Beamlinien fungerer altså som en adgangsbillet for Danmark til MAX IV. Videre sikres industrien mulighed for hurtig adgang til DanMAX, ligesom der er afsat tid til undervisning.

DanMAX beamlinien rummer desuden mulighed for forskningsmæssig udvidelse, idet man for begrænsede midler kan bygge en sidestation med fast røntgenenergi. Dette kunne f.eks. muliggøre opbygning af et stærkt en-krystal diffraktometer til løsning af små-molekyle krystalstrukturer fra mikrokrytaller, der typisk er for små til studier i hjemmelaboratorier. Sidestationen vil derved kunne understøtte alle danske syntese-grupper og således bringe anvendelse af synkrotronstråling ind til et stort antal nye forskningsmiljøer.

Et fælles DTU-KU-LU-MAX IV imaging data analyse center vil blive åbnet i 2017, med finansiering fra bl.a. Region Hovedstaden. Ambitionen er at centeret producerer bedre, hurtigere og frem for alt mere borgervenlige metoder til analyse af data fra alle imaging beamlinier på MAX IV. Centeret vil også stå for træning af nye brugere. Med centeret inddrages stærke danske computermiljøer, hvilket kan være af strategisk betydning for hele DANSCATTS virke.

Med stærk deltagelse fra danske forskere i Aarhus og København er der blevet ansøgt om midler fra en dansk fond til finansiering af en ny beamlinie til mikrofokus proteinkrystallografi og SFX (Serial Femtosecond X-ray Crystallography), MicroMAX.

Det kan videre nævnes, at Danmark pt har et medlem af MAX IVs bestyrelse, samt at der fra dansk side arbejdes på etableringen af dedikerede beamlinier til blandt andet bio-imaging.

## ESRF

ESRF er målt på såvel produktion af publikationer som innovationshøjde den ”bedste” synkrotronfacilitet i verden. Det skyldes blandt andet, at ESRF har en speciel division på ca 100 mand, som står for instrumentudvikling og service af beamlines. Det muliggør, at ESRF påtager sig ambitiøse nyudviklinger, løsninger, der ofte senere migrerer til de nationale faciliteter. Danmark indgår med en andel på ca 22% i NORDSYNC konsortiet, der er en 5% partner i ESRF. NORDSYNCs brugere bliver konstant tildelt mere måletid af review committees, end vi er berettiget til, og har derfor de sidste år oplevet at få reduceret måletiden tildelt efter peer review.

Der er et godt match mellem porteføljen af beamlinier på ESRF og de danske interesser. Indsatsen bliver også stadig mere effektiv: antallet af publikationer voksede således støt fra 51 til 70 i perioden 2013 til 2016. I 2016 udgjorde ESRF publikationerne 41% af det samlede antal synkrotron relaterede publikationer.

Som led i opgraderingen til ESRF-EBS vil den nye accelerator blive installeret i perioden oktober 2018 – juni 2020. Derudover vil der blive bygget 2 helt nye beamliner. Et af disse flagskibsprojekter bliver et dansk udviklet mikroskop, der tillader at visualisere i 3D, hvad der sker på længdeskalaer ned til 20 nm inden i mm-store emner såsom 3D prints, batterier eller aktuatorer. Udviklingen af teknikken er sket over de sidste 5 år indenfor rammerne af et ERC Advanced Grant. ESRF har bidraget med personale og ved at stille en ledig test beamlinie, ID06, til rådighed.

Et fortsat medlemskab er motiveret i at ESRF også fremadrettet vil være den ypperste facilitet i verden. De nationale kilder, herunder MAX-IV kan ikke i det lange løb konkurrere med den kritiske masse af teknisk kompetence og bruger support på ESRF. Konkret vil ESRF-EBS da også være den mest brillante kilde i verden i perioden 2020-2026. De danske brugeres tilslutning til og engagement i ESRF er således uændret.

## Behov for adgang til måletid

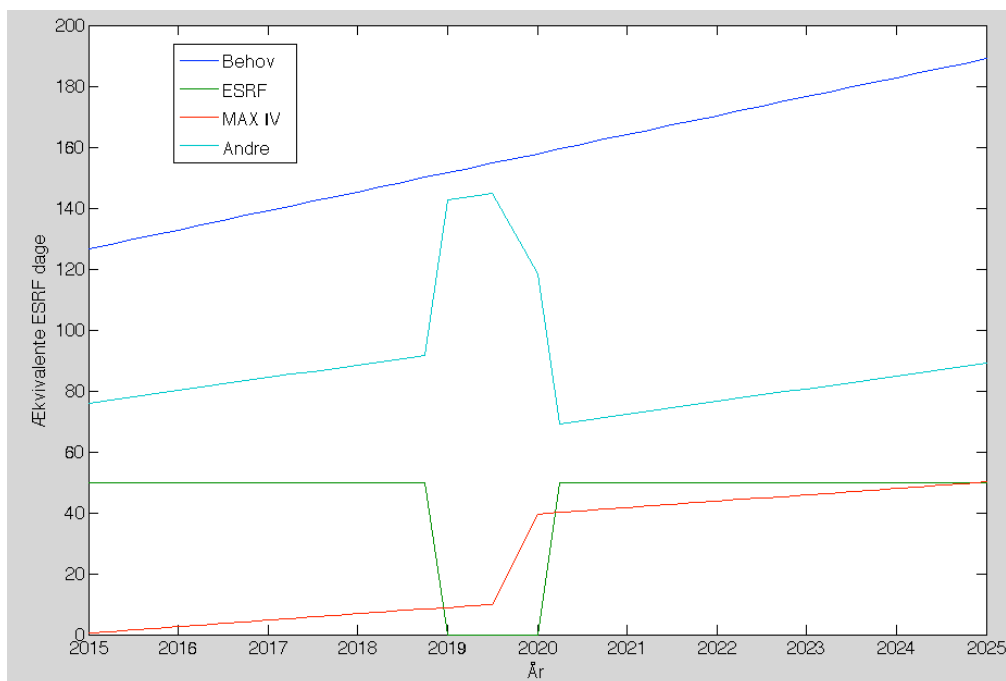
Synkrotronmiljøet spænder fagligt meget bredt og omfatter grupperinger med meget forskellige behov: fra eksperimentalister, der konstruerer unikke instrumenter, over dedikerede brugere, der udfører identiske målinger på meget store forsøgsserier, til teknisk uerfarne brugere, som er helt afhængige af andre aktører mht. såvel data optagning som data analyse. En serie workshops på ESRF har afklaret, at for over 80% af de nuværende brugere vil "ultimate storage rings" konkret opkvalificere deres forskning. Der eksisterer os bekendt ikke rapporter i f.eks. EU eller tysk regi, som fremskriver brugermiljøets størrelse og sammensætning. Men adspurgte svarer direktører fra ESRF, PETRA og MAX IV samstemmende, at de forventer, at brugermiljøet overordnet vil fortsætte sin hidtidige vækst, med baggrund i den fortsatte tekniske udvikling, jf. figuren på side 12. Her peges bl.a. på fremkomsten af nye miljøer i kølvandet på den højere brillians.

Baseret på forventninger fra de større nuværende grupper i Danmark – vægtet med deres størrelse – er det vores heroiske skøn, at miljøets behov for "ækvivalent måletid" vil vokse lineært i perioden svarende til en initial forøgelse på 5%. Dette markerer en vis grad af mætning i forhold til en lineær fremgang på 10% i de seneste år, jf. figuren på side 3. I denne fremskrivning er reaktionstiden i miljøet antaget at være så stor, at kvantespringene i teknisk kunnen pga. nye kilder på efterspørgselssiden midles ud over årene.

En sammenligning af faciliteter og forsøg baseret udelukkende på brillians er en grov simplificering. Faciliteterne giver adgang til forskellige energiområder, og har meget forskellige tekniske ekspertiser og instrumentpark. Kvaliteten af såvel instrumenter som support spiller også en stor rolle. For en del forskningsområder gælder, at de er meget "Røntgen-sultne": en forøgelse af brilliansen leder til bedre forskning, men ikke nødvendigvis til reduceret måletid per forsøg. For andre betyder det kortere måletid, hvilket fører til, at man kan studere større forsøgsserier. Videre er det naturligt, at de mest ambitiøse forsøg koncentrerer sig på de mest kraftfulde faciliteter. I det følgende vil en vægtning/skalering af faciliteterne derfor blive baseret på antallet af danske publikationer per år.

Til brug for et estimat over udviklingen i måletid gøres desuden følgende antagelser:

- Det danske engagement på ESRF fortsætter uændret. Til brug for skalering bemærkes det at ESRF i 2016 stod for 41% af publikationerne (70 stk).
- Den danske beamlinie DanMAX overgår til brugerne ultimo 2019. Danske forskere formodes at tegne sig for 2/3 af brugen (tilsvarende CRG beamlinier på andre faciliteter.) Vi forventer, at produktionen – efter en indkørselsperiode – vil kunne måle sig med de bedste beamlinier på verdensplan: ca 40 danske publikationer om året. Forbruget på andre beamliner på MAX IV stiger lineært indtil 2025, modsvarende en langsom opbygning af faciliteten. (Flere beamlinier af dansk interesse er på tegnebrættet, men er ikke medtaget da finansiering og tidsplan stadig er usikker, og de vil i givet fald først kunne tage brugere sent i perioden).
- Alle andre faciliteter karakteriseres under et som "andre" med en skalering modsvarende de 110 publikationer i 2016.



Med disse antagelser bliver det skalerede forbrug som vist på figuren herover. Det totale behov er angivet med den blå kurve, og forbruget af ESRF, MAX IV og alle andre faciliteter er angivet med hhv. grøn, rød og cyan. Nedlukningen af ESRF i 2019-20 og ibrugtagningen af DanMAX i slut 2019 er markante begivenheder. Den umiddelbare konklusion er at den danske adgang til MAX IV modsvarer den forventede stigning i efterspørgsel. Det samlede forbrug på "andre faciliteter" er tilnærmelsesvis konstant: dette ses som et sundhedstegn. Tilsvarende neutronområdet er 2019 et exceptionelt år.

## Strategi for fri elektron laser området

Røntgen laserne bør ses som en hel ny type analytisk instrument der muliggør forsøg, der er radikalt anderledes end hvad der kan udføres med andre typer af Røntgenkilder. Springet i peak brillians mellem fri elektron Røntgen lasere og de bedste synkrotroner er således lige så stort som springet fra en normal laboratorierøntgenkilde til en synkrotron. Dette sammenholdt med en ultrakort, pulset struktur af kilden gør det muligt at måle ultrahurtige, dynamiske processer. Den perfekte kohærens af røntgenstrålingen gør det tilsvarende muligt at udnytte nye teknikker til at undersøge struktur og dynamik af kemiske processer, katalytiske systemer, nanomaterialer, væsker og opløsninger, komplekse bløde og hårde materialer, kvantesystemer, såvel som statisk struktur og kinetik i bio-systemer, herunder også eksempelvis membranproteiner.

Kompleksiteten in XFEL eksperimenter kræver en markant større indsats af forskningsgrupperne end normalt ved synkrotron eller neutron eksperimenter. Det er således ikke unormalt at 15-30 forskere fra 2-5 grupper deltager i et XFEL eksperiment for at klare datahåndtering, forberedelse af prøver og koordinering af selve målingerne. Det er normalt at måletider producerer 20-50 TB data, hvilket stiller store krav til datainfrastrukturer hos grupperne og til det efterfølgende arbejde med analyse af data.

Verdens første hård-røntgen XFEL eksperiment blev udført i oktober 2010 ved XPP beamlinien ved LCLS, Stanford. Der var 2 danske forskere blandt de ca. 20 deltagere i eksperimentet. Siden da er teknikken modnet væsentligt, men antallet af instrumenter i samtidig brug har været begrænset til 2-3 på verdensplan. Åbningen for brugere af XFEL.EU, i Hamborg i efteråret er således en milepæl. Samtidigt er konstruktionen af flere nationale Røntgenlaser faciliteter, PAL-FEL, SwissFEL og LCLS II, ret fremskredne. Hermed udvides kapaciteten til omkring 10 samtidige eksperimenter verden over. Erfaring i brugen af de komplicerede teknikker og adgang til måletid vil dog stadig være flaskehalse i perioden indtil 2025.



## XFEL.EU

XFEL.EU bliver i det næste årti med afstand verdens bedste Røntgenlaser. Faciliteten er udstyret 6 instrumenter, der er specialiseret i materiale imaging og dynamik (MID), høj-energitæthed-materialer (HED), femtosekund eksperimenter (FXE), biologisk imaging (SPB/SFX), kvantesystemer (SQS) og spektroskopi og kohærent spredning (SCS).

XFEL.EU er en ESFRI forskningsinfrastruktur, hvor Danmark ejer 0.96% af aktierne, svarende til et bidrag på ca. 11 M€ (i 2005 værdi) til konstruktionen. Heraf er godt 30% blevet udmøntet som en *in kind* leverance af instrumenter og udstyr. *In kind* projektet er styret fra DTU og foregår i nært samarbejde med firmaet JJ X-ray A/S. Det omfatter udvikling, fremstilling og installation af instrumentering til FXE instrumentet og andre instrumenter. Forløbet af projektet medvirket til en betragtelig forøgelse af antallet af projekter generelt i firmaet.

Indtil 2022 vil Danmark bidrage med 1% af driftsomkostningerne, hvorefter 50% af driftsomkostningerne fordeles blandt medlemslandene i forhold til forbruget af måletid, udregnet som et løbende middel over forbruget de tre forudgående år. De resterende 50% af driftsomkostningerne afregnes i forhold til andelen af konstruktionsbudgettet. Et foreløbigt estimat på driftsbudgettet lyder på 118 M€ om året. Brugen af måletid på XFEL.EU udregnes forholdsmæssigt ud fra nationaliteten af de medvirkende forskeres affiliation.

Danmark er stærkt repræsenteret i ledelsen af XFEL.EU, som det fremgår af billedet til højre. Robert Feidenhans'1 – første række til venstre - var formand for Council (bestyrelsen) 2010-2014, og er fra januar 2017 tiltrådt som direktør og formand for ledelsesrådet af XFEL.EU. Martin Meedom Nielsen – nr. 3 fra venstre i første række - efterfulgte Robert som formand for bestyrelsen.

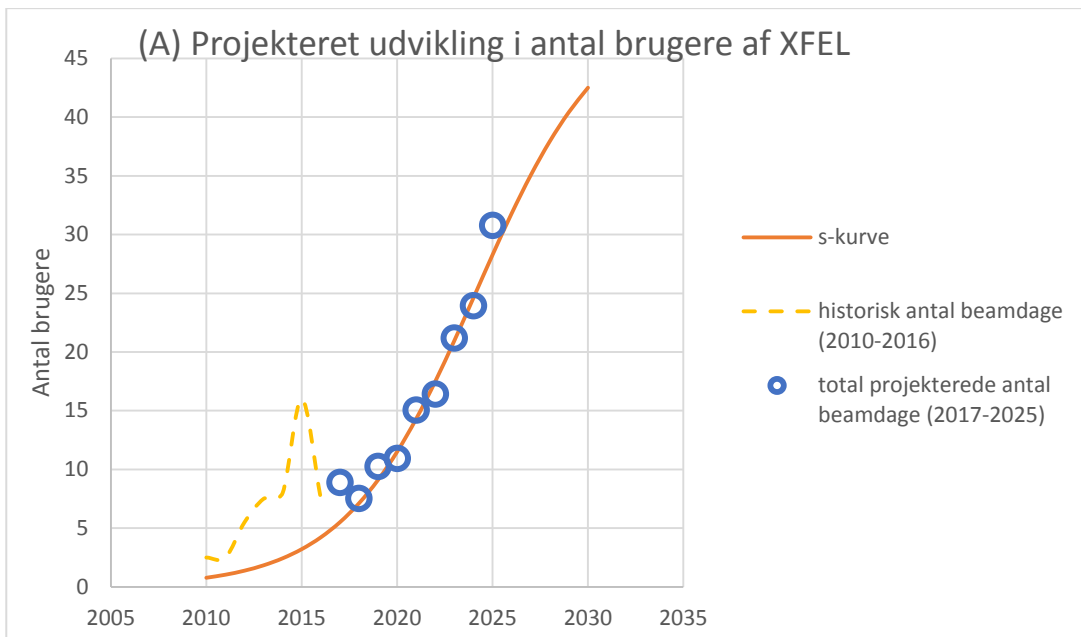


## Behov for adgang til måletid

Den primære brugergruppe har hidtil været DTU-gruppen, som siden 2010 har deltaget i 17 regulære måletider svarende til i alt 192 skift af 12 timer. Ved eksperimenterne har den gennemsnitlige størrelse af de eksperimentelle grupper været på 19 personer, heraf i snit 4 danskere. Ud over DTU-gruppen har to grupper fra AU deltaget i et XFEL eksperiment hver. Totalt har der været 7-15 aktive danske forskere.

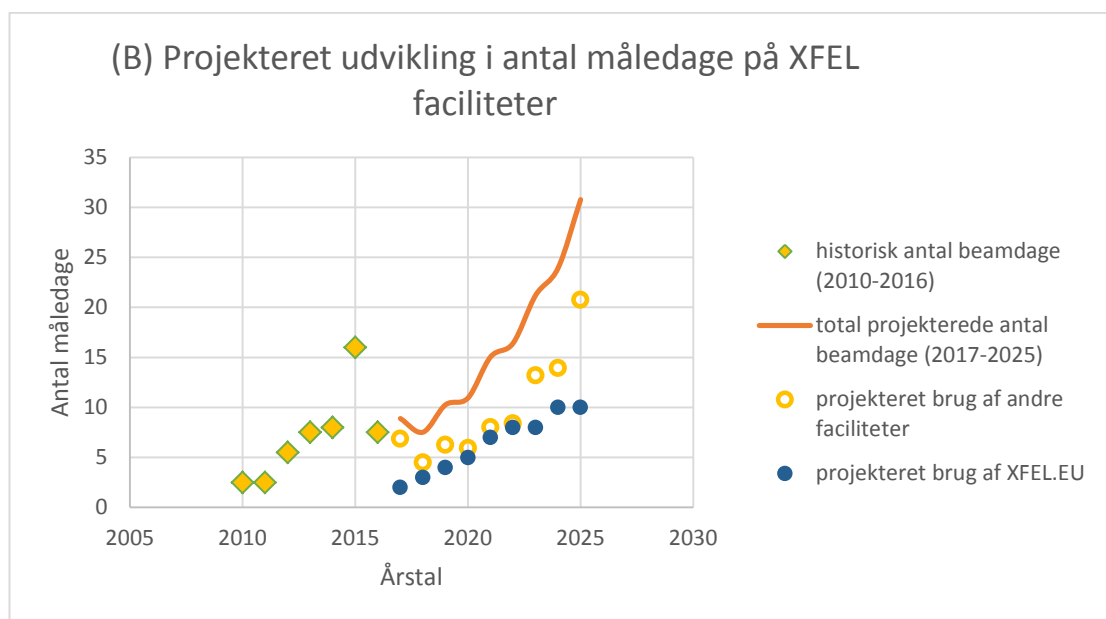
Kapaciteten for XFEL eksperimenter udvides som allerede beskrevet markant i disse år. Væksten i tilgængelig måletid sammen med en stigende bevidsthed om de nye forskningsmuligheder som XFELs tilbyder forventes at lede til en vækst i antallet af danske XFEL brugere. Der er store muligheder inden for bl.a. strukturbiologi, især i forbindelse med *single particle imaging*, inden for materialekemi og -fysik, for eksempel katalyse, energikonvertering og -lagring, atom- og molekylfysik samt kvantesystemer.

Som nævnt ovenfor stiller kompleksiteten af XFEL markant større krav til de ressourcer, som grupperne skal dedikere til eksperimenterne, end normalt ved synkrotroneksperimenter. Pt er det således urealistisk at opretholde en selvstændig indsats i forhold til XFEL målinger med mindre end ca. 5 aktive forskere. Antages det at nye grupperinger derfor starter med at bidrage til den aktive indsats med 5 forskere hver, og antager vi at der kommer en ny gruppering til hvert andet år, samt at eksisterende grupperinger udvides med én pr år indtil de har ca. 10 aktive brugere hver, så fås en udvikling i brugerne som vist på figuren herunder. Den gule stiplede linie repræsenterer perioden 2010-2016. De blå punkter er en fremskrivning baseret på ovenstående antagelse. Den orange linie er en 's-kurve', som er tilpasset denne tendens.

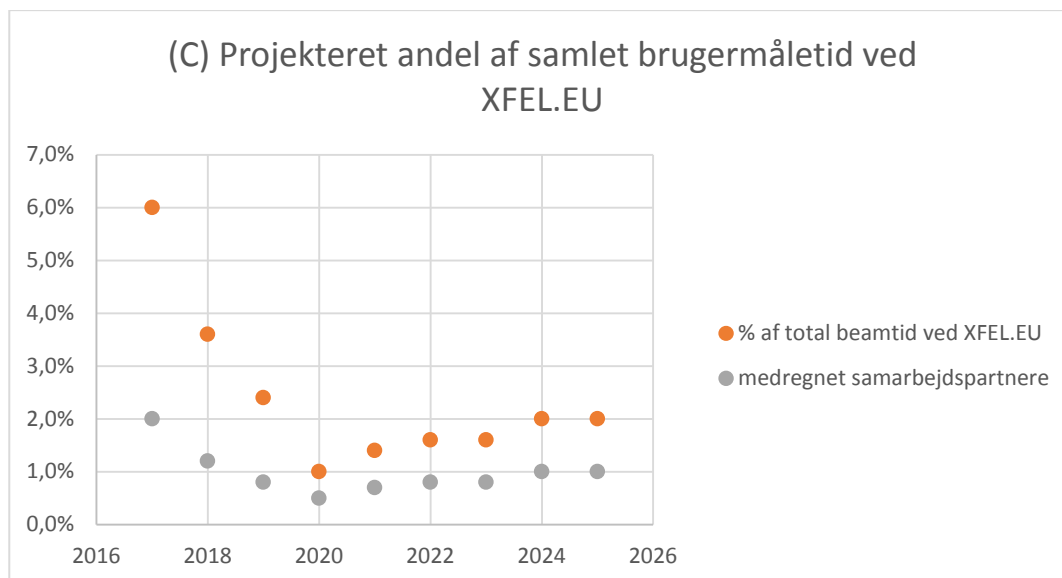


Vi kan nu estimere størrelsen på den danske indsats, ved at gøre følgende antagelser:

- Aktivitetsniveauet per forsker er konstant– hvilket leder til den orange kurve på figuren herunder
- Det antages at der i starten vil være en fokus på brugen af XFEL.EU, så forholdet mellem brugen af XFEL.EU og andre faciliteter er tæt på 1:1, men efterhånden som miljøet udvikles og andre kilder åbnes, forventes brugen af andre faciliteter øges indtil vi har et forhold på ca. 2:1.



Ved at sammenholde grafen herover med det forventede antal udbudte måledage fra XFEL.EU- en stigning fra 33 til 500 fra 2017 til 2020 – kan vi beregne den projekterede danske andel af den samlede måletid til brugere på XFEL.EU. Resultatet er vist som de orange punkter i grafen herunder. Medregnes dernæst at de første eksperimenter forventes at foregå i større samarbejder med fx 3 partnere fra medlemslande til det samme eksperiment, så fås de grå punkter. Efter at faciliteten er i fuld drift efter 2020, regnes der med blot 1 partner fra DK og 1 partner fra et andet medlemsland, hvilket afspejler at miljøet modnes.



Det følger at et fremtidigt dansk medlemsbidrag på ca 1% forventes at være realistisk.

## Følgeforskningen

DANSCATT er i 2017 tildelt støtte på 4.4 Mkr, hvoraf 3.3 Mkr anvendes til refusion af rejser, 800 kkr til det danske engagement på PSI, og 100 kkr til et årsmøde.

Som det fremgår, er refusion af rejser hjørnestenen i DANSCATTs virke. Det er vores erfaring, at uden muligheden for refusion af rejseudgifter fra DANSCATT ville det samlede aktivitetsniveau være langt mindre. Dette skyldes dels usikkerheden på hvor og hvornår man får måletid, dels praksis fra bevilligende instanser. Endelig er der en del yngre forskere og forskere fra f.eks. humaniora, der ikke har frie midler.

Støtte til rejsemidler er desuden en meget effektiv måde at oplære den næste generation af forskere. I dag er størstedelen af deltagerne i et måleeksperiment post docs, speciale og PhD studerende. Indføring i den eksperimentelle praksis kan kun gennemføres 'hands-on' som en slags mesterlære – man kan ikke læse sig til det. Derudover eksponeres studenter og post docs for et meget levende internationalt forskermiljø.

Ud fra fremskrivningerne af måledage på diverse faciliteter ovenfor er det muligt at estimere det fremtidige rejsebudget. En foreløbig beregning forudsiger et forøget behov på ca. 2MDkr per år i perioden 2018-2024, primært pga. opbygningen på neutron området. Specielt er rejser til faciliteter i Japan og Australien dyre. Fra og med 2025 vil den strategiske prioritering af faciliteterne i Lund medføre et mindre behov for rejsemidler.

## Anbefalinger

- For at det danske med-værtskab af ESS skal blive en succes forskningsmæssigt såvel som samfundsmæssigt er det **vitale at understøtte de tiltag der anbefales i den nationale ESS handleplan**. Dette gælder i særlig grad fyrtårns initiativerne og kapacitetsopbygningen. Den største gevinst per investeret krone fås ved at engagere sig fuldt ud, tidligt og markant.
- Kapacitetsopbygningen på neutronområdet medfører en massivt større efterspørgsel på måletid til nye forskningsgrupper såvel som til uddannelse. I perioden fra 2018 og indtil 2025, hvor ESS har 15 instrumenter i brugerprogrammet, kan dette behov umuligt imødegås under de nuværende

rammebetingelser (scenario 0). For at modsvarer efterspørgslen er der brug for en flerstrengt strategi. Dette omfatter (scenario 1)

1. Medlemskabet af **ILL forlænges på et niveau af 80 måledage per år** – svarende til det nuværende reelle forbrug.
2. En **forlængelse af kontrakten med PSI** er essentiel for oplæringen af den næste generation af neutronsprede og samtidigt en fordelagtig måde at øge kapaciteten på.

Selv med disse tiltag og en vedholdende opmærksomhed om problemet i miljøet er det vores vurdering at manglen på måletid vil lægge hindringer i vejen for væksten. Kun scenario 2 – der også omfatter et **midlertidigt dansk medlemskab af ISIS** – sikrer at anbefalingerne i handleplanen kan gennemføres fuldt ud. Scenario 2 er derfor vores anbefaling.

- Udviklingen af synkrotronfeltet vil være præget af opkvalificeringen af kilder til ultimate storage rings. Der forventes en fortsat men muligvis mindre vækst i synkrotronmiljøet. Der anbefales et **fortsat medlemskab af ESRF** via NORDSYNC konsortiet, idet faciliteten også i det næste årti vil være verdens mest kraftfulde facilitet og den primære driver mht. introduktion af nye metoder.
- MAX IV har komplementære egenskaber til ESRF. Den korte afstand og etableringen af DanMAX giver helt unikke muligheder for forskning, uddannelse og industri ligesom den forventede vækst kan absorberes. DANSCATT bør fortsætte arbejdet med at engagere alle danske stakeholders, herunder universiteter, virksomheder, hospitaler, museer og innovationsmiljøer.
- XFEL studier har et stort forskningsmæssigt potentiale. Der anbefales **et fortsat medlemskab af XFEL.EU**, men at Danmark fjerner sit forbehold om at begrænse bidraget til driftsfasen af XFEL til maksimalt 1%. Det danske miljø er velanskrevet internationalt, men relativt lille og der er derfor et stort potentiale for nye videnskabelige gennembrud ved at udvikle miljøet. På baggrund af de særlige udfordringer forbundet med at opbygge forskningsaktiviteter ved XFELs, anbefales det derfor, at der oprettes målrettede finansieringsmuligheder til at fastholde og udvikle den danske udnyttelse af XFEL.
- En **øget bevilling til DANSCATT** er kritisk nødvendig for at kunne dække de øgede rejseomkostninger, der vil være i perioden 2017-2022 pga. kapacitetsopbygningen på neutronområdet. Af hensyn til stabiliteten og muligheden for at indgå i kontraktligt bindende samarbejde med faciliteterne bør det tilstræbes at give 3-årige rammebevillinger.

## Forfattere

Arbejdsgruppen bag rapporten har bestået af:

- Prof. Poul Nissen, Molekylærbiologisk Institut, Aarhus Universitet
- Prof. Bo Brummersted Iversen, Institut for kemi, Aarhus Universitet
- Prof. Kell Mortensen, Niels Bohr Institutet, Københavns Universitet
- Lektor Kim Lefmann, Niels Bohr Institutet, Københavns Universitet
- Professor Martin Meedom Nielsen, Institut for Fysik, DTU
- Professor Henning Friis Poulsen, Institut for Fysik, DTU (formand)

Morten Scharff fra Forsknings- og Innovationsstyrelsen var konsulent.

Rapporten er efterfølgende blevet forelagt DANSCATTs bestyrelse. Bestyrelsen giver den en enstemmig anbefaling.