

Dansk fyrtårns katalog



Uddannelses- og
Forskningsministeriet
—
Styrelsen for Forskning
og Uddannelse

Dansk fyrtårnskatolog



Uddannelses- og
Forskningsministeriet
—
Styrelsen for Forskning
og Uddannelse

Udgivet af

Styrelsen for Forskning og Uddannelse
Bredgade 40
1260 København K
Tel.: 3544 6200
E-mail: sfu@ufm.dk
www.ufm.dk

Omslag

Hirtshals fyr. Illustration af ESS fyrårnsmiljøer

Foto

Henning Friis Poulsen, DTU

Layout

Rosendahls a/s

Publikationen kan hentes på ufm.dk/publikationer

ISBN (elektronisk publikation): 978-87-93468-69



1. Introduktion

1.1 Indledning

Etableringen af European Spallation Source (ESS) skaber en unik mulighed for, at dansk forskning kan opbygge en førerposition inden for life science og det materialeteknologiske område. Det forudsætter imidlertid, at der i årene fremover sker en betydelig udvikling af området. Derfor er det en helt central målsætning i ESS-strategien, at der etableres 3-5 internationalt anerkendte fyrtårnsmiljøer, som med afsæt i ESS kan sikre den nødvendige kapacitetsopbygning på områder af strategisk betydning for dansk forskning og erhvervsliv. I denne indledende del uddybes fyrtårnenes formål og funktionalitet.

I dette katalog uddybes beskrivelserne af de syv fyrtårnene som var skitseret i ESS-strategien fra november 2015 med henblik på at få et videnskabeligt velfunderet og konsolideret grundlag for det videre arbejde med realiseringen af ESS-strategien. Forslagene følger samme struktur og beskriver fyrtårnenes strategiske, erhvervsmæssige og videnskabelige potentialer samt deres organisatoriske opbygning. I kataloget gives en række eksempler på mulige fyrtårnsmiljøer. Eksemplerne er udvalgt inden for forskningsområder, som vurderes at have potentiale til at opbygge et førende miljø, og hvor der samtidigt er et særligt erhvervsmæssigt behov og/eller perspektiv for at opbygge materialekompetencer:

Bioteknologi, lægemidler og fødevarer (life science)

1. Strukturbiologi og molekylær bioteknologi
2. Kolloid- og Grænsefladeforskning: Fødevarer, Ingredienser og Lægemiddelformulering

Nye avancerede materialer

3. Hårde materialer i 3D
4. Polymerer og bløde materialer
5. Magnetisme og kvantematerialer
6. Funktionelle materials atomare struktur
7. Analyse og metodeudvikling – dansk teoricenter

1.2 Hvad er et fyrtårn?

Fyrtårnsmiljøerne skal opbygges på områder, som har potentialet til at skabe forskning og innovation i verdensklasse. Samtidig skal miljøerne være præget af faglig bredde og fleksibilitet, der løfter forskellige kombinationer af funktioner og opgaver inden for life science og det materialeteknologiske område. Den faglige bredde betyder, at fyrtårne de ikke alene har fokus på ESS og neutronspredning, men typisk vil anvende et bredt udsnit af tilgængelige analyseteknikker. På samme måde vil miljøerne virke langs hele værdikæden og hermed også beskæftige sig med områder som syntetisering (fremstilling), modellering og/eller anvendelse af nye avancerede materialer. Fyrtårnsmiljøerne har således ikke snævert fokus på neutronforskning, men under-

støtter i bred forstand kapacitetsopbygningen på det bio- og materialevidenskabelige område. Fyrtårnene skal i den sammenhæng sikre:

- Videnskabelig excellence
- Strategisk fokusering af den danske kapacitetsopbygning
- Brobygning og samspil mellem dansk forskning, erhvervsliv og forskningsfaciliteter
- Synlighed og attraktivitet

Figur 1. Formål og hovedmålsætninger med fyrtårnsmiljøer



Videnskabelig excellence

Fyrtårnsmiljøerne skal sikre et højt videnskabeligt niveau i den fremtidige kapacitetsopbygning. Det betyder, at fyrtårnsmiljøer skal etableres på områder, hvor der er stor sandsynlighed for, at der over de kommende år kan opbygges et forskningsmiljø, der på sit område er blandt de førende i verden. Det kan eksempelvis dreje sig om forskningsområder, hvor dansk forskning har særligt gode forudsætninger for at opbygge en international styrkeposition.

Strategisk fokusering af den danske kapacitetsopbygning

Dansk forskning kan ikke være førende på alle områder. Derfor er der behov for at fokusere den fremtidige kapacitets- og kompetenceopbygning på områder, som har strategisk betydning for dansk forskning og/eller dansk erhvervsliv. Etableringen af få, men strategisk udvalgte fyrtårnsmiljøer skal sikre, at kapacitetsopbygningen ikke alene sker inden for den snævre neutronforskning, men kommer til at omfatte nye forskningsfelter inden for det bio- og materialevidenskabelige område, som kan udnytte nærheden til ESS og de øvrige materialeforskningsfaciliteter.

Brobygning mellem forskning, erhvervsliv og forskningsfaciliteter

Opbygningen af få, men slagkraftige og strategiske fyrtårnsmiljøer handler også om at sikre, at der findes forskningsmiljøer med den nødvendige størrelse og kapacitet til at varetage en række opgaver inden for brobygning og samspil med omverdenen. Forskningsmiljøerne skal således sikre brobygning og samarbejde med ESS og øvrige relevante storskalafaciliteter. En sådan brobygningsfunktion kan omfatte en lang række forskellige aktiviteter – eksempelvis i forhold til instrumentopbygning (og efterfølgende drift af et eller flere instrumenter), delte stillinger, uddannelse ph.d.-studerende ved ESS samt uddannelse af 'instrument scientist' på ESS (se nedenstående tekstboks).

Erhvervsmæssigt samspil

Det store erhvervsmæssige udbytte af ESS er i høj grad knyttet til samspillet mellem universiteter og virksomheder. Derfor er det helt afgørende, at de kommende års kapacitetsopbygning, sker i tæt dialog og tilknytning til dansk erhvervsliv og finder sted på områder, som er relevante for dansk erhvervsliv. Det kunne for eksempel dreje sig om et fyrtårnsmiljø, der anvender ESS til at analysere og syntetisere biologiske materials struktur og funktionalitet, hvilket ikke bare har stor forskningsmæssig betydning, men også har betydning for virksomheder inden for fødevare-, ingrediens- og lægemiddelindustrien. På samme måde vil det være oplagt, hvis et fyrtårnsmiljø kunne understøtte virksomhedernes kompetencebehov, når det gælder udvikling og analyse af nye funktionelle materials opbygning og egenskaber, hvilket har et stort anvendelsesmæssigt potentiale for fremstillingsindustrien.

Synlighed og attraktivitet

Fyrtårnene skal bidrage til at sætte Danmark og dansk forskning på landkortet, når det gælder forskning, innovation og teknologisk udvikling inden for life science og det materialeteknologiske område. Miljøernes størrelse og faglige tyngde og kvalitet skal sikre, at Danmark fremstår som et højteknologisk vidensamfund med særlige spidskompetencer inden for udvikling og anvendelse af nye og avancerede materialer, hvilket er vigtigt for tiltrækningen af forskningstaler og udenlandske videnvirksomheder. Derfor vil kombinationen af verdensførende forskningsfaciliteter og internationalt anerkendte forskningsmiljøer være med til at sætte Danmark på landkortet og gøre det lettere at tiltrække virksomheder til landet.

1.3 Fyrtårnenes funktionalitet og organisering

Selvom fyrtårnsmiljøerne naturligt vil være præget af en stor forskellighed, vil miljøerne også være kendetegnet ved en række fællestræk når det gælder deres funktionalitet og organisering. Der vil også være stærke synergi- og samspilsmuligheder mellem fyrtårnene, ikke mindst mhp. uddannelser/forskerskoler, samspil med industri gennem industriportalen LINX - *Linking Industry to Neutrons and X-Rays* og de danske instrumentprojekterne på ESS og MAX IV.

Tydelig ledelse og faglig sammenhæng

Der vil naturligvis være mange muligheder for den konkrete organisering af de enkelte fyrtårnsmiljøer. Det er imidlertid et bærende princip, at miljøerne er kendetegnet ved en stærk og samlet forskningsfaglig ledelse, der er i stand til at sikre faglige kvalitet og sammenhæng i aktiviteterne, og som vil få ansvaret for prioritering af fyrtårnenes aktiviteter. Fyrtårnenes ledelse skal støttes af en videnskabelig referencegruppe, som består af repræsentanter fra de universiteter, videninstitutioner og virksomheder, der deltager i partnerskabet. Referencegruppen skal sammen med centerlederen foretage de overordnede prioriteringer af centerets forskningsaktiviteter.

Opbygning af partnerskaber

Fyrtårnsmiljøerne etableres som et inkluderende partnerskab mellem værtsinstitutionen, relevante videninstitutioner samt interesserede virksomheder. Det betyder også, at fyrtårnenes faglige profil og forskellige aktiviteter/indsatser tager afsæt i partnernes forskellige ønsker og interesser. Det er derfor naturligt, at miljøernes referencegruppe udpeges af de involverede forskere, virksomheder og videnmiljøer. De involverede partnere bidrager alle til finansieringen af fyrtårnet.

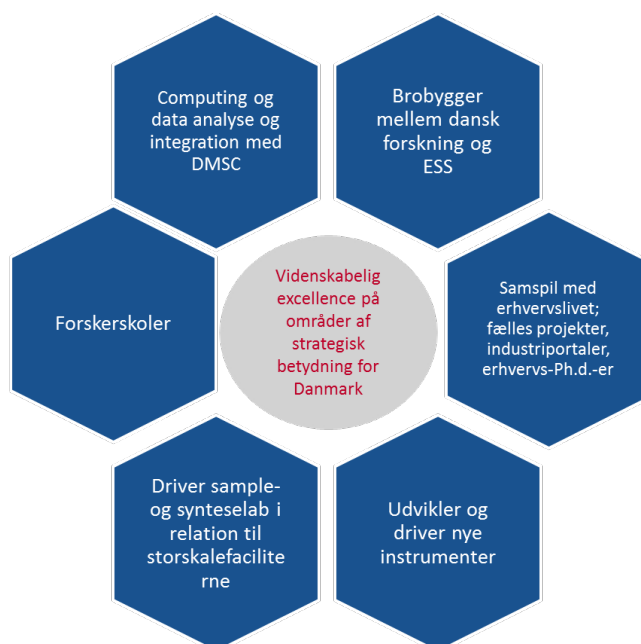
Kritisk masse og lokalisering på værtsinstitution

Fyrtårnsmiljøerne skal have en størrelse, som dels sikrer videnskabelig dynamik, og dels skaber synlighed omkring den forsknings- og innovationsmæssige styrkeposition, der opbygges i Danmark. Et forsigtigt estimat peger på, at hvert fyrtårnsmiljø bør i udgangspunkt have en størrelse på omkring 15-20 faste forskere samt en række ph.d.-studerende og postdocs for at kunne sikre tilstrækkelig kritisk masse. Fyrtårnsmiljøerne vil i udgangspunktet formelt etableres på en enkelt værtsinstitution, hvor der findes betydelige kompetencer på det udvalgte forskningsområde. Det er imidlertid afgørende at der etableres samspil og samarbejde med relevante samarbejdspartnere på andre universiteter/videninstitutioner, således at kompetenceopbygning på det pågældende fag- og forskningsområde kommer til at understøtte det samlede danske videnmiljø.

Faglig fleksibilitet

Fyrtårnsmiljøerne faglige bredde og fleksibilitet betyder at miljøerne ikke vil få samme faglige profil og opgaveportefølje, men derimod løfte forskellige kombinationer af funktioner og opgaver, der er tilpasset det enkelte fyrtårns særlige profil, styrkeposition og potentialer. Det betyder eksempelvis, at et fyrtårnsmiljø ikke alene vil have fokus på de analytiske aspekter ved materialeudviklingen, men også kan beskæftige sig med syntese og/eller industriel fremstilling af nye materialer. Muligheden for at kunne gå hele vejen fra fremstilling af materialeprøver til karakteristik og analyse af materialet er således helt centralt for nogle forskningsmiljøer. For andre miljøer spiller synteseaktiviteter måske en mindre fremtrædende rolle. Her vil der i stedet være større vægt på analyse og modellering af eksperimentelle data.

Figur 2. Fyrtårnenes funktionalitet – eksempler på mulige aktivitetsfelter



På samme måde som der er forskel på fyrtårnenes rent forskningsfaglige fokus, vil der også være forskel på miljøernes brobygnings- og samspilsaktiviteter. Et fyrtårn vil således have særligt fokus på at bygge bro til ESS gennem deltagelsen i opbygningen og den efterfølgende drift af et instrument på ESS. Det vil typisk dreje sig om miljøer, som har stort fokus på udvikling af analyseteknikkerne, og som kan understøtte andre forskningsmiljøers anvendelse af forskningsfacili-

teterne. Andre fyrtårne vil have større fokus på at understøtte de erhvervmæssige behov for viden og forskning og vil eksempelvis fokusere dele af deres forskningsaktiviteter på områder, som er særligt vigtige for det omkringliggende erhvervsliv. Det vil også være naturligt, at de industriportaler, der i dag er under opbygning, bliver en funktionalitet i fyrtårnsmiljøerne.

2. Strukturbiologi og molekylær bioteknologi (NEULIFE)

Vision

NEULIFE vil danne et innovativt og internationalt ledende forskningsmiljø i strukturbiologi, som integrerer brugen af neutronstråling på ESS med øvrige, strukturbiologiske metoder. Forskningen vil stile mod nye gennembrud i forståelse af biologiske molekylers struktur og funktion og dermed fremme de cellebiologiske og bioteknologiske videnskaber. Denne videnskab er fundamentet og idegrundlaget for lægemiddelindustrien og bioteknologiske virksomheder og bidrager tillige med ekspertviden, metodeudvikling og højtuddannet arbejdskraft til forskningstunge virksomheder i lægemidler, bioteknologi og fødevarer. NEULIFE skal fokusere på eksperimentelle og metodeudviklende studier af biomolekylære og cellulære strukturer og deres dynamik, og således bidrage til epokegørende forskningsresultater, metoder og applikationer i akademisk og industriel forskning. Fyrtårnsmiljøet skal opdyrke og fremme en synergi af ESS neutronforskning med MAX IV, XFEL og den eksisterende og opbyggende kapacitet på de danske universiteter i eksempelvis EM, NMR, massespektrometri, fluorescens-baserede metoder, og integrativ biofysisk modellering. Fyrtårnsmiljøet skal tilgå centrale, uløste problemer i den generelle biologiske/biomedicinske forskning og knytte tætte bånd til start-up miljøer, GTS institutter og industri, så dansk investering i ESS udnyttes og udbredes maksimalt i det danske samfund. En stærk, strategisk mulighed for at opbygge unik, dansk position på integrativ strukturbiologi/proteinteknologi kan ikke overbetones til fx protein engineering i udvikling af bioteknologiske enzymer og terapeutiske proteiner, samt udvikling af nye lægemidler.

Perspektiver og styrkepositioner

Studier af biomolekylers struktur og funktion danner et essentielt grundlag for bioteknologi og farmaci. Danmark huser en stor og forskningstung industri baseret på proteinteknologier. Produkterne fra industrien kan i sig selv være proteiner (for eksempel lægemidler eller protein-baserede fødevaringredienser), være baseret på forskellige former for proteinaktiviteter (fx biosyntese, enzymer, biomaterialer) eller være småmolekyler udviklet til at fungere i interaktion med proteiner (fx lægemidler eller vitaminer). Virksomhederne beskæftiger tusinder af proteinforskere i Danmark, og værdien af eksportvarer med stærkt afsæt i proteinforskning kan estimeres til over 120 mia. kr. om året. Proteinforskning og teknologi udgør tillige et stærkt afsæt for bioteknologisk spin-out/start-up. For at opretholde en dansk førerposition på industriel udvikling og produktion af bioteknologi, lægemidler og fødevarer, som er afgørende for Danmarks økonomi, er det afgørende nødvendigt, at de danske forskningsmiljøer kan levere nye strategigrundlag, højkvalificeret arbejdskraft, og kerneekspertise på de fremmeste metoder. NEULIFE skal udvikle og stille faciliteter, ekspertise og know-how til rådighed for danske og udenlandske forskningsmiljøer, deltage i og udvikle værktøjer til industriportaler og GTS-teknologiudvekslinger samt danne basis for samarbejdsprojekter og innovationskonsortium med industrien. For at tilføje international vægt og synlighed i opbygningsfasen foreslås det, at NEULIFE tilknyttes det nordiske EMBL partnerskab i molekylær medicin.

Danmark har opbygget en række verdensførende forskningsgrupper i strukturbibliologi med verdensførende og højt anerkendte laboratorier i makromolekylær krystallografi småvinkelspredning, massespektrometri, og NMR samt højt anerkendte laboratorier i fluorescensmikroskopi/spektroskopi og biologisk EM. Emnemæssigt har man opbygget førende/stærke positioner indenfor meget konkurrencedygtige forskningsområder såsom *membranproteiner*, herunder receptorer og transportproteiner i hjerne- og muskelvæv, planter og mikrober, *enzymkomplekser*, herunder fotosyntese, energiomsætning, green chemistry og biosyntese af værdifulde stoffer, *immunsystemet*, herunder inflammatoriske og cancer-relaterede signalveje, *proteinfoldning og fibrillering*, herunder neurodegenerative sygdomme, *protein-RNA* og *protein-DNA* vekselvirkninger i proteinsyntesen og regulering af genekspression, samt *DNA/RNA origami* til opbygning af nanoteknologiske strukturer. Protein-ligand interaktioner studeres i tæt integration med bioteknologi og medicinalkemisk forskning, og ligeledes udforskes dynamik af makromolekylære og cellulære processer i tidsskalaer fra femtosekunder til minutter og timer i biologiske systemer fra bakterier til menneske.

De strukturbibliologiske miljøer i Danmark omfatter pt. over 50 lektorer/professorer (hovedvægt AU og KU, men også DTU, SDU, AAU, RUC, SSI) og større virksomheder som Novo Nordisk og H. Lundbeck.

Struktur og organisering

NEULIFE tænkes at få hovedsæde på Aarhus Universitet og tillige at basere sig på infrastruktur på Københavns Universitet, Danmarks Tekniske Universitet og Syddansk Universitet. Ligeledes vil udbredelse af fyrtårnets aktiviteter, ekspertise og infrastruktur inddrage hele det danske forskningsmiljø, akademisk som industrielt. Centrale forskningsledere fra deltagende institutioner og virksomheder udgør et nationalt repræsentantskab, ligesom værtsinstitutionerne udpeger en overordnet bestyrelse. En styregruppe understøtter en direktør, som varetager den videnskabelige ledelse. Danske strukturbibliologiske forskere anvender p.t. ikke neutronstråling i stort omfang, og derfor bliver et hovedinitiativ en rekruttering af især yngre gruppeledere, som tilfører kritisk ekspertise og opbygning af nye forskningsaktiviteter i kapacitetsopbygning. Desuden opbygges infrastruktur omkring eksisterende strukturbibliologiske miljøer, som kan understøtte og integrere neutronforskningen i en fælles fordring om integrativ strukturbibliologi, der kombinerer mange forskellige metoder. Senere i opbygningsfase tilføjes et strukturbibliologisk konsortium af virksomheder med fælles interesse i anvendelse af strukturbibliologiske metoder, der inddrager neutronforskning som unik og faciliterende komponent.

3. Kolloid- og Grænseflade-forskning: Fødevarer, Ingredienser og Lægemiddelformulering

Vision

Fødevarer, ingredienser og lægemiddeldområdet udgør tilsammen omkring 1/3 af Danmarks eksport og det er et område i fortsat vækst. Dette understøttes blandt andet af vores store landbrugssektor hvor Danmark er det land med den tredjestørste landbrugssektor i verden (relativt set). Med årlig eksport på mere end 100 mia. kroner og salg til mere end 130 lande (tal fra 2012) udgør de fødevarerrelaterede produkter omkring en sjettedel af landets eksport. Ligeledes udgør lægemiddeldområdet en voksende andel af landets eksport. Det foreslås derfor at der etableres et dansk ESS fyrtårnsmiljø indenfor området ”Kolloid- og Grænsefladeforskning: Fødevarer, Ingredienser og Lægemiddelformulering”. Fyrtårnet samler aktiviteterne i fem særdeles aktive grupper indenfor grundforskning og anvendt forskning i et felt, hvor der internationalt er stærk tradition og oplagte muligheder for at anvende neutronbaserede metoder til at opnå unik ny viden. Fyrtårnet vil tage ansvar for at sikre, at der sker en generel videns- og kompetenceopbygning på området og at der som en del af dette bliver etableret tætte samarbejdsbånd til ESS. Dette skal skabe basis for excellent forskning indenfor grundlæggende kolloid og grænsefladeforskning i fagmiljøerne fysik og kemi, men også styrke den vidensbasis, som ligger til grund for en bred vifte af direkte anvendelser indenfor fødevarer, ingredienser og lægemiddelformulering. Dette er felter, hvor Danmark allerede har stærke og tungt forskningsbaserede industrier og hvor det er særdeles oplagt at den helt grundlæggende indsigt, der kan opnås ved de unikke strukturelle analyser, der vil kunne foretages med neutroner på ESS og med røntgen på MAX IV vil kunne bidrage signifikant til en styrket udvikling.

Perspektiver og styrkepositioner

Adskillige store danske virksomheder, især indenfor farma, fødevarer og biotek områderne baserer deres produkter på viden om og kontrol af kolloid- og grænseflade systemer. I de seneste 10-20 år har meget af grundforskningen inden for feltet, både i Danmark og internationalt, foregået i en bredere kontekst af nanovidenskab og til dels syntesebiologi. Med inddragelsen af de allernyeste metoder og muligheder, ikke mindst ved det kommende ESS og MAX-IV og de nyeste resultater indenfor computersimuleringer og teoridannelse, er feltet i løbet af de sidste 10 år blevet modnet til at kunne håndtere langt mere komplekse systemer og problematikker end tidligere. Det gør det nu endeligt muligt at realisere nogle af de mange visioner, der igennem alle årene har drevet forskningen indenfor feltet. Disse inkluderer for eksempel ”targeted drug delivery”, dvs. lægemiddel-formulering der tillader målrettet, persontilpasset og dermed mere sikker medicin. Smarte fødevarer-ingredienter, der fx kan give mælkeprodukter en lækker og cremet

konsistens trods lavt fedtindhold. Maling, der giver selv-rensende overflader og en helt generel bred vifte af avancerede selvorganiserende nanostrukturer til diverse specialiserede formål.

Med etableringen af ESS og MAX IV får Danmark en unik mulighed for at opbygge et internationalt særdeles konkurrencedygtigt dansk fyrtårnsmiljø indenfor kolloid- og grænsefladeforskning og som en del af dette signifikant at styrke stærke anvendelsesmiljøer indenfor fødevarer, ingredienser og lægemiddelformulering. *Derfor er det oplagt at tiden nu er moden til en større koordineret dansk satsning på området.*

Fyrtårnet skal have som ambition at være internationalt førende og fungere som det naturlige omdrejningspunkt for dansk forskning, uddannelse og innovation indenfor området. Miljøet skal have tilstrækkelig faglig tyngde til at kunne tiltrække de førende internationale forskere, både indenfor grundforskning og anvendt forskning samt til at uddanne de bedste studerende. Internationalt førende forskere knyttes til fyrtårnsmiljøerne, enten via ansættelser eller forskningssamarbejder, bidrager til at styrke universiteternes undervisning på området og samarbejder med internationale virksomheder med afsæt i en base i Danmark. Fyrtårnsmiljøet skal endvidere spille en rolle som industriportal i forhold til de af fagområdets virksomheder, der endnu ikke har selvstændig erfaring i at benytte faciliteter som ESS. Med fyrtårnsmiljøet vil dansk forskning på et strategisk vigtigt område blive centrum for viden og kompetence indenfor feltet og dermed understøtte at Danmark også i fremtiden er vært for store succesfulde virksomheder indenfor Fødevarer, Lægemiddel og Life Science området.

I Danmark findes der i dag 3-4 mindre, men internationalt særdeles anerkendte forskergrupper inden for den grundvidenskabelige kolloid- og grænsefladeforskning. Disse grupper benytter sig i stor stil af røntgen og neutroner og herunder internationale storskalafaciliteter i deres forskning. Uafhængigt af dette har Danmark store anvendelsesorienterede miljøer i de universitetsgrupper, der arbejder indenfor fødevarerforskning og lægemiddelforskning og som i høj grad baserer sig på eksisterende viden om kolloid- og grænsefladesystemer og spiller en essentiel rolle i forhold til at bygge bro mellem grundforskningen og de industrielle anvendelser. Endelig har Danmark store industrielle spillere i dette felt. Disse findes især indenfor fødevarer- og ingrediensindustrien samt i lægemiddelindustrien.

Struktur og organisering

Fyrtårnet får sin hovedbase og bliver styret på Københavns Universitet, hvor der allerede er flere meget stærke miljøer indenfor feltet og herunder mangeårig ekspertise i anvendelse af neutroner og røntgen. Fyrtårnet vil blive styrket yderligere ved at have stærke lokale noder på hhv. Aarhus Universitet og Danmarks Tekniske Universitet som begge har internationalt toneangivende forskning indenfor feltet. Fyrtårnsmiljøet vil derudover tage ansvar i forhold til at styrke og koordinere neutron og røntgen aktiviteterne i det bredere danske forsknings- og anvendelseslandskab indenfor feltet. Det vil ske ved at etablere et bredere repræsentantskab, der inddrager forskere i en række grupper med direkte relevante aktiviteter indenfor feltet. I første omgang repræsenteret ved forskere på Roskilde og Syddansk Universitet. For at sikre et godt samarbejde og ikke mindst relevans for den del af dansk industri, der skal styrkes ved forskningen, vil forskere fra store danske virksomheder, i første omgang Novo Nordisk og Arla blive inddraget direkte i repræsentantskabet. For at sikre at den viden og de kompetencer, der bliver opbygget, også kommer mindre danske virksomheder til gavn og således er med til at danne base for en fortsat blomstrende industri indenfor fødevarer-, ingrediens- og lægemiddelområdet, vil udvalgte GTS-institutioner, i første omgang Teknologisk Institut i Aarhus og Bioneer i København ligeledes blive inddraget direkte. Fyrtårnet grænser naturligt op til fyrtårnsmiljøet for struktur og

cellebiologi og fyrtårnsmiljøet for polymerforskning og vil derfor blive koordineret særligt tæt med disse miljøer.

4. Polymerer og Bløde Materialer

Vision

Visionen er et samfund med materialer af høj kvalitet baseret på fornybare resurser hvor biobrydelighed er indbygget afhængig af materialets forventede anvendelsestid. Det store udfordring på polymerområdet i de kommende årtier er at udvikle nye polymermaterialer, der kan erstatte de eksisterende, som på trods af fremragende egenskaber og kolossal succes har to alvorlige problemer. Polymermaterialerne fremstilles ud fra fossile resurser - som af klimahensyn ikke vedblivende kan bruges - og polymermaterialerne er i mange sammenhænge for holdbare hvilket giver anledning til alvorlige affalds- og forureningsproblemer med plast og mikroplast i verdenshavene som det alvorligste. Denne problemstilling vil fungere som en ledetråd for fyrtårnsmiljøet i polymerer og bløde materialer når udvikling af nye materialer behandles.

Områdernes grundlæggende forståelse af processering af nye polymermaterialer og udvikling af nye funktionelle materialer vil være et særligt fokus og det vil blive søgt at integrere designet biobrydelighed i materialerne. Innovation og vækst på området kræver fastholdelse og styrkelse af den videnskabelige og industrielle position. Hertil kræves en koordineret indsats med opbygning af endnu stærkere miljøer i dansk forskning. Der foreslås derfor opbygget et fyrtårnsmiljø indenfor polymerer og andre bløde materialer, for at udnytte ESS og MAX IV bedst muligt med henblik på generel materialeforståelse og mulighed for udvikling af nye materialer med attraktive egenskaber. Forskning i de "bløde materialer" er generelt meget afhængig af adgang til neutron og røntgeninstrumenter. Fyrtårnet skal derfor knyttes tæt til ESS og MAX IV, men andre metoder vil også blive benyttet. Det skal være materialesiden der er i centrum. Fyrtårnet vil dermed agere som portal for danske virksomheder generelt, som gennem samarbejdsprojekter kan blive inspireret til nye produkter, og få adgang til ekspertise til hjælp med løsning af konkrete problemer.

Perspektiver og styrkepositioner

Polymerer og andre 'bløde materialer' udgør en stor gruppe af materialer med meget bred portefølje af anvendelsesmuligheder. Materialerne omfatter både naturlige biomolekyler, der fås fra planter eller dyr, og syntetiske stoffer. Klassiske anvendelser af biopolymerer findes fra træindustri og papirfremstilling, til tøj og fødevarer. Syntetiske polymerer findes i en lang række dagligdagsprodukter, fra plast og isoleringsmaterialer til tilsætningsstoffer i alt fra motorolie til tandpasta. Polymerer er "levende materialer" som reagerer på eksterne påvirkninger som sol, vand, salt og kemiske stoffer, samt mekanisk belastning. Det har betydning for anvendelsen af bløde materialer i alt fra bildæk og møbler til slidstærke coatings på vindmøllevinger og proteineres effekt på overfladen af tekniske komponenter såvel som levende celler. Fokus for fyrtårnet vil derfor være på at forstå sammenhængene mellem molekylers kemi, molekyleres struktur og evne til at selvansamle, og materialernes makroskopiske egenskaber og respons på mekaniske, kemiske og fysiske påvirkninger. Afgørende for forskningen på dette område er at kunne afkode struktur og dynamik af molekyler i fx de biologiske materialer for derved at kunne udvikle nye funktionelle materialer med attraktive egenskaber. Fyrtårnet skal være centreret omkring excellent forskning i bløde materialer, og har som mål at blive blandt de internationalt førende

centre indenfor dette forskningsfelt. Det skal opnå en status som vil tiltrække de bedste unge kandidater fra såvel Danmark som internationalt, og give dem mulighed for at starte egen forskningsprofil.

Der er ikke noget alternativ til neutronspreddning ved undersøgelse af form og struktur af "spaghettien" af komplekse polymerer og ved studier af molekylernes komplekse dynamik når de vikles ind og ud af hinanden - processer som er afgørende for både de mekaniske egenskaber og deres opførsel under forarbejdning. Fyrtårnsmiljøet vil i en kombination af erfarne forskere og unge forskningsgruppeledere uddanne ph.d'er og postdocs der arbejder med disse områder. Nogle af disse vil blive i forskningsmiljøerne og nogle vil finde beskæftigelse i dansk og international industri. Danmark har en lang række polymerforarbejdende virksomheder indenfor et meget bredt spektrum af produkter. Plastindustrien i Danmark beskæftiger ca. 30.000 personer og det forventes at der kan skabes adskillige projekter i samarbejde med denne industri. Samtidig er også en meget stærk dansk tradition for bioteknologiske virksomheder med kompetencer der vil kunne udnyttes til en ny generation af fremstillingsmetoder for nye og bæredygtige polymermaterialer med designet nedbrydelighed. Potentialet for nye virksomheder og nye arbejdspladser er derfor stort. Fyrtårnsmiljøet Polymerer og Bløde Materialer vil drive fundamental forskning i verdensklasse og sikre, at den høje kompetence der herved udvikles, bringes i spil i samarbejde med andre danske interessenter - virksomheder og andre forskningsmiljøer. Formålet er at udvikle ny grundlæggende materialeforståelse, og på sigt dermed danne grundlaget for at udvikle og designe resursevenlige materialer med optimale egenskaber.

Der er en stærkt forankret tradition i Danmark for polymerbaseret forskning. Danske forskere er internationalt førende på en række områder indenfor studier af bløde materialer. Denne position er opnået på baggrund af en tværfaglig tilgang med basis i fysisk, kemisk og materialevidenskabelig forskning. De strukturelle studier udført med røntgen- og neutronmetoder er koblet til de nødvendige ekspertiser i polymersyntese og -karakterisering, teori, mikroskopi, reologi og processering. Fyrtårnet til udnyttelsen af ESS og MAX IV ligger i direkte forlængelse af denne forskning, og er dermed garanti for stort forskningsmæssigt potentiale. Dertil har Danmark en industriportefølje som er afhængig af højkvalitets materialer, og er kritisk afhængige af kvalitets-sikrede materialer baseret på polymerer og andre bløde systemer.

Struktur og organisering

Fyrtårnet vil forankres på DTU og Københavns Universitet, men med væsentlige samarbejdsprojekter med såvel øvrige danske universiteter som forskningsinstitutioner og industri. Fyrtårnet skal have primær forankring på et enkelt institut på enten KU eller DTU. Forskere fra såvel KU som DTU vil være de centrale personer i centret og har allerede en lang tradition for samarbejde, som dokumenteret gennem mange fælles artikler og fælles ph.d.-studerende. Det forventes at der vil være 15-20 fastansatte forskere tilknyttet fyrtårnet (lektorer/professorer), samt et tilsvarende antal ph.d.-studerende, postdocs og andre forskere i deres tidlige karrierer. De øvrige større danske universiteter, AU, AAU, SDU og RUC samt Teknologisk Institut skal knyttes til fyrtårnet gennem fælles projekter og fælles ph.d.-studerende. ESS og MAX IV vil knyttes til på tilsvarende vis. De ph.d.-studerende vil indskrives på de universiteter hvor det giver mest mening, men alle studerende vil jævnligt opholde sig på Fyrtårnets primæradresse, for at sikre samhørighed og for at opnå størst mulig synergi.

5. Hårde materialer i 3D(SOLID)

Vision

Industrielle sektorer som produktion, metal, energi, off-shore og miljøteknologier beskæftiger over 150.000 personer i Danmark. Gennemgående er konkurrenceevnen af disse afhængige af fremstillingen af nye komponenter baseret på hårde materialer med skræddersyede egenskaber på mange længdeskalaer. Optimerede materialeløsninger er nødvendige uanset om man designer fremtidens 3D printede metalkomponenter til pumper, porøse materialer til omdannelse eller rensning af gas og væsker, biokompatible materialer til implantater eller kompositmaterialer af særlig styrke til vindmøllevinger. Forskning i hårde materialer er således central for at adressere en række samfundsudfordringer relateret til forøget produktivitet, grøn omstilling, ressource-knaphed og sundhed.

Hidtil er udvikling og optimering af de hårde materialer typisk sket gennem en dyr og langsommelig trial-and-error proces med gentagen syntese, forarbejdning og test af slutproduktet. Amerikanske og europæiske strategirapporter om fremtidens materialeforskning er i disse år præget af en vision om i stedet at kunne udnytte computere til at designe materialer. Dermed ville industrien kunne forkorte design processen (hurtigere "time-to-market"), afprøve langt flere designs og spare ressourcer til fremstilling og test. For langt de fleste produkter er de nuværende computermodeller af materialerne imidlertid langt fra gode nok til at understøtte denne vision.

Fyrtårnet "Hårde Materialer i 3D" vil overkomme denne forhindring ved at anvende en ny tilgang. Ved at kombinere de hver for sig overlegne kilder, ESS og MAX IV, bliver det muligt at kortlægge den indre mikrostruktur af et materiale fra nanometer til millimeter med uovertruffen nøjagtighed og hurtighed – og det tilmed i 3D. Hermed kan man for første gang på alle relevante længde- og tidsskalaer "se" hvad der sker med materialet under fremstilling, mens det arbejder eller i forbindelse med dets nedbrydning. Al erfaring viser at forbedret visualisering på afgørendende vis leder til formulering af bedre materialemodeller – og bedre muligheder for at validere disse. *Fyrtårnet har derfor som ambitiøst mål at være det første til at integrere 3D eksperimenter og 3D simuleringsværktøjer på mange længde-skalaer (fra 10 nm og opad). Denne spydspidsposition er muliggjort af dansk pionerarbejde over de seneste 15 år mht. såvel de eksperimentelle metoder som tilhørende dataanalyse.*

Fyrtårnets overordnede vision er at bruge denne samlede 3D metodik som en døråbner til design af nye og forbedrede materialer. Da metoden er generisk kan den finde anvendelse indenfor mange industrisektorer samtidigt.

Perspektiver og styrkepositioner

Evnen til at skræddersy materialer til specifikke anvendelser er en *key enabling technology* og har historisk været en nøgle til overlevelse og rigdom. Fremtiden vil i endnu højere grad kræve en stor diversitet af højt specialiserede materialer. Samtidig er forskning i hårde materialer central for at adressere en række samfundsudfordringer:

Forøget produktivitet: Produktionsapparatet i Danmark er gennem de seneste år blevet drastisk reduceret. Udviklingen af nye højværdi materialer, produktionsmetoder, og kvalitetskontrollsystemer med stort vidensindhold vil føre til en forøget produktivitet, som sikrer de danske virksomheder en styrkeposition i en globaliseret verden. Som omtalt peger en række amerikanske og europæiske strategiplaner samstemmende især på behovet for at finde og producere nye materialer og komponenter og optimere gamle i et langt højere tempo end i dag.

Grøn omstilling: Et dansk samfund uden brug af fossile brændsler kræver i høj grad design, fremstilling og anvendelse af materialer til omdannelse og lagring af bæredygtigt produceret energi, herunder særligt omdannelse mellem elektricitet og gas ("power-to-gas") samt materialer til bygning af konstruktioner udsat for ekstrem mekanisk og kemisk påvirkning. Gode eksempler på sådanne materialer er elektrolyse-/brændselsceller, katalyse, solceller, , batterier, etc. Blandt konstruktionsmaterialerne kan nævnes materialer til store off-shore vindmøller. På transportsiden skal udviklingen gå i retning af lette stærke materialer til effektiv fossilfri transport. Disse er alle områder, hvor Danmark har førende virksomheder; både store internationale virksomheder samt spirende virksomheder i vækst indenfor nicheanvendelser af materialeteknologi.

Ressourceknaphed og miljø: Alternativer til nuværende materialer er bydende nødvendig i mange tilfælde, hvor der gøres brug af sjældne eller giftige grundstoffer eller hvor udvindingen af disse er politisk kontrolleret. Som eksempel er udvinding af sjældne jordarter i dag koncentreret i Kina. Nikkel og kobber er blevet dyre materialer pga. øget anvendelse i lande som gennemgår stor industriel vækst. Nye miljøregulativer, der forbyder brug af bly, krom osv. medfører også et konstant pres på innovation mht. materialer. Fremtidens energieffektive vandrensning vil benytte porøse materialer med multiskala design, hvilket også er en af dansk industris styrkepositioner.

Sundhed. I takt med at folk bliver ældre og rigere stiger behovet for materialer til medicinske anvendelser. For eksempel skal implantater til hofte og led i fremtiden holde væsentlig længere for at undgå at skulle erstattes.

Materialeforskning er i sit væsen multidisciplinær og arbejder på multiskala. Fyrtårnet bruger imaging-teknologi på længdeskalaer fra nanometer og opad og bringer komplementære videnskabelige styrkepositioner indenfor neutron- og røntgenmetoder, materialevidenskab, materialeteknologi, energiforskning, biomaterialer og geologiske materialer fra DTU, KU og AU sammen. Dertil er føjet anvendt matematik som en helt essentiel brik, specielt i relation til behandling af store datamængder og visualisering. De institutter der indgår i projektet har alle en stærk international forskningsprofil. Fyrtårnet vil indgå i industripartnerskaber indenfor materialeforståelse, multiskalamodellering og materialedesign og bidrage til konkrete projekter, hvor specifikke materialeproblemstillinger defineret af industrien løses. Dette vil i høj grad ske i samarbejde med samfundspartnerskaber som de eksisterende LINX og FASTTRACK og med inddragelse af GTS'er og tilgrænsende aktiviteter som MADE.

Struktur og organisering

DTU vil være vært for fyrtårnet. I tilknytning til dette er en række infrastrukturer til 3D karakterisering enten under opførelse eller planlagt. Det drejer sig om såvel instrumenter i Lund og på andre store faciliteter, som et lokalt 3D imaging center. DTU er også vært for flere komplementære faciliteter herunder "Villum Center for Advanced Structural and Material Testing". Det samlede miljø vil blive langt det største i Skandinavien – og tilmed tæt på Lund med mange

synergimuligheder. Dette elitemiljø vil herved kunne tiltrække de bedste forskere og studerende fra udlandet. Miljøet vil fungere som et nationalt og internationalt kompetence og uddannelsescenter for neutron- og røntgen-imaging, multiskalamodellering og materialedesign. Dette involverer også understøtning af imaging anvendelser indenfor andre discipliner, såsom polymerer, fødevarer og medicin. Specielt vil miljøet stå for en del af kompetenceopbygningen på neutronområdet, med uddannelse af over 150 kandidater og 50 PhD'ere alene på DTU.

6. Magnetisme og kvantematerialer

Vision

Den hurtige udvikling indenfor IT og forbrugerelektronik er en utrolig teknologisk succeshistorie. Et eksempel er Apollo 11 månelandingen i 1969 som blev gennemført med en computerregnekraft, der er langt mindre end hvad en moderne mobiltelefon tilbyder. Den teknologiske udvikling er resultatet af et samspil mellem ingeniørkunst og grundvidenskabelig forståelse af især metaller og halvlederes elektriske egenskaber. Successen baserer sig i stor stil på et af det 20. århundredes helt store opdagelser i fysikken, nemlig at disse materialer i hovedtræk kan forstås ved brug af kvantemekanikkens regler anvendt på enkelte elektroner.

En omfattende klasse af materialer kaldet kvantematerialer følger ikke dette paradigme. Disse materialers egenskaber kan ikke forstås ud fra enkelt-elektron billedet, men kræver i stedet et favntag med en kvantemekanisk beskrivelse af mange vekselvirkende elektroner; herunder de magnetiske egenskaber, der fremkommer som en konsekvens af vekselvirkningerne. Kvantematerialer har et rigt potentiale for at danne basis for det 21. århundredes teknologiske landvindinger på højde med transistoren i det 20. århundredes, men før kvantematerialer kan kontrolleres, må vi forstå deres grundlæggende fysiske egenskaber.

Med det formål at forstå og udvikle nye kvantematerialer, og dermed adressere store samfundsudfordringer indenfor IT-teknologi, sundhed og energi, foreslår vi opbygning af et neutron-fyrtårnsmiljø indenfor "Magnetisme og kvantematerialer". Fyrtårnsmiljøet vil udnytte de unikke muligheder, som ESS giver for at kortlægge kvantematerialers magnetiske egenskaber. Fyrtårnet vil fokusere på udvikling og forståelse af nye permanent magnetiske materialer til f.eks. vindmøllegeneratorer, nye superledere til transport af strøm uden tab og forbedrede MR-scannere, samt nye multi-funktionelle og kvante-magnetiske materialer der vil facilitere fremtidens IT, herunder kvantecomputere. Fyrtårnsmiljøets faglige ballast inden for neutronspreddning og dets meget stærke tilknytning til ESS vil sikre, at Danmark deltager i frontforskningen indenfor kvantematerialer og derigennem opnår den viden og ekspertise, der skal til for på sigt at udvikle teknologiske løsninger baseret på disse.

Visionen for fyrtårnsmiljøet er at skabe et inspirerende dansk forskningsmiljø i international topklasse, der er attraktivt som base eller samarbejdspartner for udenlandske topforskere indenfor magnetisme og kvantematerialer. Miljøet opbygges igennem uddannelse af yngre forskere på ph.d. og postdoc niveau, opbygning af nye laboratoriefaciliteter, der er komplementære til ESS, og tiltrækning af de mest talentfulde yngre forskere på stadiet før de opnår en permanent stilling

Perspektiver og styrkepositioner

Et fyrtårnsmiljø indenfor magnetisme og kvantematerialer vil koble den danske forskning indenfor området direkte til ESS - både fordi neutroner er uundværlige til studiet af magnetiske egenskaber, og på grund af miljøets engagement i ESS instrumentet BIFROST, der er designet netop til studier af kvantematerialer. I Danmark arbejder en række grupper med anvendelser af magnetisme og superledning, er meget aktive indenfor neutronspreddning, samt publicerer i førende tidsskrifter som *Nature* og *Science*. For at opnå kritisk masse for miljøet, og for at maksimere

den danske udnyttelse af ESS, vil det være et hovedmål at påbegynde neutronaktiviteter i de relaterede grupper, der i dag ikke anvender neutronspreddning. På samme måde lægges der vægt på at forøge aktiviteten i grupper, som kun anvender neutron-baserede teknikker i beskeden grad, f.eks. i relation til magnetisk køling, anvendelser af superledere, magnetiske mineraler, og magnetiske metoder til kvantecomputing. Med henblik på at sikre konkurrencefordele for danske virksomheder med interesse i magnetiske materialer og kvantematerialer, vil fyrtårnsmiljøet prioritere at informere bredt om materialernes teknologiske potentiale, og vil etablere virksomhedssamarbejder indenfor avanceret materialeudvikling. Fyrtårnsmiljøets aktiviteter og den geografiske nærhed til ESS skal endelig medvirke til skabe grobund for at tiltrække en udviklingsafdeling fra en eller flere førende globale elektronik og IT virksomheder til Danmark. Fyrtårnets indledende forskningsplan vil være at studere de fire nævnte typer kvantematerialer, især med neutronspreddning, for at forstå deres opførsel. *Det er målet for fyrtårnet - med afgørende input fra numerisk og analytisk teori - at udvikle nye kvantematerialer af fundamental og industriel interesse, der kan nå markedet indenfor en tidshorisont på 10-20 år.*

Traditionelt har dansk forskning været stærk indenfor den gren af materialefysikken som i dag indbefatter kategorien kvantematerialer. Traditionen strækker sig helt tilbage til store danskere som H.C. Ørsted (elektromagnetismen) og Niels Bohr (kvantemekanikken) op til i dag, hvor højteknologiske danske virksomheder skaber arbejdspladser baseret på avancerede materialer. Fyrtårnet "Magnetisme og kvantematerialer" vil, i forbindelse med ESS, blive en unik platform for at udvide disse aktiviteter via tiltrækning af de dygtigste forskere og nye teknologier, samt en markant styrkelse af de nuværende aktiviteter indenfor syntese af nye kvantematerialer. Her vil de to dansk-byggede ESS instrumenter HEIMDAL og BIFROST spille en vigtig rolle. Forskning indenfor magnetisme var et af flagskibene i forskningen omkring neutronkilden DR3 på Risø. Faciliteten lukkede i 2000, hvorefter forskningsaktiviteterne overgik til de danske universiteter og de eksperimentelle forsøg forankredes på neutronkilden SINQ ved Paul Scherrer Institutet i Schweiz. Den gruppe forskere, der udsprang af miljøet omkring DR3, og senere fandt ansættelse på universiteterne, har i årene 1987-2016 publiceret hele 20 neutron-artikler i de førende tidskrifter: *Nature*, *Nature Materials*, *Nature Physics*, *Nature Chemistry* og *Science*. Heraf falder 18 indenfor de fagområder der er dækket af dette fyrtårn. Miljøet omkring fyrtårnet indenfor magnetisme og kvantematerialer udgiver i dag ca. halvdelen af alle danske neutron-publikationer, og blandt de 25 danske neutronforskere og -studerende med flest neutron-publikationer er 15 fra dette miljø. Disse tal illustrerer, at personkredsen bag nærværende fyrtårnsbeskrivelse er dedikerede neutronbrugere på et højt niveau.

Struktur og organisering

Aktiviteterne inden for forskningsfeltet er i dag primært baseret på KU og DTU, og disse universiteter vil i fællesskab være værter for fyrtårnsmiljøet. Kerne-gruppen i det eksisterende miljø er flittige anvendere af neutronspreddning, eller laver teoretisk arbejde i relation til de eksperimentelle aktiviteter. Denne personkreds har en mangeårig tradition for samarbejde i forskellige konstellationer, og en meget stærk tilknytning til ESS og andre internationale neutronfaciliteter. Fyrtårnets vækstlag består af en gruppe talentfulde yngre forskere i adjunkt og post doc stillinger, samt af fastansatte forskere - herunder fra Center for Quantum Devices og Station Q-Copenhagen (KU), samt fra Quantum Physics and Information Technology (DTU) - som arbejder med nært relaterede emner såsom topologiske materialer, kvante-computing og kvante-informationsteknologi. Fyrtårnets daglige ledelse bliver en direktion bestående af en repræsentant fra DTU og en fra KU. Disse støttes af en direktionssekretær. Direktionen er ansvarlig overfor en styregruppe, der består af alle ansøgere på lektor/professor niveau, junior-professorer

som ansættes i forbindelse med fyrtårnet, og repræsentanter for Teknologisk Institut og interesserede større virksomheder. Det overordnede ansvar for fyrtårnet ligger hos en bestyrelse, med repræsentanter på institutleder/dekan niveau for alle implicerede universiteter, hvilket i dag vil sige KU, DTU og AU.

7. Funktionelle Materialers Atomare Struktur

Vision

Mange af de største globale udfordringer, f.eks. indenfor energi, klima, drikkevand, fødevarer og sundhed, kræver udvikling af nye avancerede funktionelle materialer. Modsat tidligere kan disse ikke udvindes ved primær minedrift eller baseres på naturstoffer, men må fremstilles ved avanceret kemisk syntese. De stadigt større krav til materialernes egenskaber kræver udvikling baseret på en grundlæggende forståelse af samspillet mellem materialernes fremstilling, atomare struktur og egenskaber. Hvis den atomare struktur er designet forkert, mangler materialet de grundlæggende funktionelle egenskaber. De samfund, som bedst formår at udvikle unikke materialer, står med en stor fordel i fremtidens konkurrence. Dansk industri kan ikke konkurrere på lav løn og masseproduktion, og vi er afhængige af at sælge høj-kvalitetsprodukter med avancerede egenskaber.

Det er Fyrtårnets overordnede vision at blive verdensførende indenfor forskning i funktionelle materialers atomare struktur for derigennem bredt at kunne understøtte Danmarks muligheder for både at løse kritiske globale udfordringer, men også sikre betydelig økonomisk vækst i en stærk konkurrenceudsat vidensøkonomi.

Viden om materialers atomare struktur udgør grundlaget for rationelt design af nye materialer f.eks. indenfor energi, katalyse, byggeri, elektronik, medicin, miljø og fødevarer, og nærværende Fyrtårn vil derfor bredt kunne understøtte dansk industri. Fyrtårnet vil have særlig fokus på de kommende danske instrumenter, Heimdal på ESS og DanMAX på MAX IV, som vil blive bygget og drevet af Fyrtårnets forskere ved Aarhus Universitet. Heimdal og DanMAX vil give unikke muligheder for at udnytte neutron- og synkrotronstrålingens komplementære styrker idet de to beamlines har samme videnskabelige sigte og vil blive drevet af de samme interessenter. Disse instrumenter vil give revolutionerende nye forskningsmuligheder idet den enorme intensitet på ESS og MAX IV f.eks. muliggør ekstremt detaljerede studier af "Real Materials in Real Time under Real Conditions". Dette er modsat i dag, hvor man typisk studerer idealiserede materialer langt fra deres anvendelsesbetingelser. Herved vil det f.eks. blive muligt at forstå kemiske synteseprocesser på atomart niveau, hvilket kan føre til et paradigmeskift indenfor materialeproduktion, idet tiden til optimering og opskalering potentielt kan reduceres. Dette kan give danske virksomheder en vigtig konkurrencefordel.

Perspektiver og styrkepositioner

Et materials egenskaber, og dermed funktion, afgøres af dets atomare struktur, dvs. identiteten af de enkelte atomer, deres indbyrdes rumlige placering, deres kemiske bindinger og deres bevægelse (dynamik). De stærkeste metoder til at undersøge materialers atomare struktur er neutron- og røntgendiffraktion, som giver indsigt på Ångstrøm- og nanometer-skala. Dette er komplementært til såkaldte 3D imaging-studier, der typisk beskæftiger sig med materialer på mikrometer- eller millimeter-skala. Danmark har en lang tradition indenfor studier af funktionelle materialers atomare struktur, og Aarhus Universitet fremstår som en international spydspids,

der har medvirket i opbygning af beamlines, udstyr og analysemetoder på en lang række neutron og synkrotronfaciliteter rundt om i verden. Et vigtigt eksempel på et felt, hvor indsigt i materials atomare struktur er helt essentiel, er *energimaterialer*. Det moderne industrialiserede samfund baserer sig på udnyttelsen af fossilt brændstof. Disse fossile reserver forudsiges opbrugt i løbet af få generationer, og fortsat udnyttelse af fossilt brændstof vil uvægerligt have store klimamæssige konsekvenser. Danmark har et mål om at være uafhængig af fossile brændstoffer i 2050, og fokus på udvikling af alternative energikilder, der baserer sig på vedvarende energi, er afgørende for Danmark. Indenfor moderne energiteknologi er avancerede funktionelle materialer uundværlige, og stort set alle energiteknologier er afhængige af materialer med specielle egenskaber. Overgangen til et bæredygtigt samfund drives af nye energi-materialer: termoelektriske materialer kan genindvinde spildvarme, genopladelige batterier kan muliggøre udnyttelse af ikke-konstante energikilder (vind, sol, vand), solceller kan høste energi fra en "uendelig energikilde", hybrid-magneter kan omsætte bevægelsesenergi til elektrisk energi f.eks. i vindmøller, katalysatorer kan sikre bedre omdannelse af kemiske ressourcer og uskadeliggøre miljøfarlige spildstoffer, osv. Rationel udvikling af effektive teknologier kræver, at materialernes atomare struktur er kendt, og neutron- og synkrotronstudier vil spille en afgørende rolle.

Udvikling af avancerede materialer kræver samtidig stærke aktiviteter indenfor materialesyntese - uden materialer, ingen studier. Fyrtårnets fysiske forankring vil sikre, at neutron- og røntgenaktiviteterne kobles med stærk ekspertise i syntese samt adgang til komplementære eksperimentelle faciliteter og moderne computersimuleringsmetoder. Området er kendetegnet ved, at Danmark besidder stor ekspertise samtidig med, at der er en række beslægtede fagmiljøer og industrier, som med stor fordel vil kunne udnytte de nye muligheder i Lund, og derved skabe stærk videnskabelig og kommerciel vækst. Den sammenhængende indsats vil gøre Fyrtårnet attraktivt for topforskere fra hele verden, der med rette finansiering vil kunne tiltrækkes til Danmark. Der forefindes derfor en unik mulighed for at opbygge et verdensførende forskningsmiljø på et felt af stor strategisk betydning for Danmark

Struktur og organisation

Fyrtårnet tænkes fysisk forankret på Aarhus Universitet omkring de stærkeste danske aktiviteter indenfor området, og det tager udgangspunkt i et exceptionelt nationalt vækstlag af fremragende unge forskere på AU, KU, SDU og DTU. Fyrtårnet vil bygge og drive de danske beamlines Heimdall og Danmax, og dermed også blive en vigtig del af en dansk "forskningsstation" i Lund, der vil fungere som kontaktpunkt for alle danske forskere. Samtidig vil Fyrtårnet gennem direkte samarbejder, industriportal og brede kursusudbud forestå en effektiv kompetenceopbygning på tværs af universiteter, virksomheder og GTS institutter, hvilket vil sikre at den store investering i ESS og MAX IV udnyttes maksimalt af det danske samfund. Fyrtårnet foreslås at bestå af ~10-15 kerneforskningsgrupper, hvoraf mange grupper ledes af stærke unge forskere godt på vej mod deres faglige højdepunkt. Fyrtårnet er derfor exceptionelt godt positioneret til maksimal udnyttelse af ESS og MAX IV, når kilderne åbnes. Udover Fyrtårnets kerneforskere, er der mindst 50 danske forskere på lektor- og professorniveau, der hyppigt bruger viden om atomar struktur i deres forskningsaktiviteter, og de vil derfor have stærke faglige snitflader. Fyrtårnet vil desuden understøtte en national servicekrystallografisk funktion, hvilket effektivt vil kunne bringe anvendelsen af neutron- og synkrotronstråling ud til et stort antal nye danske forskningsgrupper f.eks. indenfor syntese kemi.

8. ESS teoricer

Vision

De internationale investeringerne i ESS, MAX IV og XFEL vil, sammen med nye større nationale i forskningsinfrastruktur, muliggøre en bedre forståelse af materialers og biologiske systemers struktur og dynamik. Et særligt kendetegn er den høje koncentrationen af avanceret udstyr i og i nærheden af Danmark, samt en årelang tradition i Danmark for en tæt kobling mellem teoriudvikling og eksperimentelle studier. ESS investeringen giver en enestående lejlighed til at foretage en organisering på tværs af de instrumentelle miljøer og faglige grupperinger. *Denne organisering kan katalyseres ved dannelsen af et ESS teoricer, som skal danne kimen til at udnytte alle faciliteter på tværs og derved danne en 'integrativ' angrebsvinkel til at kombinere al data og information, og dermed udnytte forskningsinfrastrukturen optimalt. Ved at etablere et ESS teoricer kan de teoretiske grupper desuden befrugte hinanden på tværs af fagmiljøerne og inspirere hinanden til nye teoretiske angrebsvinkler og til at løse fælles udfordringer på for eksempel big data og high performance computing området.* ESS teoricerets formål er at stille og definere overordnede, langtrækkende forskningsmæssige spørgsmål og derved tegne de videnskabelige retninger og muligheder for eksperimenterne på ESS og de andre større infrastrukturer, samt i særdeleshed at udnytte de muligheder, der ligger i at kunne kombinere flere typer eksperimenter og informationer.

Perspektiv og styrkepositioner

Den fulde bredde af ESS' potentielle muligheder fra materialer til biologi giver en udfordring i at skabe et synligt og kohærent forskningsprogram omkring ESS *udover* det at være en brugerfacilitet. Denne udfordring kan løftes af en stærk teorigruppe som har til opgave at understøtte udviklingen af et kohærent program, hvori der er en stærk vekselvirkning både internt i ESS og eksternt med de eksperimentelle grupper i Danmark. ESS teoriceret vil i særlig grad kunne være trendsættende i at beskrive de dynamiske egenskaber af materialer og biologiske systemer, et område som vil være i videnskabelig fokus i det kommende årti, og som også har store anvendelsesmæssige perspektiver indenfor både materialer, bioteknologi og lægemidler. De attraktive forskningsmiljøer ved ESS vil tiltrække mange gæsteforskere til de eksperimentelle faciliteter, og også tiltrække forskningseksperter, som ønsker at være i nærheden de nye faciliteter, til det danske samfund. Et teoricer inden for hårde og bløde materialer samt biologiske systemer vil kunne inspirere og samle nye perspektiver inden for denne forskning samt sætte nye pejlingsmærker for ESS til glæde for det danske forskningslandskab både på universiteterne og den videnstunge erhvervssektor. Det vil desuden være meget attraktivt for udenlandske gæsteforskere at tilbringe kortere eller længere ophold ved teoriceret for derved at bidrage til den videnskabelige udvikling og danne bro til de videnskabelige miljøer i ESS' partnerlande, en rolle lig den NORDITA har haft for udviklingen af teoretisk fysik i Norden. ESS teoriceret vil i særdeleshed være en magnet via et stærkt gæsteforskerprogram og ved at tiltrække mange ph.d.-studenter, postdocs og adjunkter.

ESS teoriceret vil være en væsentlig styrkelse af væsentlige aktiviteter i det danske forskningslandskab. For eksempel arbejder Center for Quantum Devices på Niels Bohr Institutet tæt sammen med Microsofts ingeniører om udviklingen af helt nye superleder-halvleder hybrid materialer med henblik på at fremstille 'topologisk beskyttede kvantebits' til fremtidens kvante-computere. Materialeudviklingen er essentiel i dette arbejde. Gruppen fungerer således allerede

som bindeled, ikke blot mellem forudsigelse og realitet, men også mellem centre, forskningsområder og faggrupper, og ESS er en naturlig tilføjelse til denne portefølje.

I det danske forskningslandskab er der adskillige stærke grupper, som kan koble op til et ESS teoricenter. I den teoretiske forskningsgruppe for faststoffysik på Niels Bohr Institutet er der en gruppe af forskere med stor international gennemslagskraft og ekspertise i teoretiske beregninger for faste stoffer i bred forstand. Både på DTU og ved Det fysiske Institut ved Aarhus Universitet er der stærke grupper inden for materialefysikken, som er førende på området "density functional" teori, der er basis for at kunne beskrive funktionaliteten af materialer til for eksempel katalyse. Et hovedfokusområde er energimaterialer med anvendelser inden for katalyse, elektrolyse, batterier, solceller mm, alle områder, hvor der er et væsentlig dansk økonomisk potentiale i form af nye nøgleteknologier, som vil sikre et bedre fremtidigt miljø og et mindre energi forbrug. Grupperne har gode internationale samarbejdsrelationer. På de kemiske institutter på både Københavns og Aarhus Universitet er der stærke forskningsmiljøer, der udvikler og anvender kvantemekaniske beregninger til fx at optimere enzymer til bioteknologiske anvendelser.

På Biologisk Institut på Københavns Universitet og ved Kemisk Institut på Aarhus Universitet er der stærke internationale miljøer inden for biomodellering, simulering og biologisk "high-performance computing". Grupperne baserer sig på modellering af biologiske molekyler og proteiner, med ekspertise indenfor vekselvirkninger mellem proteiner og lægemidler, herunder lægemiddelresistens, samt sammenspillet mellem proteins struktur, funktion og dynamiske egenskaber. Andre fokuspunkter er membranproteiner og proteiner hvis aggregering giver ophav til neurodegenerative sygdomme (Alzheimers og Parkinsons syge). Et særkende ved grupperne er deres bredde i samarbejdet omkring de eksperimentelle teknikker, som omfatter en bred palet af strukturbioologiske metoder. Derved opnår de at samle mange grupper med forskellige eksperimentelle indgange, og at inkludere ESS-baserede eksperimenter, gerne også dynamiske, vil være ganske uproblematisk. Derudover er der grupper på Syddansk Universitet og ved Roskilde Universitet, som bør inddrages i forbindelse med bløde materialer, biofysiske systemer, væsker og glasser.

Struktur og organisation

Teoricenterets hovedaktivitet bør forankres ved et universitet, som i væsentlig grad også medfinansierer centeret i form af faste stillinger og i et tæt samarbejde med ESS. I tillæg til finansiering fra medvirkende universiteternes forventes der medfinansiering til Fyrtårnet fra central statslig side (eller fra bidrag fra private fonde, erhvervsliv med videre) på mindst halvdelen af de samlede udgifter.