

# Fagpanelet for nano- og materialeteknologi

---

*Kortlægningsrapport om nationale behov for forskningsinfrastrukturer*

## **Fagpanelets medlemmer**

Formand: Professor Flemming Besenbacher, Interdisciplinært Nanoscience Center, Aarhus Universitet

Professor Thomas Bjørnholm, Kemisk Institut, Nano-Science Center, Københavns Universitet

Professor Anja Boisen, DTU Nanotech, Institut for Mikro- og Nanoteknologi, Danmarks Tekniske Universitet

Professor Jesper de Claville Christiansen, Institut for Produktion, Aalborg Universitet

Professor Sine Larsen, Kemisk Institut, Københavns Universitet

Professor Kell Mortensen, Institut for Grundvidenskab og Miljø, Københavns Universitet

Professor Horst-Günter Rubahn, Mads Clausen Instituttet, Syddansk Universitet

## Indhold

1	Nye tendenser og behov for forskningsinfrastruktur .....	3
1.1	Tendenser og samfundsmæssige perspektiver .....	4
1.2	Behov for forskningsinfrastruktur.....	5
1.2.1	Analyse (karakterisering) af materialer og nanostrukturer .....	5
1.2.2	Fremstilling (syntese) af nye materialer og nanoprodukter .....	7
1.2.3	Materialemodellering .....	7
2	Panelets prioriterede forskningsinfrastrukturer.....	8
2.1	Dansk nano- og energimateriale målestation ved MAX IV .....	9
2.2	Dansk GHz Faststof NMR-Instrumentcenter.....	10
2.3	Målestation til synkrotronstrålingkilden ASTRID2.....	11
3	Behov for forskningsinfrastruktur på mellemlangt sigt (5 – 10 år) .....	12
3.1	Syntesefaciliteter i rentrum .....	12
3.2	Materialeteknologisk forskning .....	13
3.3	Højopløsende sekundærion massespektrometer (nanoSIMS).....	14
4	Behov for særskilte aktiviteter eller midler, som kan fremme danske forskeres adgang til og brug af forskningsinfrastrukturer .....	15
4.1	Følgforskning og infrastrukturcentre .....	15
4.2	Behov for ændret arbejdsdeling og mere fokuseret indsats .....	15

## 1 Nye tendenser og behov for forskningsinfrastruktur

Nanoscience og -teknologi handler om at undersøge, karakterisere og manipulere materialer og processer på atomart niveau – dvs. ned til omkring en milliontedel af en millimeter eller ca. 1/5 af afstanden mellem to atomer i en metalkrystal. Ved at kontrollere materialers atomare opbygning på denne meget korte længdeskala kan man designe og syntetisere materialer, komponenter og systemer med nye funktionelle egenskaber uden paralleller på makroskopisk skala.

Materials science er den forskning, der er knyttet til materialekarakterisering, materialefremstilling, materialeforarbejdning (processering), undersøgelser af basale materialeegenskaber samt materialeanvendelser i en meget lang række sektorer i det moderne højteknologiske samfund. Mange aspekter af moderne materialeforskning kan i princippet opfattes som en underkategori af nanoscience, idet forskningen ofte sigter mod at karakterisere, forstå, designe og fremstille materialer med kontrol på en nanometer and sub-nano (atomar) længdeskala.

Områderne vil i det følgende blive omtalt som *materials science og nanoscience*, der er den internationalt anerkendte betegnelse for forskningsfeltene. Begge kan beskrives som *basis teknologier*, der er grundlagskabende, og som har mange industrielle applikationer.

Gennem de seneste 10-15 år har forskningen gennemgået en dramatisk udvikling, hvor man ved at kontrollere materialers atomare opbygning på nanoniveau kan man designe og fremstille materialer, komponenter og systemer med helt nye banebrydende egenskaber. Det har eksempelvis skabt mulighed for design af nye funktionelle materialer, der er mere robuste, holdbare og miljøvenlige end dem, vi kender i dag. Samtidig har de videnskabelige landvindinger skabt helt nye muligheder for at styre og manipulere processer på nanoniveau. Det betyder eksempelvis, at vi kan designe elektroniske kredsløb, der er så små, at de kan injiceres i menneskekroppen eller få behandlingsformer, der virker så præcist, at det medicinske præparat først aktiveres, når det kommer frem til den syge del af kroppen.

Udviklingen inden for materials science og nanoscience har derfor ikke alene betydning for den snævre forskning inden for områder som kemi, fysik og biologi, men har stor betydning for forskning over en bred vifte af områder. Samtidig åbner forskningen for en mængde industrielle applikationer og muligheden for innovation inden for mange forskellige erhvervsområder. Det danske samfunds evne til at frembringe og nyttiggøre ny viden inden for materiale- og nanoområderne er derfor helt afgørende for, at erhvervslivet kan skabe nye produkter og produktionsmetoder baseret på det højeste niveau af viden.

Nanoscience er af natur tværvidenskabelig, og involverer de klassiske discipliner fysik, kemi, molekylærbiologi, biologi, medicin og materials science. Ved at kombinere viden, kompetencer og forskningsteknikker fra disse forskningsfelter er der de seneste ti år åbnet for en lang række videnskabelige og teknologiske nybrud, som også vil få afgørende betydning for den fremtidige udvikling i industrien og det øvrige erhvervsliv.

Materials science- og nanoscienceområderne har i de seneste ti år været drevet af udviklingen af en lang række avancerede og sofistikerede teknikker til analyse, fremstilling og modellering af materialer og nanostrukturer. Specielt hvad angår analyse af materialer og strukturer på en mikro- og nanoskala, er der sket en imponerende udvikling af en hel suite af avancerede instrumenter og forskningsfaciliteter, der har skabt grundlæggende ny viden om materialers og nanostrukturers egenskaber og funktionalitet. Det gælder bl.a. ift. materialers geometriske og elektroniske strukturer, deres kemiske sammensætning og elektriske og magnetiske egenskaber, samt deres indbyrdes samspil.

## 1.1 Tendenser og samfundsmæssige perspektiver

Vi skal i det følgende kort beskrive områder, hvor den øgede forståelse af materialer og evnen til at fremstille nye materialer har ført til en række videnskabelige og teknologiske gennembrud, som vil kunne få meget stor betydning for den erhvervsmæssige udvikling og innovation i det danske samfund.

- Funktionelle nanomaterialer. Betegnelsen dækker over de mange nye muligheder for at designe materialer med avancerede egenskaber. Overfladebelægninger er et eksempel på en anvendelse, der allerede er udbredt: Man dækker materialer med tynde overfladebelægninger, hvorved man kan skabe et materiale med præcist de egenskaber, som efterspørges – eksempelvis høj hårdhed, god varmebestandighed eller høj brudstyrke. Nanokompositter er en anden type perspektivrige funktionelle materialer. De findes allerede i naturen, f. eks. i knogler og muslingeskaller, men nye nanokompositmaterialer benyttes i stigende omfang i en række sektorer. Et sidste eksempel er udviklingen af nye former for cement. Omkring 5 % af verdens CO<sub>2</sub>-udledning stammer fra cementproduktion, men gennem en dybere forståelse og modifikation af produktionsprocesserne vil man bl.a. kunne nedsætte energiforbruget og/eller CO<sub>2</sub>-udledningen betydeligt.
- Udvikling af energi- og miljørigtige teknologier. Det vil i de kommende år af miljø-, forsynings- og samfundsmæssige årsager blive helt afgørende at udskifte fossile brændstoffer med mere effektive og ”rene” energiteknologier. De helt nødvendige gennembrud i energiproduktions-, konverterings- og lagringsteknologier vil i høj grad være afhængig af nybrud inden for udviklingen af nye nanomaterialer. Udfordringerne er mange, og man må arbejde over en bred front, som sigter mod nye og forbedrede nano-energimaterialer:
  - Energiproduktion: nanostrukturerede halvledersolceller, nye typer solceller baseret på polymerer og organiske farvestoffer, nye nanokompositmaterialer til møllevinger og tårne, katalysatorer til andengenerations biobrændstof.
  - Energilagring: batterier, nanoporøse materialer til brint, katalysatorer til konvertering af elektricitet til flydende brændstof, fotokatalysator til produktion af flydende brændstof.
  - Energiforbrug: mere effektive belysningsteknologier, udvikling af rentable brændselsceller, batterier samt nanokatalysatorer.
- Elektronik. Allerede i dag er it og elektronik baseret på nanoteknologier; det gælder for mobiltelefoner, smart phones, bærbare computere, fladskærme, digitale kameraer, lagringsmedier, osv. Deres udbredelse er en konsekvens af, at dimensionerne på elektroniske kredsløb er nået ned i nanoområdet. Udviklingen vil de kommende år fortsætte og gøre it-apparatur endnu mindre og hurtigere. Inden for en overskuelig fremtid vil grænsen for de eksisterende teknologier imidlertid være nået. Det langsigtede perspektiv for nano- og materialeforskningen er derfor at udvikle den såkaldte molekylære elektronik, hvor komponenterne opbygges af molekyler, hvis funktionalitet er styret af kvanteeffekter.
- Sundheds- og fødevarerområdet. Der sker i disse år megen spændende forskning i krydsfeltet mellem fysik/kemi og biologi-molekylær biologi/medicin, ofte kaldet nanomedicin. Tilsvarende, om end stadig i mindre omfang, er der en stærkt voksende interesse for fødevarers nanoskala egenskaber. Visionen inden for nanomedicinområdet er 1) at udvikle nanopartikler, som transporteres rundt i blodbanen, hvor de transporterer medicin til kun de celler/organer, som skal behandles og således undgå bivirkninger; 2) at udvikle nye nanostrukturerede overflader til implantater, der kombineret med stamcelleforskning vil kunne føre til forbedret gendannelse af ødelagt væv og organer; 3) Med afsæt i molekylærbiologiske strukturanalyseteknikker at udvikle ny medicin, som specifikt blokerer/forstærker afgørende transport- eller signaleringsprocesser eller udbedrer de molekylære celleforandringer i cellen, som fører til sygdomme; 4) at udvikle målemetoder og nanosensorer, som vil tillade en meget tidlig diagnose, samt lø-

bende overvåge udvikling af sygdom; 5) at studere eventuelle bivirkninger og toksikologiske effekter som de nye landvindinger inden for nanoteknologi måtte have, hvor især brugen af frie, luftbårne nanopartikler giver anledning til bekymring. Med disse nye initiativer er der skabt en enestående mulighed for at udvikle et tværvideenskabeligt forskningsområde, som på afgørende vis vil kunne forbedre forebyggelse, diagnostik og behandling af en lang række livstruende sygdomme.

## 1.2 Behov for forskningsinfrastruktur

International frontforskning er baseret på et "give-and-get"-princip, hvor adgang til de nyeste forskningsresultater og de bedste forskere er betinget af, at man også har forskergrupper, der leverer forskning på højeste internationale niveau. Det betyder, at kun hvis Danmark har forskningsgrupper i den internationale elite, kan Danmark uddanne excellente ph.d.-studerende og juniorforskere, producere fremragende forskningsresultater og patenter og samtidig få førstehåndskendskab til de seneste internationale forskningsresultater og den nyeste teknologi.

Adgangen til avancerede og tidssvarende forskningsinfrastrukturer afgrænser sig imidlertid ikke til en enkelt type apparatur. Det er derimod afgørende, at danske forskere har adgang til en suite af forskellige instrumenter inden for analyse/karakterisering, fremstilling (syntese) og modellering. Nogle af disse infrastrukturer er så store og kostbare, at de opbygges enten i tilknytning til store internationale faciliteter, typisk en målestation ved en spredningsfacilitet, eller placeret på udvalgte institutioner i Danmark, hvor der findes den tilstrækkelige videnskabelige og tekniske knowhow til at kunne drive en avanceret unik infrastrukturfacilitet på internationalt niveau. På andre områder kan der etableres store nationale faciliteter, som er enkelte stykker unikt apparatur eller samlinger af i sammenhængen mindre kostbart instrumentel, og endelig områder, hvor det enkelte universitet/forskningsråd bør være ansvarlig for at finansiere adgangen til helt basalt apparatur. Hvis dansk forskning skal gøre sig gældende inden for materiale- og nanoområdet, er der derfor behov for en bred indsats, hvor alle aktører (ministerium, forskningsråd, private fonde og universiteter) hver især spiller en vigtig rolle for at gøre de rigtige værktøjer tilgængelige for nano- og materialeforskerne. Det betyder, at det er afgørende at skelne mellem, hvad der nødvendigvis må koordineres og finansieres gennem en national indsats, og hvad der er forskningsrådenes og institutionernes opgaver. I det følgende belyses den hidtidige indsats samt de fremtidige behov for forskningsinfrastruktur på følgende tre områder:

- Analyse (karakterisering) af materialer og nanostrukturer
- Fremstilling (syntese) af nye materialer og nanoprodukter
- Modellering

### 1.2.1 Analyse (karakterisering) af materialer og nanostrukturer

Specielt inden for karakteriseringsteknikker sker der hele tiden nye tekniske fremskridt, der muliggør eksperimenter med større nøjagtighed og højere opløsning. Dette forhold skaber et vedvarende stort behov for etablering af nye og opgradering af eksisterende forskningsinfrastruktur.

En ny tendens er karakterisering af materialer under betingelser, som i højere grad ligner de arbejdsbetingelser, som materialer opererer under i den virkelige verden. Eksempelvis kan nævnes undersøgelser af biologiske molekyler under betingelser, der minder mere om deres naturlige omgivelser i stedet for i den krystallinske tilstand, som er nødvendig for detaljeret strukturbestemmelse *via* røntgenspredning.

Danmark har historisk set været og er stadig meget stærk inden for materialeanalyse (karakterisering), som udføres på en hel suite af udstyr som scanning probe mikroskoper (SPM), spektrometre (fx kernemagnetisk resonans, NMR) samt små og (meget) store instrumenter beregnet til foton- eller neutronspreddning. Udnyttelsen af komplementaritet mellem forskellige måleteknikker er et gennemgående og essentielt træk ved al nano- og materialeforskning.

Danmarks kompetencer inden for spredningsteknikkerne er funderet i aktiviteter på Forskningscenter Risø i 1960'erne, hvor man hurtigt indså, at Danmark burde fokusere på uddannelse af unge forskere til at bruge de nye store spredningsfaciliteter, som skød op rundt omkring i verden. Det var også i denne periode, at neutronspredningsaktiviteterne ved Risøs DR2-og DR3-reaktorer tog fart og bragte Danmark op i verdens-eliten inden for feltet. Som et resultat heraf ser vi i dag, selv efter lukningen af forskningsreaktorerne ved Risø, stadig væsentlige danske bidrag på internationalt niveau, og i dag udnytter danske forskere med stort udbytte synkrotronstråling på internationale faciliteter verden over: MAX LAB i Lund, ESRF i Grenoble, SLS i Zürich, ALS i Berkeley, APS i Chicago, SPring8 i Japan, og der er opbygget en unik dansk national facilitet for VUV- og blød røntgenstråling på Aarhus Universitet. På neutronstrålingsområdet er Danmark engageret i Paul Scherrer Institutet ved Zürich og ved ILL i Grenoble og desuden markant i forbindelse med den nye europæiske ESS-facilitet, der bliver verdensførende til neutronstråleforskning, og som p.t. er ved at blive opbygget i Lund. Danmark har sikret sig stærk indflydelse på design, adgang til brugerfaciliteterne på ESS og placering af ESS Data Management Center i Danmark.

For spredningsteknikker gælder omvendt proportionalitet mellem størrelserne på forskningsinfrastruktur og de strukturer, man ønsker at undersøge. Udviklingen går således mod stadigt større faciliteter, der kan frembringe mere intens stråling end tidligere (dvs. flere fotoner eller neutroner). Det skyldes, at en mere intens stråling giver mulighed for at analysere (karakterisere) materialer og nanostrukturer mere nøjagtigt. Etableringen af ESS i Lund og opbygningen af XFEL i Hamburg er eksempler på denne udvikling. Historisk har det vist sig, at der med forbedrede strålingskilder følger nye muligheder for materialekarakterisering. Derfor er det vigtigt, at danske forskere får mulighed for at præge design og konstruktion af de nyeste strålingskilder og tilhørende målestationer, så de fremadrettet kan drage størst mulig fordel af de nye muligheder. Ikke blot nedsætter en højere intensitet den nødvendige måletid, men lavere emittans og mere fokuserede røntgenstråler vil give mulighed for højtopløst billeddannelse (se afsnit 2.1 og 2.3).

Der sker desuden for øjeblikket en spændende udvikling af såkaldte fri-elektronlasere, der kan producere røntgenstråling med ekstremt høj intensitet. Sådanne kilder muliggør helt nye typer eksperimenter, som ikke er mulige på synkrotronbaserede kilder, og som kan vise sig at revolutionere forskningen. Danmark deltager allerede i design- og konstruktionsfasen af den Europæiske XFEL i Hamburg<sup>1</sup> og bør fortsætte med at være involveret i fremtiden, idet der kan forventes store videnskabelige gennembrud i kraft af den unikke stråling fra XFEL-faciliteten.

For at opretholde den succesfulde danske forskning med brug af strålemetoder, og for at sikre fortsat ekspertise inden for relevante forskningsfelter, når de nye forskningsfaciliteter, European XFEL, MAX IV og ESS etableres i løbet af de kommende ti år, er det vigtigt at bibeholde gode rammer for den danske forskning. I dag sikres disse gennem dansk medlemskab af synkrotronstrålingsfaciliteten ESRF i Grenoble (etableret gennem det nordiske samarbejde Nordsync), og Danmark indgik i 2009 prøvemedlemskab af neutronfaciliteten ILL i Grenoble, med henblik på egentligt medlemskab i løbet af få år. Derudover har Danmark med oprindelig basis i overførslen af 2 Risøinstrumenter bilaterale aftaler mellem PSI og henholdsvis Risø-DTU og DANSCATT, som giver adgang til udnyttelse af neutroninstrumenterne på PSI i Schweiz. Medlemskaberne støttes derudover gennem FNU-følgeforskningsprogrammet DANSCATT, som yder støtte til de ekstraordinære rejseudgifter, der er forbundet med forskning ved internationale faciliteter, og til postdocer udstationeret ved faciliteterne med henblik på optimal dansk udnyttelse. ESRF- og ILL-faciliteterne udgør stadig verdens førende instrumenter for materialestudier ved brug af røntgen- og neutronstråling. Det danske medlemskab sikrer optimal udnyttelse af danske ressourcer og kapaciteter, med resultater af danske stråleforskningsaktiviteter på højeste internationale niveau til følge. Samarbejdet med PSI sikrer danske forskeres deltagelse i design og udvikling af nye instrumenter, ligesom samarbejdet er optimalt for undervisning af

---

<sup>1</sup> bl.a. gennem en bevilling fra Infrastrukturpulje I

nye forskere inden for feltet. I kurser udbudt af danske universiteter indgår fx besøg ved PSI, hvor studenterne får mulighed for at lave egne stråleforsøg.

Det er panelets opfattelse, at det danske medlemskab af ILL bør gøres permanent, ligesom aftalerne med PSI fortsættes og bringes på nationalt niveau, f.eks. gennem aftale med DANSCATT.

Danske forskere har også markeret sig markant internationalt inden for kernemagnetisk resonans (NMR), og i 1996 blev der etableret nationale NMR-instrumentcentre på henholdsvis Carlsberg Laboratoriet og Aarhus Universitet finansieret af Det Naturvidenskabelige Forskningsråd. Udviklingen af NMR-spektroskopi har igennem de seneste årtier muliggjort detaljerede studier af strukturer på atomart niveau for en meget bred vifte af materialer spændende fra uorganiske systemer til biologiske makromolekyler.

For NMR gælder, at ultrahøj magnetfeltstyrke giver en meget væsentligt forøgelse i følsomhed og opløsningssevne i forhold til eksisterende instrumentel. Derfor vil nem adgang til et NMR-spektrometer med den højest tilgængelige magnetfeltstyrke give danske forskere en helt afgørende fordel i forhold til deres konkurrenter (se afsnit 2.2).

### **1.2.2 Fremstilling (syntese) af nye materialer og nanoprodukter**

Moderne faciliteter til at fremstille (syntetisere) materialer og nanostrukturer er altafgørende for at kunne udføre forskning, der har relevans for virkelighedens verden. Velkontrollerede fremstillingsprocesser (syntese) giver mulighed for gennem efterfølgende analyse at danne sig et samlet overblik over et nanomaterials fysiske, kemiske og biologiske egenskaber. Også for fremstillingsprocesser (syntese) gælder, at man nødvendigvis må råde over et stort antal forskellige teknikker til at fremstille alt fra funktionelle nanopartikler og nanomaterialer (overfladebelægninger/tynde film, nanostrukturerede eller selvsamlende materialer) til store bygningsemner.

Til forskel fra behovet for meget store analyse- og karakteriseringsfaciliteter gælder det for syntese, at man kan komme langt for relativt små midler, idet man typisk ikke behøver fremstille store mængder af et givent materiale for at kunne undersøge dets egenskaber.

Undtagelsen, der bekræfter reglen for størrelsen af synteseinvesteringer, er de såkaldte rentrum, der er nødvendige for at kunne fremstille materialer og strukturer, der er meget følsomme over for luftens støvpartikler, dvs. med enkeltkomponentstørrelser i mikrometerområdet og derunder. Rentrum kræver typisk selvstændige bygninger og altid et omfattende luftrensningsanlæg, der udskifter luften i laboratorierne flere gange i minuttet og dermed fjerner støvpartikler fra brugere og udstyr i fine filtre.

I Danmark er der efterhånden bygget et antal rentrum: DANCHIP (Danish Advanced Nanotech Center for Highly Integrated Production) på DTU repræsenterer den største investering (300 mio. kr.) inden for rentrumsfaciliteter. Desuden er der opbygget rentrumsfaciliteter i Aalborg, Århus (i tilknytning til det kommende "nanohus", der åbner i 2012) og ved SDU i Sønderborg.

Fremadrettet vil der til disse rentrum blive brug for opgradering af ældre procesudstyr, men specielt er der behov for en udvidelse af de materialer, der kan forarbejdes i rentrumsfaciliteterne – dvs. en udvikling fra primært silicium til fx polymerer og II-VI materialer. Det vil åbne mulighederne for bl.a. biomedicinske applikationer og opbygning af kvantedevices. En samlet strategi for samarbejde og arbejdsfordeling rentrummene imellem samt behov for investering i rentrumsinfrastruktur på mellemlangt sigt er fremkommet ved en dialog med repræsentanter fra rentrummene og beskrives i afsnit 3.1.

### **1.2.3 Materialemodellering**

Modelleringsområdet har gennemgået og gennemgår stadig en rivende udvikling, idet stadigt kraftigere computere og bedre teoretiske redskaber muliggør stadigt mere detaljerede beregninger på større og større systemer. Udviklingen går mod store klynger af hurtige processorer, der arbejder i parallel, i stedet for til

formålet specialbyggede supercomputere. På denne måde drager man fordel af de meget lave priser på konsumelektronik, der til beregningsformål blot forbindes i et netværk og arbejder på samme opgave.

Den teknologiske udvikling gør også, at computerklynger hurtigt bliver forældede, så der er et konstant behov for udskiftning af hardware. En af de nyere computerklynger (og den hurtigste i Danmark), Niflheim<sup>2</sup>, står på DTU og arbejder netop på materialemodellering. Niflheim-klyngen er en blandt mange, som drives af Danish Center for Scientific Computing (DCSC)<sup>3</sup>, som er en national forskningsinfrastruktur under Ministeriet for Videnskab, Teknologi og Udvikling. DCSC repræsenterer den højeste ekspertise i computerkraft anvendt på videnskabelige problemstillinger og udfører en væsentlig funktion, der muliggør effektiv etablering og drift af store computerinfrastrukturer.

På længere sigt venter en stor dansk opgave med etableringen af "ESS Data Management and Software Center", som vil blive datacentret for den kommende "European Spallation Source", som er planlagt til at ligge i Lund og vil komme i drift i 2018-19. Eksperimenterne ved ESS vil producere enorme datamængder og bearbejdning af disse vil kræve computerinfrastruktur af i dansk sammenhæng uset omfang, men vil samtidig være et afgørende bidrag til ESS, som vil lette danske forskeres adgang til infrastrukturen.

## 2 Panelets prioriterede forskningsinfrastrukturer

Fortsatte investeringer i tidssvarende forskningsinfrastruktur er en forudsætning for at fastholde den førerposition, som danske forskere har opbygget inden for *materials science*, *materialeteknologi*, *nanoscience* og *nanoteknologi*.

En række investeringer i avancerede instrumenter hører naturligt under kategorien "lokal" forskningsinfrastruktur, idet de både hvad angår størrelse, pris og daglig brug naturligt hører til i et lokalt forskningsmiljø. Andre instrumenter og analyseteknikker må pga. størrelse og udgiftsniveau til gengæld etableres og drives som nationale eller internationale forskningsinfrastrukturfaciliteter på grund af facilitetens størrelse og deraf følgende betydelige investerings- og driftsomkostninger og placeres på en central national eller international beliggenhed. I denne kortlægningsrapport har panelet derfor i særlig grad fokuseret på disse unikke "større forskningsinfrastrukturer".

Ud fra de i indledningen beskrevne kriterier og på baggrund af ministeriets kommissorium for "større forskningsinfrastrukturer" har roadmappanelet for materials science og nanoscience prioriteret mellem de afdækkede behov og forslag for investering på kort sigt. Roadmappanelet anbefaler, at Infrastrukturpulje II målrettes større infrastruktur, der har national interesse for en bred kreds af forskningsinstitutioner i Danmark samt en bred kreds af internationale brugere, modsat lokal betydning og interesse. Disse "større forskningsinfrastrukturer" kan medvirke til et internationalt "brain gain" til dansk forskning og til at højne talentudviklingen inden for områderne i bredeste forstand. Det er panelets vurdering, at disse relativt kostbare enkeltstående instrumenter meget vanskeligt lader sig finansiere på anden måde. De højest prioriterede forslag ligger alle inden for karakteriseringsområdet.

Selv om der er behov for adgang til en bred vifte af teknikker og forskellige forskningsfaciliteter inden for analyse/karakterisering, fremstilling (syntese) og modellering, er det også nødvendigt i et land af Danmarks størrelse at fokusere investeringerne på de områder, hvor vi er særligt stærke og hvor der er særlige forskningsmæssige potentialer inden for nano- og materialeområdet. Panelet har i sin prioritering af de aktuelle infrastrukturbehov lagt vægt på fokusere indsatsen, således der sker en *viderebygning på danske styrkeområder*. Panelet har derfor bl.a. valgt at fokusere på avancerede sprednings- og spektroskopiteknikker (dvs. faciliteter inden for synkrotronstråling, neutronstråling og NMR-spektroskopi, hvor dansk forskning har

---

<sup>2</sup> <http://www.dcsc.dtu.dk/Niflheim>

<sup>3</sup> <http://www.dcsc.dk>

markeret sig markant på den internationale forskningsarena). Inden for disse områder har danske forskere ydet en markant international pionerindsats, og evnen til selv at designe, konstruere samt bygge infrastrukturudstyr har spillet en afgørende rolle.

Roadmapppanelet for *materials science*, *materialeteknologi*, *nanoscience* og *nanoteknologi* har ved en samlet betragtning vurderet, at det er vigtigt at prioritere de afsatte midler til følgende tre forslag:

1. Dansk nano- og energimateriale målestation ved MAX IV
2. Dansk GHz Faststof NMR Instrumentcenter
3. NANOLINE - Målestation til synkrotronstrålkilden ASTRID2

## 2.1 Dansk nano- og energimateriale målestation ved MAX IV

I Sverige er der opnået støtte til at bygge en unik ny synkrotronstrålingsfacilitet, MAX IV, i Lund, som sammen med den kommende europæiske neutronfacilitet, European Spallation Source (ESS), vil skabe et af verdens stærkeste forskningsinfrastrukturfaciliteter meget tæt på Danmark. Den nye synkrotronstrålingskilde MAX IV vil i energiområdet op til 30-40 keV blive blandt verdens mest intense røntgenkilder – et energiområde, der er særdeles velegnet til forskning inden for materials science og nanoscience.

Med henblik på at udnytte de fantastiske nye muligheder har en meget bred kreds af danske forskere fremsendt et ønske om at opbygge en unik national infrastrukturfacilitet i form af state-of-the-art målestationer til pulverdiffraktion (PXRD) og billeddannelse ved MAX IV. En dansk beamline (strålerør) og tilhørende målestationer vil kunne give unik information om komplekse nano- og energimaterialer på flere længdeskalaer, fra atomar opbygning til afbildning af nanostrukturer med 100 nm opløsning. Hurtig tidsopløst dataopsamling vil give indblik i kemiske reaktioner, mens de finder sted, og gøre det muligt at studere mikrostrukturelle ændringer i materialer. Data fra denne unikke målestation vil muliggøre afbildning af materialedynamik og bidrage til forståelsen af materialers egenskaber og holdbarhed og til udviklingen af nye funktionelle nanomaterialer. Strålerøret vil endvidere blive udstyret med spektroskopiske instrumenter, således multi-teknik *in situ* eksperimenter bliver en mulighed. Målingerne vil kunne foretages under høje tryk, lave og høje temperaturer, under gas- og væskeflow - med andre ord arbejdsbetingelserne for funktionelle materialer i drift - og vil således være unik i en international sammenhæng og medvirke til at tiltrække udenlandske forskere og ph.d.-studerende.

Dansk strategisk og industriel materialeforskning har brug for let adgang til avanceret materialekarakterisering med brug af synkrotronstråling. Dette er vanskeligt ved de eksisterende internationale synkrotronstrålingsfaciliteter i USA, Europa og Asien, hvor der ofte er mere end ½ års ventetid, og manglen på let adgang til synkrotronstråling bliver et stadigt større problem i konkurrencen med udenlandske forskningsgrupper og firmaer. Den fysiske nærhed af MAX LAB til Danmark vil samtidig have en afgørende betydning for målestationens udnyttelse, idet det selvsagt giver betydelig fleksibilitet og reduktion af rejsetiden.

Det nationale konsortium (ansøgerkreds) bag projektet har højeste internationale status i, hvad angår udnyttelse af synkrotronstråling til karakterisering af nano- og energimaterialer, og forslaget nyder meget bred national støtte fra forskningsinstitutioner, førende internationale forskningsgrupper og fra førende danske industrivirksomheder. De allerede planlagte svenske målestationer ved MAX IV har meget begrænset fokus på pulverdiffraktion og billeddannelse, hvorimod røntgenspektroskopi, som er et traditionelt stærkt svensk styrkeområde, tilgodeses i betydeligt omfang. Danmark har, som beskrevet i afsnit 1.2.1, en meget stærk position og tradition inden for diffraktion og spredning, og der er et udtalt ønske fra svensk side om, at Danmark involverer sig i MAX IV netop inden for dette område.

Danske forskere har allerede i dag et meget stort aktivitetsniveau ved den nuværende mindre intense MAX II synkrotronstrålingsfacilitet i Lund på baggrund af ansøgninger om måletid, der bedømmes i international konkurrence. Den nuværende PXRD-målestation ved MAX II bliver også allerede i stor udstrækning benyttet

til uddannelse og træning af ph.d.-studerende i røntgenspredningsteknikker. Den nuværende MAX II facilitet vil blive lukket i forbindelse med opstarten af den nye tredjegerations MAX IV facilitet, så det er derfor af uddannelses- og forskningsmæssige hensyn helt essentielt at videreføre aktiviteterne på MAX IV.

Indledende overvejelser og design af målestationerne på MAX IV skal igangsættes hurtigst muligt, så konstruktion kan påbegyndes samtidig med opbygning af det øvrige eksperimentel på MAX IV. Målestationerne skal således stå klar ved åbningen af MAX IV i primo 2015. Det er vigtigt, at planlægningen af den danske målestation tidligt bliver taget med i de endelige designspecifikationer for MAX IV, og der bør derfor relativt hurtigt (det næste års tid) tages en beslutning om, hvilken type undulator/wiggler, der skal generere strålingen til det danske strålerør. Det betyder følgende tidsplan: Forberedelse indtil juni 2011, konstruktion januar 2012 til december 2014, drift fra 2015 til 2035.

Finansieringen foreslås fordelt således, at den danske del omfatter den instrumentelle målestation, detektorer og faciliteter til prøveforberedelse til både pulverdiffraktion og billedannelsesstudier (40 MDKK), løn til to teknisk ansvarlige for målestationen i 10 år, der skal udstationeres ved faciliteten og sikre optimal udnyttelse af denne, samt den daglige drift (20 MDKK i alt). Det forventes, at indgangstrinet (dvs. den sektion af strålerøret, der er direkte forbundet til selve synkrotronstrålingsringen MAX-IV, og som omfatter optik- og maskindelene) (34 MDKK) finansieres fra anden side, idet indgangstrinet er stort set ens for alle målestationer. Det betydelige danske engagement og finansiering af en dansk bygget og drevet unik pulverdiffraktionsmålestation ved MAX IV skal gennem forhandlinger med ledelsen af MAX IV samtidig sikre adgangsbillet for danske brugere til andre målestationer ved MAX IV.

## 2.2 Dansk GHz Faststof NMR-Instrumentcenter

Faststof NMR er en relativt ny og meget hurtigt udviklende metode til bestemmelse af molekylær nanostruktur og dynamik med atomar opløsningsevne. Metoden kræver ikke, at molekylerne bringes i opløsning eller ind i højtordnede 3D-krystaller og besidder dermed et helt unikt potentiale for *in situ* struktur-dynamik analyser af funktionelle heterogene materialer. Denne egenskab er ekstremt interessant set i lyset af, at man inden for mange forskningsområder netop nu forlader "monodisciplinære" analyser af "idealiserede systemer" til fordel for integrerende analyser af molekylære systemer i deres naturlige omgivelser, som ofte i langt højere grad repræsenterer de interessante funktionelle tilstande (se også afsnit 1.2.1). Denne udvikling samt komplementariteten til de langt mere udbredte røntgensprednings- og væskefase-NMR-faciliteter gør, at man internationalt nu hastigt ser opbygningen af faststof NMR-centre, hvor man udnytter state-of-the-art ultrahøjfelts instrumentel.

Udviklingen af NMR-systemer med ultrakraftige magnetfelter (GHz-NMR-frekvenser) giver helt nye muligheder for at studere materialer såsom heterogene katalysatorer, bæredygtige cementbaserede materialer, brintlagringssystemer, polymerer, solceller, organiske supramolekylære molekyler og biologisk aktive systemer i relation til bionanoscience for at nævne nogle få eksempler inden for NMR-metodens meget brede anvendelsesområde. Højt felt giver en meget væsentlig følsomhedsforbedring og øget spektral opløsningsevne, hvilket bl.a. bevirker, at en lang række såkaldte kvadrupolkerner (fx katalytisk aktive metaller) kan studeres i lav koncentration (fx på overflader eller specifikke reaktionssites) i funktionelt aktive materialer. I kombination med den rivende udvikling af nye eksperimentelle og numeriske databehandlingsmetoder kan man bestemme atomare strukturer og med meget stor opløsningsevne følge ændringer i de enkelte atomers lokale elektroniske omgivelser, hvilket ofte kan bibringe detailviden om atomernes funktionelle rolle og dermed grundlag for funktionsoptimeret syntese i materials science og nanoscience.

Forslaget om at etablere et internationalt ultrahøjfelts (GHz) faststof NMR-instrumentcenter ved Aarhus Universitet har som mål at bringe dansk NMR-forskning inden for materials science, nanoscience, bioteknologi og energiområdet instrumentelt i en førerposition på niveau med en håndfuld af de allerstærkeste instrumentcentre i USA, Canada og Europa og dermed etablere et nordisk/nordeuropæisk kraftcenter inden for NMR-forskning integreret med de øvrige europæiske initiativer. Det nationale NMR-Instrumentcenter

støttes af en meget stor brugergruppe inkl. alle førende institutionelle og industrielle NMR-forskningsgrupper i Danmark/Skandinavien. Forslaget går på at anskaffe et "world-class", state-of-the-art 1 GHz (23.5 T) NMR-spektrometer instrumenteret til både faststof- og væskefase-NMR. Instrumentcentret vil bygge på og opkoncentrere allerede eksisterende nationale centre ("Instrument-center for faststof NMR spektroskopi" og "Center for Biologisk Faststof NMR Spektroskopi" – der er en del af Dansk Bioteknologisk Instrumentcenter DABIC) og centrets aktiviteter vil blive koordineret med "Dansk Instrumentcenter for NMR Spektroskopi på Biologiske Makromolekyler" ved Carlsberg Laboratoriet; den basale investering i instrumentel i disse centre blev foretaget medio-ultimo 90'erne. Herved vil det nyetablerede 1 GHz-NMR–infrastrukturfacilitet bibringe en stærkt tiltrængt fælles instrumentelopdatering og fra starten have kritisk masse mht. etablering af en styrkeposition med international gennemslagskraft samt give alle danske NMR-brugere og skandinaviske faststof-NMR-brugere adgang til state-of-the-art instrumentel. NMR-infrastrukturen vil samtidig fungere som del af EU's FP7 BioNMR- og ESFRI INSTRUCT-aktiviteter, der vil danne den nordeuropæiske hjørnesten i et europæisk højfelts faststof-NMR Grid.

Etableringen af et GHz-NMR-center i Danmark vil kunne etableres for en udgift på skønsmæssigt 40-50 MDDK (afhænger af forhandling) og den basale drift vil andrage ca. 1 MDDK om året ud over lokal support i form af ingeniør- og operatørbistand. NMR-instrumentel har typisk en meget lang levetid (20-30 år), primært afgjort af en cost-benefit analyse i forhold til nyudviklinger inden for området.

Et nationalt GHz-NMR-center vil have en meget markant gennemslagskraft på nordeuropæisk forskning, uddannelse, industrielt samarbejde inden for materials science og nanoscienceområderne. Faciliteten vil kunne tiltrække ph.d.-studerende og etablerede forskere fra stærke internationale forskningsmiljøer til Danmark med betydeligt "brain gain" til følge. Investeringen i et ultrahøjfelts NMR-instrument er meget rettidigt grundet i) en meget markant instrumentudvikling og dansk NMR-forskning meget stærke internationale position, ii) et stærkt dokumenteret institutionelt og industrielt behov for anvendelse af denne nye teknologi til udfordrende problemstillinger, der kræver adgang til højfeltsinstrumentel, samt iii) behovet for uddannelse af forskere inden for dette hastigt ekspanderende forskningsområde.

### 2.3 Målestation til synkrotronstrålkilden ASTRID2

NANOLINE er en state-of-the-art målestation til materials- og nanosciencestudier ved den danske synkrotronstrålingsfacilitet ASTRID2 på Aarhus Universitet, som bliver sat i drift i 2012<sup>4</sup>.

ASTRID2 vil producere lavenergetisk synkrotronstråling i det synlige, ultraviolette (VUV) og bløde røntgenområde. Adskillige tredjegerations synkrotronstrålingsfaciliteter er på det seneste blevet opført eller er under opførelse i Europa, men de fleste af disse fokuserer på den hårde røntgenstråling. Dette efterlader et gab ved lavere energier, som allerede i 1998 blev benævnt "den ultraviolette katastrofe" for at beskrive den voksende mangel på lavenergetiske VUV-lyskilder<sup>5</sup>. ASTRID2 udfylder denne niche og bidrager således til at dække den internationale mangel på sådanne synkrotronlyskilder.

NANOLINE vil udnytte de nye eksperimentelle muligheder, som den ekstreme strålingsbrillians fra ASTRID2 vil åbne for, hvilket vil styrke hele faciliteten som en internationalt betydende og veludstyret national og international synkrotronfacilitet. NANOLINE vil blive opbygget ved et multipolwigglers strålerør og udstyret med en unik målestation med en kombination af avanceret fotoelektron-spektroskopi og scanning tunnel mikroskopi (STM) teknikker til karakterisering af nanomaterialer. NANOLINE vil endvidere inkludere en række standard røntgenabsorptionsteknikker (NEXAFS, (S)EXAFS) og vil blive konstrueret, så forskellige grader af elliptisk polariseret lys kan anvendes og således muliggøre målinger af magnetiske egenskaber på nanometerskala.

<sup>4</sup> Selve ASTRID2-synkrotronringen er finansieret af midler fra Infrastrukturpulje I.

<sup>5</sup> Se f.eks. [www.physicsworld.com/cws/article/print/1755](http://www.physicsworld.com/cws/article/print/1755)

Selvom det er oplagt af videnskabelige grunde at integrere state-of-the-art synkrotronbaserede fotoemissionssteknikker med STM i samme måleopstilling, er denne kombinationen sjældent blevet forsøgt og endnu ikke succesfuldt implementeret andetsteds i verden pga. de store tekniske udfordringer, dette medfører. Aarhus Universitets ekspertise inden for både synkrotronstrålingsinstrumentering og STM giver imidlertid en sjælden mulighed for at løse disse udfordringer og bygge en unik infrastrukturfacilitet, som vil kunne tiltrække internationale og nationale forskere med udfordrende og banebrydende forskningsplaner. NANOLINE har derfor allerede modtaget entusiastisk støtte erklæringer fra ledende danske, nordiske og internationale forskergrupper inden for nanofysik, nanokemi og materials science. Generelt forventes der en stigende interesse for brugen af ASTRID2 (omkring 10 internationale grupper per år fra Europa, USA og Kina). Ud over de akademiske forskergrupper har dansk industri og GTS-virksomheder ligeledes udtrykt interesse for at anvende faciliteten.

Muligheden for i samme opstilling og på samme prøve at kunne bestemme den kemiske/elektroniske struktur med fotoelektron-spektroskopi og den detaljerede atomare geometriske struktur med STM vil åbne helt nye muligheder for studier af nye avancerede nanomaterialer, der vil danne basis for væsentlige teknologiske fremskridt. Eksempler inkluderer funktionelle nanomaterialer, polymerer, nanokatalysatorer, solceller, nanostrukturer til molekylær elektronik, magnetiske materialer til informationslagring, spintronics, biokompatible materialer, mm.

Måletid på NANOLINE til internationale og danske brugere vil blive tildelt ud fra kvaliteten af det indsendte forskningsprojekt af en styregruppe. Placeringen på Aarhus Universitet vil muliggøre tæt samspil mellem forskningen ved NANOLINE og forskningsbaseret undervisning.

En detaljeret plan og estimat af etableringsudgifterne til NANOLINE blev udarbejdet i forbindelse med konstruktionen af ASTRID2. I forberedelsesfasen (1.6.2010 – 31.12.2010) startes opbygningen af ASTRID2, som forventes færdig primo 2012. Det samlede budget for konstruktionen af NANOLINE (1.1.2011 – 31.5.2012) er 30 mio. DKK, der indeholder de eksperimentelle teknikker som før beskrevet, specielt STM-udstyr og elektronanalysator til fotoelektron-spektroskopi. Det forventes, at NANOLINE sammen med ASTRID2 vil være et internationalt konkurrencedygtigt instrument i mindst to årtier med årlige driftsomkostninger på ca. 1.5 mio. DKK.

### **3 Behov for forskningsinfrastruktur på mellemlangt sigt (5 – 10 år)**

Baseret på en nøje læsning af de indkomne indspil og en generel undersøgelse af dansk forskning inden for materials science og nanoscience står det panelet klart, at der er brug for omfattende investeringer i forskningsinfrastruktur inden for området, både på kort sigt (se ovenfor) og på længere sigt. Dette understøttes yderligere af, at Danmark i 2009 investerede mindre i større forskningsinfrastruktur end Sverige og langt mindre (halvdelen) end Norge. Baseret på de indspil, som er indsendt til panelet for materiale- og nanoteknologi, har panelet identificeret klare behov inden for specielt opgradering af danske rentrum, faciliteter til materialeteknologisk forskning samt en helt ny type højtopløsende billeddannede instrument, et såkaldt nanoSIMS:

#### **3.1 Syntesefaciliteter i rentrum**

Muligheden for at bygge rentrum, der er en forsknings- og/eller produktionsfacilitet, hvor luften indeholder meget få støvpartikler, har været og er altafgørende for at kunne fremstille elektroniske kredsløb. Enkeltkomponenterne i moderne elektroniske kredsløb er typisk væsentligt mindre end størrelsen af et enkelt støvkorn, og eftersom alle enkeltkomponenter i chips nødvendigvis skal virke hele tiden, må deres fremstilling foregå i rentrum.

Der er et eksisterende behov for at kunne servicere danske forskere og virksomheder med de mest moderne rentrumteknikker, så disse brugere hhv. kan udføre deres forskning (af natur i lille volumen) eller udføre

forsøg med prototyper af komponenter, som evt. senere kan overføres til egentlig produktion i større volumen andetsteds. Specielt sidstnævnte funktion varetages p.t. hovedsageligt af SDU og DANCHIP; sidstnævnte er beliggende på DTU i Lyngby, få kilometer fra København og betjener således hele hovedstadsområdet. Både DTU-Danchip og SDU har veletablerede samarbejder med dansk industri og har været essentiel for dannelse af mere end 10 virksomheder. Andre danske rentrum skal ses som forskningslaboratorier, der af uddannelsesmæssige og praktiske hensyn nødvendigvis må forefindes tæt på den enkelte forsker.

Fra DANCHIP og andre rentrum er der specielt udtrykt ønske om at kunne udvide maskinparken af procesudstyr, der kan syntetisere strukturer i andre materialer end silicium. Eksempler på nye materialer er II-VI halvledere, piezoelektriske materialer, polymerer, metamaterialer, plasmonstrukturer og kulstofbaserede materialer. Nye materialer vil muliggøre anvendelser inden for bl.a. life sciences og nanoteknologier generelt. Specielt forventes stigende aktivitet inden for forskning og anvendelser, der søger at forbinde "hårde" nanostrukturer og "bløde" biologiske materialer og molekyler. Et andet lovende område, som kræver nye investeringer, er opbygningen af kvantedevices, som er elektroniske eller optoelektroniske systemer, som udviser kvantemekanisk kohærens og entanglement effekter. Sådanne devices er ofte hybridsystemer, som kobler elektroniske kredsløb til lys, mekaniske bevægelser eller atomer i "fælder". Panelet anbefaler øget fokus på netop disse to anvendelsesområder inden for biomedicin samt kvante- og plasmonkomponenter. Specifikt har der vist sig et ønske om en national Molecular Beam Epitaxy facilitet, som vil kunne åbne for anvendelse af nye materialer og anvendelser.

Internationalt ses også en bevægelse mod nye materialer, der muliggør forbedrede og nye anvendelser af mikro- og nanostrukturer. Dermed vil en opgradering af danske faciliteter være nødvendig for at bringe Danmark op på internationalt niveau; dog skal et bredere fokus ikke forhindre en fastholdelse af et internationalt niveau inden for siliciumbaserede teknikker, der stadig repræsenterer langt det største volumen og den højeste grad af forfinelse, specielt i kommercielt henseende. Samtidig henstiller panelet til, at nye investeringer koordineres, således at kostbart og komplekst udstyr ikke dubleres og at man inden der planlægges nye rentrum afsøger mulighederne for at ibrugtage eksisterende faciliteter, for moderne, avancerede rentrum er dyre i drift og kræver højt kvalificerede operatører samt en kritisk brugermasse for at udnytte det fulde potentiale.

### 3.2 Materialeteknologisk forskning

Forskningen i materialeteknologi starter fra opskaleringen af f.eks. en kemisk syntese, hvor alle længdeskalaer belyses egenskabsmæssigt, fra nanostruktur til test af fysiske produkter såsom vindmøllevinger. På AAU arbejder en stor gruppe med nanostrukturer og udvikling af nye avancerede materialer og på f.eks. Risø udvikles og testes vindmøllevinger i fuld skala. Danmark har verdensførende forskere inden for materialeteknologi og står f.eks. i spidsen for flere EU-projekter inden for det 7. rammeprogram.

Forskning og kandidatuddannelse giver på udstyrssiden store drifts- og anskaffelsesomkostninger. Udstyrsbehovet vil typisk ikke være store enkeltstående anskaffelsestunge eksperimentelle installationer, men derimod en bred vifte af instrumenter til fremstilling og karakterisering af materialer. Udstyrsbehovet spænder vidt, lige fra behov for adgang til den kommende synkrotronstrålingsfacilitet, MAX IV, til mikroskala produktionsudstyr og mekanisk testudstyr til vinger på næsten 100 meter.

Materialeforskningsmiljøerne på AAU og DTU samt Risø DTU har fælles udtrykt et behov for anskaffelse af avanceret udstyr til samlet 50 mio. kr. bestående af mange forskellige instrumenter. Udvalget finder, at dette er støtteværdigt, og et fælles initiativ vil kunne have karakter af en national facilitet, som dog falder uden for de kriterier, som er opstillet for *større infrastrukturfaciliteter*. Universiteterne har en god indbyrdes kommunikation og naturlige fælles interesser inden for både undervisning og forskning. Forskningsmæssigt komplementerer AAU, DTU og Risø DTU hinanden, og dækker samlet hele længdeskalaområdet fra store konstruktioner, oversubstrukturer, til mikro- til nanoniveauer inden for et bredt spektrum af materia-

ler inkl. bygningsmaterialer, metaller, kompositmaterialer og polymerer. Med 40 ph.d.-studerende på AAU inden for materialeforskningen og et tilsvarende antal på DTU og Risø DTU vil en etablering af et fælles virtuelt udstyrscenter med koordineret arbejdsdeling ikke blot kunne give national synergi på uddannelse og forskning, men også gavne industrien, som vil møde en fælles indgangsportal.

Det er panelets opfattelse, at området falder uden for de kriterier, som er opstillet til støtte på kort sigt, men at den materiale teknologiske forskning er en væsentlig del af en dansk forskningsinfrastruktur og bør støttes på mellemlangt sigt.

### 3.3 Højtopløsende sekundærion massespektrometer (nanoSIMS)

Udviklingen af et højtopløsende, billeddannende Sekundær-Ion Masse-Spektrometer (nanoSIMS) har været et af de store analytiske gennembrud i den naturvidenskabelige forskning i de senere år. Et nyt princip for ionstrålefokusering muliggør nu en kvantitativ kortlægning af grundstoffer (kemisk sammensætning) og isotoper på alle typer af materialeoverflader med en meget høj rumlig opløsning helt ned til nanometerområdet. Analyser med nanoSIMS forudsætter ingen krævende præparation af materialet, men præsterer meget præcis information om koncentration og isotopsammensætning af multiple grundstoffer. Under scanningen af overfladen med ionstrålen fjernes de øverste atomlag, og nanoSIMS-instrumentet kan derved også anvendes til højtopløsende 3D analyser.

De banebrydende analysemuligheder med det nye nanoSIMS-instrument er i de seneste år blevet opdaget og taget i anvendelse internationalt inden for en række fag, blandt andet:

- materials science (halvledere, metaller og oxider (korrosion, tribologi), polymerer)
- nanoscience (analyse af 2D og 3D nanostrukturer)
- mikrobiologi (identifikation og funktionsanalyse af bakterier)
- medicin og farmakologi (subcellulære processer, drug delivery, (nano)toksikologi)
- geologi og kosmokemi (isotop geokemi, oliegeologi, kosmisk støv)

Inden for de fleste af disse områder har Danmark meget stærke internationale forskningsmiljøer, som direkte kan anvende denne højtopløsende nanoSIMS-analyseinfrastrukturfacilitet. Som eksempel åbner det nye instrument banebrydende muligheder inden for den tekniske, økologiske og medicinske nanomikrobiologi, idet bakteriers genetiske identitet og biokemiske funktion nu samtidig kan analyseres på enkeltcelleniveau med høj præcision. Dette løser et af de største klassiske problemer inden for mikrobiologien, nemlig at identificere de relevante, aktive mikroorganismer i forbindelse med f.eks. nedbrydning af miljøfremmede stoffer, bioreaktorer eller infektionssygdomme. Ved internationale mikrobiologiske kongresser er denne nye teknologi blandt de metodiske udviklinger, som vækker størst opmærksomhed og forventninger om videnskabelige og teknologiske gennembrud.

En foreløbig behovsanalyse har vist en meget stor brugerinteresse blandt forskere, både i Danmark og i udlandet (specielt Nordeuropa), inden for materials science, nanoscience, mikrobiologi, geologi, og miljømedicin m.m. Specielt inden for de mikrobiologi og nanogeoscience er der massiv opbakning til dette initiativ fra fremragende danske forskere ved AU, SDU, KU, DTU, og AAU.

Der eksisterer i dag kun 26 nanoSIMS-instrumenter i verden, hvoraf de 11 er installeret i Europa, men ingen i Skandinavien. Der er et stort og hastigt voksende behov for analysetid på de tilgængelige nanoSIMS-instrumenter, men internationalt er kapaciteten helt utilstrækkelig. De universiteter, som i dag er i besiddelse af denne analysekapacitet, er derfor meget attraktive samarbejdspartnere i internationale forskningsprojekter. Et nationalt dansk nanoSIMS-instrumentcenter vil derfor være et vigtigt aktiv for at sikre Danmarks position inden for højtopløsende materialeanalyse og biologisk-medicinsk forskning.

## **4 Behov for særskilte aktiviteter eller midler, som kan fremme danske forskeres adgang til og brug af forskningsinfrastrukturer**

### **4.1 Følgeforskning og infrastrukturcentre**

Gennem en længere årrække har der været tradition for at støtte danske forskeres adgang til en række nationale og internationale større forskningsfaciliteter. Indsatsen har været spredt ud på en række forskellige fag- og forskningsområder, og omfatter en række forskellige aktiviteter og former for forskningsfaciliteter.

En væsentlig del af aktiviteterne har været målrettet mod de tre store forskningsfaciliteter ESRF (materials science, nanoscience, og strukturel biologi), ESO (astronomi og astrofysik) og CERN (kerne- og partikelfysik), som Danmark er medlem af og betaler kontingent til. Her har Det Frie Forskningsråd - Natur og Univers støttet driften af tre såkaldte instrumentcentre, der har til opgave at optimere det forskningsmæssige udbytte af de tre danske medlemskaber. For selvom et dansk medlemskab af de tre faciliteter giver danske forskere adgang til faciliteterne, så dækker medlemskabet ikke de omkostninger, der er forbundet med at udvikle nyt udstyr, f. eks. detektorer, udføre forsøgene eller som opstår i forbindelse med den efterfølgende bearbejdning af de opnåede data og forsøgsresultater. Et af argumenterne har været, at hvis danske forskere i international konkurrence har opnået måletid på disse internationale faciliteter, så må f.eks. penge til rejse- og opholdsudgifter i forbindelse med kortere eller længere ophold på disse ikke sætte en begrænsning for den enkelte forskningsgruppes udnyttelse af disse internationale faciliteter.

Inden for materials science og nanoscience har instrumentcentret Danscatt katalyseret danske forskeres adgang til røntgen- og neutronspretningsfaciliteter. Det Frie Forskningsråd - Natur og Univers støtter p.t. centret med en bevilling på omkring 7 mio. kr. årligt. Instrumentcentret har i særlig grad haft fokus på at sikre adgang til den europæiske synkrotronfacilitet ESRF, men Danscatt understøtter også adgang og forskning ved en række andre synkrotron- og neutronspretningsfaciliteter i Europa, USA og Asien. Det gælder bl.a. Paul Scherrer-Institutet i Schweiz, Spallation Neutron Source i USA, SPring8 i Japan og MAX LAB i Sverige.

Danscatt dækker helt eller delvist rejse- og opholdsudgifter ved disse faciliteter samt netværks-, konference- og uddannelsesaktiviteter i tilknytning til røntgen- og neutronspretningsområdet. En væsentlig del af Danscatts ressourcer anvendes imidlertid til ansættelse af yngre post doc'er, der i en kortere eller længere periode bliver udstationeret ved og tilknyttet en forskningsfacilitet og som primært er ansvarlig for implementering og vedligehold af nye eksperimenter/instrumenter på de forskellige forskningsfaciliteter samt for at sikre danske brugere optimal udnyttelse af faciliteterne. Følgeforskningsindsatsen på røntgen- og neutronspretningsområdet har i høj grad bidraget til at styrke nanoscience- og materials scienceforskningen i Danmark.

### **4.2 Behov for ændret arbejdsdeling og mere fokuseret indsats**

Spørgsmålet er fokuseret fordeling af de ressourcer, der anvendes til forskningsinfrastruktur på det nano- og materiale teknologiske område.

Denne roadmap har påvist, at der er et meget stort behov for markant at øge investeringerne i forskningsinfrastruktur på nano- og materialeområdet i den kommende årrække. Samtidig vil behovet for følgeforskningsudgifter øges meget betydeligt i den kommende årrække. Det skyldes det stigende antal internationale medlemskaber og infrastruktursamarbejder, som danske forskere i den kommende årrække vil blive inddraget i – ikke mindst på nano- og materialeområdet. Danmark har netop indgået aftale om et toårigt prøvemedslemskab af neutronspretningsfaciliteten ILL, og regeringen har besluttet, at Danmark sammen med Sverige skal blive vært for den europæiske neutronspretningsfacilitet ESS, der vil blive bygget i Lund, tæt ved MAX LAB, og geografisk tæt placeret ved Øresundsbroen. Endelig står Danmark foran en varig indmeldelse i den internationale røntgenlaserfacilitet XFEL i Hamborg, og man må forvente, at danske forskere i

stigende grad vil engagere sig i Hamborgregionen, hvor der ud over XFEL også er bygget en ny synkrotronstrålingsfacilitet, PETRA III, ved DESY. Igen vil kombinationen af geografisk nærhed og unik infrastruktur gøre eksperimenter ved disse faciliteter meget attraktiv.

Det må også forventes, at med danske forskeres stigende engagement i geografisk mere bekvemt beliggende infrastrukturer, vil danske aktiviteter ved ESRF i Grenoble mindskes tilsvarende, hvorfor det danske bidrag til ESRF på sigt må genovervejes.

Samtidig må man overveje at målrette "følgeforskningsindsatsen", så der i særlig grad er fokus på de direkte udgifter, der er forbundet med adgangen (rejse- og opholdsudgifter) til de internationale forskningsfaciliteter inden for røntgen- og neutronsprengningsteknikker samt udstationering, hvis opgave det er at sikre optimal udnyttelse af disse faciliteter. Det skal ligeledes overvejes at samle følgeforskningsaktiviteterne i et særligt organ, der går på tværs af de nuværende faglige forskningsråd, og som kan sikre langtidsplanlægning gennem stabile bevillinger over lange tidshorisonter. Støtten til de konkrete forskningsaktiviteter må finansieres af offentlige forskningsråd, private fonde og universiteterne. Det er glædeligt at konstatere, at nogle af de stærkeste forskningsgrupper, der udnytter de internationale spredningsfaciliteter har været i stand til at konkurrere sig til betydelige bevillinger til etablering af Grundforskningscentre. Ligeledes har man via 90'ernes satsning på større NMR-instrumentcentre katalyseret en langt mere effektiv brug af kostbart instrumentel inden for dette område og opdyrkning af forskningsaktiviteter med en meget tydelig international profil. Også her har man som resultat set opbygning af store bevillinger fra Grundforskningsfonden og andre store nationale og europæiske fondsgivere. Idet man ved etablering af et GHz-NMR-center på dansk grund vil opnå status af nordeuropæisk kraftcenter og opnå en tæt tilknytning til andre europæiske NMR-faciliteter bør man også på dette område overveje en målrettet "følgeforskningsindsats".

En sådan justering vil betyde en klarere arbejdsdeling mellem videnskabsministerium, forskningsråd og universiteter, hvor ministerium bliver ansvarlig for, at forskerne sikres et fordelagtigt medlemskab af internationale forskningsfaciliteter, mens universiteter og forskningsråd bliver ansvarlig for de konkrete forskningsprojekter.

## 1 Dansk nano- og energimateriale målestation ved MAX IV

### 1.1 Beskrivelse af infrastrukturen

Anvendelse af røntgenstråling udgør en hjørnesten i naturvidenskabelig, medicinsk og teknisk forskning, og nye stadig kraftigere synkrotronstrålingskilder forstærker til stadighed denne stilling. Den svenske regering har besluttet at bygge en unik ny synkrotronfacilitet, MAX IV<sup>1</sup>, i Lund, og den vil sammen med den kommende europæiske neutronfacilitet, European Spallation Source (ESS)<sup>2</sup>, skabe et af verdens stærkeste forskningsmiljøer få kilometer fra Danmark. Den nye synkrotronkilde MAX IV vil i energiområdet op til 30-40 keV blive blandt verdens mest intense røntgenkilder – et energiområde der er særdeles velegnet til materialeforskning. Generelt vil faciliteten have langt højere kapacitet og effektivitet end den nuværende MAX II synkrotron i Lund, og grundet et unikt nyt design vil MAX IV få en emittans, der er ca. 10 gange bedre end nuværende synkrotroner. (Emittansen angiver graden af fokusering i elektronstrålen, der giver anledning til synkrotronstrålingen) Den fantastisk lave emittans vil give helt nye muligheder for fokusering af røntgenstrålen og vil afstedkomme nye eksperimentelle muligheder f.eks. inden for billedannelse, hvor det forventes, at man kan nå ned til 100 nm rumlig opløsning, igen en faktor 10 bedre end eksisterende kilder.

Med henblik på at udnytte de fantastiske nye muligheder har en meget bred kreds af danske forskere et ønske om at opbygge en unik national infrastrukturel facilitet i form af et state-of-the-art målestationer til pulverdiffraktion (PXRD) og billedannelse ved MAX IV. Målestationerne vil kunne give unik information om komplekse nano- og energimaterialer på flere længdeskalaer, fra atomar opbygning til afbildning med 100 nm opløsning. Hurtig dataopsamling vil give indblik i kemiske reaktioner, mens de finder sted, og gøre det muligt at studere mikrostrukturelle og morfologiske ændringer. Data fra målestationerne vil give et billede af materialer i funktion og bidrage til forståelsen af materialers egenskaber og holdbarhed. Målestationerne vil endvidere blive udstyret med spektroskopiske instrumenter, således at multi-teknik *in situ* eksperimenter bliver en mulighed. Målingerne skal kunne foretages under høje tryk, lave og høje temperaturer, under gas- og væskeflow - med andre ord arbejdsbetingelserne for funktionelle materialer i drift.

### 1.2 Videnskabelige og samfundsmæssige perspektiver

Dansk økonomi og samfundsudvikling er kritisk afhængig af materialeforskning på højeste internationale niveau. Forskning i nye nanomaterialer er helt afgørende for at fastholde en dansk førerposition inden for f.eks. bæredygtig energi. Samtidig har dansk strategisk og industriel materialeforskning brug for let adgang til avanceret materialekarakterisering med synkrotronstråling. Dette er vanskeligt ved eksisterende faciliteter, hvor der ofte er mere end ½ års ventetid, og den manglen på let adgang til synkrotronstråling bliver et stadig tydeligere problem i konkurrencen med udenlandske forskningsgrupper og firmaer. Den nye målefacilitet vil få stor betydning for energi- og nanomaterialeforskning f.eks. inden for udvikling af ny teknologi til hydrogenoplægning, brændselsceller, batterimaterialer, termoelektriske materialer, biomaterialer, cement, kompositmaterialer og katalyse samt mange andre grene af materialevidenskaben (geologiske prøver, fødevarer, biologiske materialer, farmaceutiske produkter, jordfysik). Det skal også

---

<sup>1</sup> <http://www.maxlab.lu.se/maxlab/max4>

<sup>2</sup> <http://www.ess-scandinavia.eu>

kraftigt understreges, at målestationen pga. den geografiske nærhed vil kunne spille en vigtig rolle i uddannelsen af kandidater og ph.d'er i kemi, fysik, nanoscience, energi, jordbrugsvidenskab og en række ingeniørvidenskaber.

Gruppen bag projektet har højeste internationale stilling, hvad angår udnyttelsen af synkrotronstråling til karakterisering af nano- og energimaterialer, og forslaget har en meget bred national støtte fra forskningsinstitutioner, førende internationale forskningsgrupper og industri. De allerede planlagte målestationer ved MAX IV har meget begrænset fokus på pulverdiffraktion og billeddannelse, hvorimod røntgenspektroskopi, som er et traditionelt stærkt svensk styrkeområde, tilgodeses i stort omfang. Modsat Sverige har Danmark en meget stærk position og tradition inden for diffraktion og spredning, og der er et udtalt svensk ønske om, at Danmark involverer sig i MAX IV på baggrund af disse styrker. Dette svenske synspunkt udtrykkes f.eks. konkret i en støtteskrivelse fra vicepræsidenten for Chalmers Tekniske Universitet, der skriver: *"The outstanding Danish tradition in diffraction has produced numerous high impact publications and is the leading forefront of diffraction method development. Chalmers University of Technology strongly supports the Danish initiative to lead the development of a diffraction beamline at MAX IV, and Chalmers researchers are actively working towards attracting complementary funding for such a beamline within Sweden"*.

Nærværende infrastrukturforslag bygger på stærkeste vis på den danske styrkeposition inden for spredning og diffraktion, og den unikke kombination af dedikeret pulverdiffraktion og billeddannelse til materialestudier vil være attraktiv for et meget stærkt felt af internationale forskere. Faciliteten vil kunne medvirke til dansk forskning i absolut verdensklasse, alene eller i samarbejde med internationale miljøer, og den vil booste den danske forskning inden for nano- og energimaterialer de næste to årtier, hvilket vil medvirke til meget signifikant brain gain til dansk forskning. Der er typisk ekstrem konkurrence om pulverdiffraktionsmåletid p. g. a. et stort underskud af beamlines, og nærværende forslag har stærk opbakning blandt andre skandinaviske og nordeuropæiske forskningsmiljøer.

### 1.3 Grad af modenhed

Danske forskere har allerede i dag et meget stort aktivitetsniveau ved MAX-II i Lund på baggrund af ansøgninger, der bedømmes i international konkurrence med andre forskere. Den nuværende PXRD-målestation ved MAX II bliver også allerede i stor udstrækning benyttet til uddannelse og træning af studerende i arbejde med røntgenspredningsteknikker. MAX II vil blive lukket i forbindelse med opstarten af MAX IV. Af uddannelses- og forskningsmæssige hensyn er det derfor essentielt at videreføre aktiviteterne på MAX IV.

Indledende overvejelser og design af målestationerne skal startes hurtigst muligt, så konstruktion kan påbegyndes samtidig med opbygning af det øvrige eksperimentel på MAX IV. Målestationerne skal således stå klar ved åbningen af MAX IV i forventet primo 2015. Det er vigtigt, at de danske målestationer tidligt bliver taget med i de endelige designspecifikationer for MAX IV, og der bør relativt hurtigt (det næste års tid) tages en beslutning om, hvilken type insertion device, der skal danne grundlag for strålingen. Samlet giver dette følgende tidslinje: Forberedelse indtil juni 2011, konstruktion januar 2012 til december 2014, drift fra 2015 til 2035.

Dansk forskning har tradition for eksperimentelt forskningsarbejde ved verdens førende synkrotronfaciliteter og danske forskere har bygget adskillige strålerør og måleinstrumenter ved

synkrotronerne DESY (Hamborg), ESRF (Grenoble), ASTRID (Aarhus) og MAX II. Der er danske virksomheder, der er i stand til at designe, producere og levere en væsentlig del af udstyret til sådanne målestationer, f.eks. Danfysik og JX-ray, kombineret med ekspertise og knowhow fra RISØ DTU, Københavns Universitet og Aarhus Universitet. Design af målestationer ved MAX IV vil tage udgangspunkt i vedtagne standarder for MAX IV samt eksisterende stationer ved andre synkrotroner, hvormed danske forskere har tæt samarbejde. De nærmere tekniske detaljer vil blive fastlagt i en konceptuel designrapport. Arbejdet hermed vil følge sædvanen i det internationale synkrotronmiljø med brainstormingmøder og ekstern bedømmelse.

Der er i Sverige i juni 2010 dannet en styregruppe, som skal afdække svenske behov og interesser inden for diffraktion og spredning. Styregruppen har deltagelse fra alle store svenske universiteter, og den vil blive en væsentlig samarbejdspartner i designprocessen og i konkrete forhandlinger om svensk medfinansiering af det danske strålerør.

#### 1.4 Estimat af etablerings- og driftsudgifter

Den store hastigheds- og intensitetsforbedring, som vil være effekten af den nye forskningsinfrastruktur, vil generere store datamængder. Derfor skal der udvikles ny software til håndtering af store datamængder på fornuftig vis. Desuden skal der etableres højhastighedsnetværk, datalagringsenhed samt en computerklynge. Dette muliggør online dataanalyse, hvilket er en forudsætning for en hurtig evaluering af datakvalitet samt den efterfølgende videnskabelige produktion. Udarbejdelsen af en effektiv e-infrastruktur kan med fordel løftes i fællesskab med resten af MAX IV og eventuelt også med ESS, hvis datacenter vil komme til at ligge i København.

Finansieringen foreslås fordelt således, at det danske bidrag som minimum omfatter instrumenter, detektorer og prøveomgivelser til både pulverdiffraktion og billeddannelse (40 MDKK), samt løn til instrumentansvarlige i mindst 10 år inklusiv den daglige drift (20 MDKK i alt). Det er ikke afklaret, om indgangstrinet (dvs. den sektion af strålerøret, der er direkte forbundet til selve synkrotronringen, og omfatter optik- og maskindelene) (34 MDKK) kan finansieres fra anden side (f.eks. MAX IV eller andre skandinaviske kilder), idet indgangstrinet er stort set ens for alle målestationer. De her opgivne priser er baseret på oplysninger fra de ansvarlige for det nuværende PXRD strålerør ved MAX II. Et tentativt prisoverslag for hele opstillingen ser ud som følger:

##### Indgangstrin

Ondulator: 9 MDKK, front end: 4 MDKK, strålingsafskærmning: 2.5 MDKK, monokromator: 3 MDKK, vakuumsystem: 1.5 MDKK, slits og strålediagnostik: 2 MDKK, kabler/kølevand, flydende nitrogen/ hutch temperaturkontrol: 4 MDKK, kontrolstation/ databehandling/ udstyrsbeskyttelse: 4 MDKK, kontrolrum, præparationslaboratorium: 2 MDKK, fokuseringsoptik: 2 MDKK.

Total indgangstrin: **34 MDKK**

##### Instrumenter

Heavy-duty diffraktometer: 3.5 MDKK, multianalysesystem: 4 MDKK, pixeldetektor: 7 MDKK, udstyr til billeddannelse: 15 MDKK, prøveudskifterrobot: 3 MDKK, Ramanspektrometer: 1.5 MDKK, prøvemiljø (mikroskop, gasmikser, gasanalyse, diamant anvil cell, køling og laseropvarmning, *in situ* celler, X-Y stage, lavtemperaturopstilling, flydende nitrogen og luftopvarmer, prøvepræparation inkl. handskebokssample): 6 MDKK.

Total instrumenter: **40 MDKK**

## 1.5 Projektkonsortium

Forslaget om en national infrastruktur i form af en synkrotronmålestation ved MAX IV er udarbejdet af en meget bred kreds af danske forskere. De direkte forslagsstillere er: Aarhus Universitet: Prof. og centerleder B. B. Iversen, lektor T. R. Jensen, lektor H. Birkedal, lektor J. E. Jørgensen, adjunkt M. Christensen, seniorforsker J. Overgaard, Aarhus Universitet – Foulum: Prof. L. Wollesen de Jonge, Risø DTU: Prof. og centerleder H. F. Poulsen, seniorforsker P. Norby, programleder L. T. Kuhn, programleder B. Sørensen, seniorforsker E. M. Lauridsen, seniorforsker S. Schmidt, DTU: Lektor K. Ståhl, lektor O. Mejhede, institutleder E. Stenby, lektor K. Yvind, Aalborg Universitet: Prof. R. Pyrz, prof. L. Rosendahl, prof. P. Møldrup, Syddansk Universitet: Prof. A. Bond, lektor E. Skou, Københavns Universitet: Prof. R. Feidenhansl, adjunkt H. O. Sørensen, Teknologisk Institut: Centerleder L. H. Christensen, Haldor Topsøe A/S: General Manager A. Molenbroek, H. Lundbeck A/S: Senior Specialist H. Lopez de Diego.

Ansøgerne har desuden modtaget skriftlige støtteerklæringer fra en betydelig række af danske firmaer (FL Smidt A/S, Vestas A/S, Grundfos A/S, Aalborg Portland A/S, SCF Technologies A/S, AarhusKarlsham A/S, Cheminova A/S, Alpcon A/S, LM Wind Power A/S, Maersk A/S, Topsoe Fuel Cell A/S). Derudover forefindes entusiastiske støttetilkendegivelser fra en række nordeuropæiske topforskere (Prof. B. David (UK), Dr. G. Walker (UK), Director M. Dorheim (D), Prof. D. Stalke (D), Dr. A. Borgschulte (D), Prof. M. Niederberger (CH), Dr. R. Cerny (CH), Prof. Y. Filinchuk (B), Prof. B. Dam (NL), Prof. J. Bystrzycki (PL)), der alle anser et dansk materialemålestation som internationalt meget konkurrencedygtigt.

Infrastrukturen vil blive ledet af et dansk konsortium, der vil repræsentere danske interesser. Den daglige drift af instrumentet skal varetages af dansk finansierede instrumentansvarlige i samarbejde med svenske kollegaer og teknikere. Det forventes, at ca. 50 % af den effektive måletid dedikeres til danske forskere, som selv eller i internationalt samarbejde kan udføre eksperimenter ved MAX IV. Adgang til faciliteten vil generelt ske efter ansøgning i international konkurrence. Der vil dog blive udarbejdet specielle arrangementer, som tilgodeser industriens og den strategiske forsknings behov.

Den meget brede danske opbakning til initiativet viser, at der i høj grad er tale om en national infrastruktur. Det skal dog også understreges, at en dansk bygget og drevet målestation ved MAX IV samtidig vil være en adgangsbillet for dansk brug af samtlige målestationer ved MAX IV. Det er normal praksis ved synkrotronfaciliteter, at måletid kan "byttes" og dette vil give mange andre danske forskere adgang f.eks. til MAX IV proteinkrystallografiske målestationer eller de unikke svenske røntgenspektroskopiske målestationer. Der er også potentiel mulighed for, at Danmark efter aftale med svenskerne kan få adgang til det kommende svenske højenergieksperiment ved den tyske PETRA III i Hamborg. Det svenske PETRA III-eksperiment vil kunne dække komplementære typer af eksperimenter og er også kendetegnet ved sin geografiske nærhed til Danmark.

## 2 Dansk GHz Faststof NMR-Instrumentcenter

### 2.1 Begrundelse og behov for infrastrukturen

Kernemagnetisk resonans (nuclear magnetic resonance, NMR) spektroskopi har siden introduktionen i 1940'erne gradvist udviklet sig til at have en førende position som karakteriseringsmetode inden for en lang

række videnskabelige discipliner: Det er et det absolut vigtigste redskab til identifikation af reaktionsprodukter i organisk kemi, det er sammen med røntgenkrystallografi den vigtigste metode til bestemmelse af strukturen for biologiske makromolekyler med atomar opløsning, det er en stærkt stigende teknologi inden for materialevidenskab og nanoteknologi, metoden er vidt udbredt til studie af metabolitter i systembiologi og det er en banebrydende metode til medicinsk diagnose på alle større hospitalers via MR-scannere. I kraft af nyudviklede ultrahøjfelts NMR instrumentel og avancerede eksperimentelle metoder udvikler faststof NMR spektroskopi sig i disse år med rivende hast som en af de førende metoder til atomar-opløsning analyser inden for materiale og nanoteknologi. Faststof NMR har den helt unikke egenskab, at metoden tillader bestemmelse af molekylers struktur og dynamik med sub-Å opløsningsevne uden at der stille krav om, at molekylerne bringes i opløsning eller ind i store krystaller med langtrækkende 3D ordning. Dette giver fantastiske nye muligheder for at studere funktionelle systemer i native heterogene omgivelser, hvilket er særdeles vigtigt for at kunne karakterisere de mest interessante funktionelle tilstande.

For at udnytte de helt unikke muligheder af faststof NMR spektroskopi ved ultrahøje magnetfelter – der giver en meget væsentligt forøgelse i følsomhed og spektral opløsningsevne i forhold eksisterende instrumentel - i relation til materiale og nanoscience foreslås etablering af et internationalt ultrahøjfelts (GHz) faststof NMR instrumentcenter ved Aarhus Universitet. Målet er at bringe dansk NMR-forskning inden for materiale-nanoscience, bioteknologi og energi instrumentelt på niveau med de allerstærke instrumentcentre i USA, Canada og førende EU-lande og dermed etablere et nordeuropæisk kraftcenter inden for NMR-forskning integreret med europæiske initiativer. Instrumentcentret støttes af alle førende institutionelle og industrielle NMR-forskningsgrupper og brugere i Danmark/Skandinavien. Hensigten er at anskaffe et "world-class" 1 GHz (23.5 T) eller 950 MHz (22.3T) instrument udstyret til faststof- og væskefase-NMR. Instrumentcentret vil bygge på allerede eksisterende centre ("Instrument-center for faststof NMR spektroskopi" og "Center for Biologisk Faststof NMR Spektroskopi" - del af Dansk Bioteknologisk Instrumentcenter DABIC) og centrets aktiviteter vil blive koordineret med "Dansk Instrumentcenter for NMR Spektroskopi på Biologiske Makromolekyler" ved Carlsberg Laboratoriet. Herved vil centret opnå kritisk masse til etablering af en international styrkeposition samt facilitere alle danske NMR brugere og skandinaviske faststof-NMR-brugeres adgang til instrumentel, og fungere som del af EU FP7 BioNMR- og ESFRI INSTRUCT-aktiviteterne. Et GHz NMR center vil have en markant effekt på nordeuropæisk forskning, uddannelse, industrielt samarbejde og tiltrækning af forskere fra stærke internationale forskningsmiljøer til Danmark.

## 2.2 Videnskabelige og samfundsmæssige perspektiver

Etableringen af et højfelts NMR center af internationale dimensioner i Danmark forventes at have en meget væsentlig videnskabelig og samfundsmæssig betydning indenfor en bred vifte af områder. Metoden har et unikt potentiale for at bringe materiale og nanovidenskab frem via detailanalyse af atomare/elektroniske omgiver af aktive molekylære "sites" såvel som bestemmelse af fulde 3-dimensionelle strukturer der afspejler struktur, dynamik og molekylære vekselvirkninger. Ultrahøjfelts udstyr giver en fornødne eksperimentelle følsomhed og stærkt forbedrede muligheder for at studere såkaldte kvadrupolkerner (ex. Al, B, N, S, Cl, Ca, Ti, V, Ca, Mo) der spiller en væsentlig rolle i strukturen eller på overfladen af materialer. For at opnå maksimal synergieffekt vil instrumentet placeret i nye specialdesignede laboratorier i det nye Nanohus ved Aarhus Universitet, hvor man samtidigt sammenlægge de to eksisterende danske faststof NMR centre. Herved kan man opnå optimal udnyttelse af højfelts udstyret og i sammenhæng med eksisterende lavere felts udstyr, hvilket vil bibringe danske og skandinaviske NMR forskere og brugere en helt

internationalt unik facilitet med en meget bred vifte af faglig ekspertise og instrumentel udstyret til forskning inden for uorganiske/organiske materialer, nanoteknologiske makromolekylære strukturer, cement og brintlagringssystemer, polymere, solceller, antimikrobielle peptider, nanomimic biologiske systemer og aktive overflader i relation til katalyse og medicinsk vedhæftning for at nævne nogle eksempler. Instrumentellet vil kunne sikre danske og skandinaviske NMR forskere og brugere tilgang til state-of-the-art instrumentel, tilgang til de Europæiske netværk som centret vil være del i, og facilitere en meget bred vifte af industrielle og offentlig/private forskningsprojekter.

Der eksisterer ved værtslaboratoriet internationalt førende aktiviteter indenfor NMR metodeudvikling, bygning af instrumentel, og fremstilling af analysesoftware som ikke blot vil styrkes markant ved etablering af et GHz NMR center, men også vil sikre at de mange brugere af centret vil kunne faciliteres på alle niveauer spændende fra ekspert brugere til brugere der i højere grad er afhængige af tilgængelig ekspertise indenfor en bred vifte af områder. Herved forlænges den meget succesfulde NMR center model som i Danmark blev etableret i 1996 ved etablering af et væskefase NMR center ved Carlsberg og et fastof NMR center i Århus, og senere forstærket ved etablering af NMR aktiviteterne i Det Danske Bioteknologiske Instrument Center ligeledes i Århus i 1999. Den meget væsentligt forøgelse af state-of-the-art magnet feltstyrker og instrumentelt hardware motiverer meget kraftigt denne forlængelse af NMR centrene fælles aktiviteter i Danmark, deres ekspanderende rolle som Nordeuropæisk kraftcenter indenfor området som komplement/modvægt til de meget store ressourcer der investeres i spredningsudstyr i vores nabolande.

De anvendelsesmæssige perspektiver af GHz faststof NMR spektroskopi er meget store, og vil udover delvis facilitering af den meget store gruppe af danske væskefase NMR spektroskopikere med et GHz udstyr, understøtte dansk forskning indenfor en række områder med allerede eksisterende international tyngde: (1) Materialevidenskab med fokus på heterogen katalyse, uorganiske netværksstrukturer og cementbaserede bygge materialer, (2) Polymere materialer, fibre og biologiske nedbrydelige materialer, (3) Nanobioteknologiske applikationer såsom supramolekylære organiske strukturer, biologiske ionkanaler, antimikrobielle peptider og fibriller med relevans for sygdom og materialeudvikling og (4) brintlagringssystemer, batterier, plastsolceller etc. Disse områder spænder over materiale/nano-videnskab, life-science og energi, hvilket gør forslaget relevant for flere af de prioriterede indsatsområder for infrastruktur, med primært fokus på materiale/nanoteknologi.

### **2.3 National/international indpasning, kapacitet og modenhed**

GHz NMR instrumentcentret etableres ved Aarhus som en forlængelse/fornyelse af tidligere skabte NMR instrumentcentre, der alle er partnere i projektet. Dette gælder "Dansk Instrumentcenter for Faststof NMR Spektroskopi" (Aarhus Universitet – etableret 1994-1996), "Dansk Instrumentcenter for NMR Spektroskopi på Biologiske Makromolekyler (Carlsberg Laboratoriet – etableret 1994-1996) og "Center for Biologisk Faststof NMR Spektroskopi (Aarhus Universitet – Etableret som del af de Danske Bioteknologiske Instrument Center (DABIC) 1999). Disse aktiviteter har været meget succesfulde i form af videnskabeligt output (ved ca. 360 publikationer i internationale tidsskrifter) og etablering af stærke relationer til danske forskningsinstitutioner og virksomheder via samarbejde og udførelse af videnskabelige opgaver. Centrene har bevirket at Danmark som et lille land har kunnet udføre NMR forskning og anvendelser med state-of-the-art meget dyrt udstyr, der ved manglende national koordinering havde været umuligt.

Ved sammenlægning af de to faststof NMR centre ved Aarhus Universitet og koordinering af aktiviteterne med væskefase NMR centret ved Carlsberg Laboratoriet opnås der en facilitet, der understøtter al avanceret Dansk NMR forskning og faststof NMR spektroskopi i Norden. Kombinationen af Skandinaviets pt stærkeste NMR forskningsmiljø ved Aarhus Universitet med et verdensklasse GHz-instrumentcenter vil således give et markant og rettidigt løft af dansk NMR-forskning på internationalt plan. Via den eksisterende laverefelt instrumentpark (700, 600, 500, 2x400, 300 og 200 MHz instrumentel) og plads til yderligere 4 instrumenter (incl højfelts MRI) i nanohuset vil instrumentcentret komplementere Nordeuropas stærkeste forskningsmiljøer inden for nanoscience, strukturel biologi og materialevidenskab ved integration i AU's nye Nanohus (hvor der også etableres SAXS, cryo-EM, AFP/SPM, X-ray udstyr, en række optiske metoder etc, udover en lang række centrale synteseaktiviteter). GHz NMR centret vil markant fremme skandinavisk faststof-NMR, fungere som del af FP7 BioNMR-netværket og fungere som del af ESFRI INSTRUCT "solid-state NMR grid". Centrets aktiviteter vil fra Aarhus Universitet understøttes af ingeniørbistand (afgørende for økonomisk vedligehold, bygning af brugerspecifikt instrumentel og håndtering af cryogener til de superledende magneter) samt assistance til udførelse af eksperimenter ved centret.

## 2.4 Estimat af etablerings- og driftudgifter

Baseret på estimater fra leverandører vurderes det, at et 950 – 1 GHz-NMR-instrument til kombineret faststof og væskefase NMR kan anskaffes for 6-10 M€ afhængig af magnettype/instrumentudstyknig. Det vurderes, at man ved forhandling/udbud vil kunne få et godt og alsidigt højfeltsinstrument for 40-50 MDKK. Investeres mere, kan man få et endnu kraftigere instrument (op til 1.2 GHz, som man pt. forsøger at konstruere).

Bygningen til instrumentet er finansieret af Aarhus Universitet som del af det nye Nanohus der pt bygges og forventes færdigt medio 2012. Den årlige driftsudgift andrager ca. 1 MDKK til flydende He og N<sub>2</sub> (køling af magneten til superledende tilstand) samt vedligeholdelse af rf-udstyr, prober etc. Denne meget lave udgift (der modsvarer normale servicekontrakter der typisk andrager 10% af anskaffelsessummen) opnås ved tilstedeværelse af en Aarhus Universitet ansat NMR-ingeniør (baggrund fra Kazan, Grenoble og Leiden som instrumentbygger) til vedligeholdelse og servicering.

## 2.5 Projektkonsortium og projektstyring

En meget lang række offentlige og industrielle organisationer har udtrykt meget stor støtte til forslaget. Listen omfatter alle danske NMR-forskere, en lang række offentlige og industrielle NMR-brugere, alle skandinaviske faststof-NMR-forskningsgrupper, samt et meget stærkt forskningsnetværk indeholdende de førende europæiske NMR-forskningsinstitutioner:

*Danske forskningsinstitutioner:* AU (N.C. Nielsen, J. Skibsted, T. Skrydstrup, B. B. Iversen, D. Otzen, J. J. Egnhild, T. R. Jensen, T. Vosegaard, A. Malmendal, V. Loetchke, M. Holmstrup, H. C. Bertram), KU (F. M. Poulsen, B. Kragelund, N.-U. Frigaard, F.H. Larsen, S. B. Engelsens, C. Cornett), AAU (R. Wimmer, Y. Yue), DTU (C. Goffredsen, O. W. Sørensen, C. Almdal, S. Hvilsted, F. Krebs), SDU (M. Pedersen, U. G. Nielsen, M. Miller), RUC (P. E. Hansen, K. Schaumburg), GEUS (H. Lindgreen), Carlsberg Laboratoriet (J. Duus, M. Meldal). *Dansk industri:* Danisco (C. Poulsen, H. Max Jensen), Arla (H. J. Andersen), Haldor Topsøe (M. Brorson), Aalborg Portland (J.S. Damtoft), F.L. Smidth (O. Mogensen), Cheminova (M. Hald), Leo Pharma (S. Bolvig), Nanonord (O. Jensen), Lego Systems (S. Kristiansen), Lundbeck (K. B. Simonsen, J.C. Madsen), Novo Nordisk (J. K.

Bilag: Prioriterede forslag til realisering på kort sigt (1-5 år)

Thomsen, J. Breinholt, A. J. Benie), LifeCyclePharma (A. Fullerton), Radiometer Medical (T. Hansen), GEHealthcare (J. Ardenkjær-Larsen).

*Skandinaviske institutioner:* Luleå Tekniske Universitet (O. Antzutkin), Swedish University of Agricultural Sciences (T. Härd), Umeå Universitet (G. Gröbner), Göteborg Universitet (G. Karlsson), Stockholm Universitet (M. Eden), Bergen Universitet (W. Nerdal, J. Underhaug, N.Å. Frøystein), Norwegian University of Science and Technology (F. Aachmann), Helsinki Universitet (P. Permi), SINTEF (H. Justnes).

*Europæiske og internationale forskningsinfrastrukturer og samarbejdspartnere:* Harvard University (N. Khaneja), Technische Universität München (S. Glaser), University of Cincinnati (H. Eghnbalnia), University of Illinois (C. Rienstra, E. Tajkhorshid), Oxford University (A. Watts), University of Edinburgh (C. Hall), FP 7 BioNMR (Koordinator: I. Bertini, Firenze), ESFRI INSTRUMENT (Koordinator: D. Stuart, Oxford, I. Bertini, Firenze, H. Oschkinat, FPM Berlin), NANOCEM (K. Scrivener, Lausanne), Nestle, CH (M. Kussmann), BASF Construction Polymers (L. Nikoleau).

Centret vil organiseres med en bestyrelse, en dirigerende brugergruppe, en daglig ledelse og en serviceenhed, der forestår brugerkontakt, servicering og vedligehold/drift. Instrumentcentret etableres i det nye Nanohus ved AU, hvor der er afsat plads til et instrumentcenter af denne størrelse i kombination med en lang række komplementært udstyr (inkl. cryo-EM, SAXS, MRI, TEM, XRD, optiske spektroskopier). Forskellige tiltag sikrer optimal udnyttelse: 1) Web-baseret ansøgnings/informationsportal. 2) Centrets aktiviteter vil styres af en brugergruppe med repræsentanter fra de største deltagende institutioner og industrivirksomheder i brugerkredsen. 3) Centret har en ingeniør, en AC-TAP og en tekniker ansat til varetagelse af vedligeholdelse, fyldning af kryogene gasser, bygning af specialudstyr og servicering af brugere. 4) Der etableres en træningsfacilitet for institutionelle og industrielle brugere. Et NMR apparat har typisk en levetid på 30 år. Der ansøges om konstruktion og drift i 5 år.

### **3 Målestation til synkrotronstrålingskilden ASTRID2**

#### **3.1 Begrundelse og behov for infrastrukturen**

NANOLINE er en state-of-the-art målestation til materiale- og nanosciencestudier ved ASTRID2, den store nye forskningsfacilitet under opbygning på Aarhus Universitet, som bliver taget i drift i 2012<sup>3</sup>.

ASTRID2 vil producere elektromagnetisk stråling i det synlige, ultraviolette (VUV) og bløde røntgenområde. Adskillige tredje-generationssynkrotroner er på det seneste blevet opført på verdensplan (DIAMOND, ALBA, SOLEIL, BESSY II og ELETTRA), men de fleste af disse fokuserer på den hårde røntgenstråling. Dette efterlader et hul ved lavere energier, som allerede i 1998 blev benævnt "den ultraviolette katastrofe" for at beskrive den voksende mangel på lavenergetiske lyskilder<sup>4</sup>. ASTRID2 udfylder denne niche og bidrager således til at dække den internationale mangel på sådanne synkrotronlys-kilder.

---

<sup>3</sup> ASTRID2 er finansieret af midler fra forrige infrastrukturpulje.

<sup>4</sup> Se f.eks. [www.physicsworld.com/cws/article/print/1755](http://www.physicsworld.com/cws/article/print/1755)

NANOLINE vil udnytte de nye eksperimentelle muligheder, som den ekstreme brillians fra ASTRID2 vil åbne op for, og vil styrke ASTRID2 som en internationalt betydende og veludstyret synkrotronfacilitet. NANOLINE vil blive udstyret med en unik kombination af avancerede fotoelektron-spektroskopier og scanning tunnel mikroskopi (STM). Specifikt vil NANOLINE blive opbygget ved en multipolwiggler ved ASTRID2, hvis stråling vil muliggøre hurtig højopløst fotoemissions-spektroskopi af både valensbånd og dybereliggende niveauer. NANOLINE vil også inkludere en række standard røntgenabsorptionsteknikker (NEXAFS, (S)EXAFS) og vil blive konstrueret, så forskellige grader af elliptisk polariseret lys kan anvendes og således muliggøre målinger af magnetiske egenskaber på nanometerskala.

Kombinationen af i samme opstilling og på samme prøve at kunne bestemme den kemiske/elektroniske struktur med fotoelektron-spektroskopi og den geometriske struktur med STM vil åbne helt nye muligheder for studier af nye avancerede materialer, som vil være af afgørende betydning for mange teknologiske fremskridt. Eksempler inkluderer funktionelle nanomaterialer, polymerer, nanokatalysatorer, solceller, molekylær elektronik, magnetiske materialer til informationslagring, spintronics, biokompatible materialer, osv.

Selvom der er oplagte videnskabelige grunde til at integrere state-of-the-art synkrotronbaserede fotoemissionsteknikker med STM i samme måleopstilling, er kombinationen sjældent blevet forsøgt pga. de store tekniske udfordringer, den medfører. Aarhus Universitets ekspertise inden for både synkrotronstrålingsinstrumentering og STM giver imidlertid en sjælden mulighed for at imødegå disse udfordringer og bygge en unik infrastrukturfacilitet, som vil kunne tiltrække internationale og nationale forskere med udfordrende og banebrydende forslag. NANOLINE har derfor allerede modtaget entusiastisk støtte fra ledende danske og internationale forskergrupper.

NANOLINE vil blive styret som en brugerfacilitet, hvor måletid til internationale og danske brugere vil blive tildelt ud fra kvaliteten af det indsendte forskningsprojekt. Placeringen på Aarhus Universitet vil muliggøre tæt samspil mellem forskningen ved NANOLINE og forskningsbaseret undervisning, specielt gennem den meget succesrige forskerskole ved Det Naturvidenskabelige Fakultet (AGSoS<sup>5</sup>) og nanosciencecentret iNANO (iNANOschool<sup>6</sup>).

### **3.2 Samfundsmæssige og videnskabelige perspektiver**

Udforskning og design af nye materialer har altid spillet en stor rolle i menneskets udviklingshistorie og i dag er nye materialer hjørnestene i bestræbelserne på at løse de presserende udfordringer indenfor miljø, energiforsyning og bæredygtighed. NANOLINE er en ideel og alsidig infrastruktur, som er skræddersyet til forskning i sådanne materialer og den kombinerer to af de mest succesfulde eksperimentelle tilgange til at studere nanoskala materialer. Ud over vigtige resultater i materialeforskning og nanoscience vil NANOLINE åbne mulighed for forskning på højeste internationale niveau, tiltrække internationale topforskere og bidrage til uddannelse af studerende på kandidat- og ph.d.-niveau. Desuden vil NANOLINE skabe forbindelser til højtprofileret forskning i dansk industri. Kombinationen af toneangivende grundforskning,

---

<sup>5</sup> <http://science.au.dk/agsos>

<sup>6</sup> <http://www.inanoschool.au.dk>

erhvervsrettet forskning og uddannelse af dygtige nanoscience-ph.d.'er er afgørende for morgendagens innovative samfund.

NANOLINE vil være et ekstremt alsidigt instrument for materialestudier på nanoskalaen. Opstillingen åbner af flere grunde for helt nye muligheder inden for dette forskningsfelt. For det første vil ASTRID2s høje brillians muliggøre målinger på nanoskala systemer og give information om magnetisk cirkulær dikroisme. For det andet vil korte måletider muliggøre studier af kemiske reaktioner med tidsopløst røntgenfotoemissionsspektroskopi. For det tredje vil integrationen af fotoemission og STM placere infrastrukturen ideelt for at kunne virke ved forskningsfronten af moderne nanoscience. Faktisk har kombinationen uden *in situ* integration allerede resulteret i videnskabelige gennembrud ved den eksisterende ASTRID synkronstrålingsfacilitet. Herunder gives tre eksempler, som repræsenterer bredden i NANOLINE's anvendelsesmuligheder og det internationale samarbejde:

### **Båndgab i grafen**

Grafen, der består af et enkelt atomart lag af carbonatomer, er udråbt til at være et af de mest lovende materialer til ultrahurtige laveffekt elektroniske anvendelser. Selvom grafen har alle de nødvendige elementer for at kunne leve op til disse forudsigelser, og de første testkomponenter allerede er blevet bygget, er et alvorligt problem manglen på et iboende båndgab i elektronstrukturen. Et moderat båndgab er den egenskab, der definerer et materiale som en halvleder og er dermed selve nøglen til switching i en transistor. Ved at bruge en kombination af STM og fotoemission ved ASTRID har et internationalt forskerhold for nylig vist, at et sådant båndgab kan indføres i grafen vha. hydrogenadsorption i et bestemt mønster (Nature Mat. **9**, 315 (2010)).

### **Afsvovlingskatalysator**

Afsvovling af fossile brændstoffer på olieraffinaderier er en katalytisk proces med stor miljømæssig og økonomisk betydning. Trekantede nanoklynger af molybdændisulfid kan bruges som modelkatalysatorer for at forstå processen, specielt klyngekanternes betydning for afsvovlingsreaktionen (Adv. Catal. **50**, 97 (2006); Nature Nanotechnol. **2**, 53 (2007)). Forskere ved iNANO og Haldor Topsøe A/S har været i stand til at kombinere den strukturelle information fra STM med kemisk information fra synkrotronbaseret XPS ved ASTRID, hvor atomer ved klyngekanter giver et distinkt signal. Dette katalysatorstudie viser, hvordan NANOLINE vil muliggøre studier (også i realtid) med hidtil uset detaljegrad af mange andre vigtige kemiske systemer.

### **Fotoemission ved grænseflader**

En gruppe fra Dublin har udført fotoemissionseksperimenter ved ASTRID vedrørende grænsefladedannelse med  $\text{HfO}_2$ , et højt- $k$  dielektrisk materiale, og et ultratyndt siliciumdioxidlag.  $\text{HfO}_2$  er en af de bedste kandidater til det isolerende lag i næste generation af transistorer. Resultaterne fra højtopløste fotoemissionsstudier af  $\text{SiO}_2/\text{Si}(111)$  gav evidens for forstyrrelser i grænsefladen ved *in situ*  $\text{HfO}_2$ -deponering. Dette indikerede, at man bør fokusere på at identificere højt- $k$ -materialer eller deponeringsmetoder, som kan forhindre nedbrydningen af  $\text{Si}/\text{SiO}_2$ -grænsefladen og derved bevare grænsefladets integritet (Appl. Phys. Lett. **95**, 072903 (2009)).

Flere andre resultater fra internationale samarbejder og baseret på kombinationen af fotoemissionskombinationen ved ASTRID og STM har ført til publikationer i Science, Nature

Nanotechnology, Journal of the American Chemical Society, Physics Review Letters, osv., men udelades her af pladshensyn.

### 3.3 National/international indpasning, kapacitet og modenhed

I modsætning til målestationer ved udenlandske synkrotronfaciliteter vil NANOLINE blive fast forankret i et universitetsmiljø og vil være bredt anvendelig til forskningsbaseret uddannelse, specielt på kandidat- og ph.d.-niveau. Aktiviteterne vil blive knyttet til forskerskolen ved iNANO-centret og Det Naturvidenskabelige Fakultets forskerskole AGSoS. NANOLINE vil give nationale og internationale studerende enestående muligheder for at blive involveret i projekter med førende forskere. NANOLINE vil dermed fremme netværksdannelse og internationalisering for nationale studerende og vil tiltrække internationale studerende og derved bidrage til "brain gain" til det danske samfund.

NANOLINE vil blive anvendt som en brugerfacilitet understøttet af en akademisk uddannet tekniker. Vi estimerer, at 180 dage vil være til rådighed for brugere. Den typiske varighed af et eksperiment er 1-2 uger, så der vil kunne udføres 15-25 eksperimenter om året. STM- og fotoemissionsinstrumenteringen vil blive konstrueret som to relativt uafhængige afsnit, forbundet gennem et overførselssystem til prøver. Dette højner effektiviteten, idet præparation og analyse i STM-delen kan foregå, medens fotoemissionsdelen bruges til et andet, typisk relateret, eksperiment.

Nærværende NANOLINE forslag er motiveret af vigtige grundlæggende og anvendte videnskabelige spørgsmål og af det faktum, at de tekniske værktøjer til at angribe disse problemstillinger nu er inden for rækkevidde. Konstruktionen af ASTRID2 er påbegyndt, og de første accelererede elektroner forventes i 2011 med forventet synkrotronstråling til rådighed for brugere i 2012.

Konstruktionen af NANOLINE står over for to større tekniske udfordringer. For det første skal synkrotronstrålingsmålestationen integreres med et STM i et mekanisk og elektronisk støjende miljø. For det andet vil et monokromatordesign, der muliggør rotation af lysets polarisation, kræve ultrapræcis styring af monokromatorens og målestationens position. Begge udfordringer kan løses vha. AU's specifikke kompetencer: Aarhus STM-designet er kendt for dets stabilitet og høje ydelse selv i støjende omgivelser. Udvikling af synkrotronstrålingsudstyr er lige så langt fremme: for eksempel designedes, byggedes og kommissioneredes for nylig ved AU en af verdens mest avancerede monokromatorer til frielektronlaseren FLASH i Hamborg.

### 3.4 Projektkonsortium og projektstyring

Flere danske og nordiske grupper har udtrykt stor interesse i at anvende NANOLINE, for eksempel Aarhus Universitet (syv grupper fra Det Interdisciplinære Nanosciencecenter (iNANO) og institutterne for Fysik og Kemi), SDU (prof. Per Morgen) og Aalborg Universitet (prof. Kjeld Pedersen og prof. Lars Diekhöner). Grupper fra DTU (prof. Peter Bøggild) og Københavns Universitet (prof. Bo Laursen) er også interesserede i at bruge NANOLINE i forbindelse med planlagt forskning i egenskaberne ved ren grafen og med adsorberede molekyler. En gruppe fra Norges Tekniske Universitet i Trondhjem (prof. Erik Wahlström) vil udnytte NANOLINE's muligheder i forbindelse med avancerede nanoskala magnetiske materialer. Ud over de akademiske forskergrupper, har dansk industri (Haldor Topsøe A/S) og Teknologisk Institut også udtrykt interesse for projektet. Vi har diskuteret projektforslaget med flere europæiske nøglepersoner inden for nanofysik og -kemi og har modtaget entusiastiske støtteerklæringer, for eksempel fra prof. Maria Carmen Asensio (LURE, tidligere videnskabelig direktør for International Union for Vacuum Science and

Applications), prof. Enrique Ortega (San Sebastian, ekspert i kombinationen af STM og fotoemission på nanostrukturerede systemer), og prof. Falko Netzer (Graz, en af Europas førende eksperter i oxidnanostrukturer og modtager af et ERC Advanced Grant inden for feltet). I tillæg til disse grupper, som er valgt for at eksemplificere interessen fra førende europæiske forskere, forventer vi stigende interesse i brugen af VUV og blød røntgenfotoemission fra ASTRID2 (omkring 10 internationale grupper per år fra Europa, USA og Kina).

NANOLINE's ledelse vil sikre bred adgang for danske og udenlandske brugere og vil derved skabe en international facilitet. Dette opnås ved at integrere NANOLINE i den eksisterende organisation Institute for Storage Ring Facilities (ISA), som er et forskningscenter under Institut for Fysik og Astronomi ved Aarhus Universitet. ISA vil drive den kommende synkrotronstrålingskilde ASTRID2 og driver allerede den eksisterende synkrotron ASTRID, som er en af de få forskningsinfrastrukturer af internationalt tilsnit, der er bygget og drives i Danmark. Faciliteten er blevet drevet af ISA som en brugerfacilitet i mere end 10 år med støtte fra flere på hinanden følgende transnationale accessprogrammer finansieret af Europakommisionen. Faciliteten har kørt op til syv målestationer med monokromatorer i ca. 40 uger om året, syv dage om ugen, 24 timer om dagen. Omkring 150 besøgende om året har brugt de eksperimentelle faciliteter, heraf cirka 50 % fra udlandet, 25 % fra Århusområdet og 25 % fra resten af Danmark.

Planen er at lade ISA drive NANOLINE sammen med de eksisterende og planlagte målestationer ved ASTRID/ASTRID2. En fast fysikeruddannet forsker/tekniker fra ISA samt elektronik- og maskinværkstederne på Institut for Fysik og Astronomi, IFA, vil yde støtte til eksterne brugergrupper. En international komite bestående af førende forskere inden for feltet vil tildele adgang til beamtid på NANOLINE bedømt efter ansøgers videnskabelige kvalitet og forskningsplaner. Ud over forskningsområderne beskrevet ovenfor (materiale- og nanoscience, kemi og fysik), har ASTRID og ASTRID2 en stærk profil inden for (molekylær)biologi med flere grupper fra hele verden.

Den tekniske leder af ISA er ansvarlig for ISA's daglige drift og refererer til institutlederen på IFA. En rådgivende bestyrelse bestående af internationale eksperter og industrielle interessenter vil blive dannet over de næste to år for at føre tilsyn med driften og for at rådgive IFA's institutleder og ISA's tekniske leder.

ASTRID2 og dens målestationer udgør et stort strategisk initiativ og en anselig økonomisk forpligtelse for Aarhus Universitet. Målestationer med tilhørende monokromator og magnetsystem (wiggler) som NANOLINE er altafgørende for at udnytte den hidtidige investering på omkring 150 mio. kr. i bygninger, acceleratorer, osv. En bygning med højstabil gulv (som påkrævet til STM) har eksisteret i nogen tid, men de yderligere anseelige driftsomkostninger til acceleratorer og brugerstøtte dækkes af Aarhus Universitet.

### **3.5 Estimat af etablerings- og driftsudgifter og tidsplan**

En detaljeret plan og estimat af etableringsudgifterne til NANOLINE blev udarbejdet i forbindelse med konstruktionen af ASTRID2. Priserne er baseret på konkrete tilbud fra relevante leverandører. I forberedelsesfasen (1.6.2010 – 31.12.2010) startes opbygningen af ASTRID2 og forudsætningerne for etablering af NANOLINE bliver skabt (1 mio. DKK). Det samlede budget for konstruktionen af NANOLINE (1.1.2011 – 31.5.2012) er 29 mio. DKK. Beløbet dækker over en multipol-wiggler (4 mio. DKK) med et felt på 2 T, en højtopløst monokromator og de tilhørende optiske elementer til synkrotronstrålingen (12 mio. DKK), og et UHV eksperiment/analyse kammer 13 mio. DKK). Denne opstilling indeholder de eksperimentelle teknikker som før beskrevet, specielt STM udstyr og elektronanalysator til fotoelektron spektroskopi

Bilag: Prioriterede forslag til realisering på kort sigt (1-5 år)

inklusive NEXAFS og (S)EXAFS. Det forventes at NANOLINE sammen med ASTRID2 vil være et interessant instrument i op til 18 år med årlige driftsomkostning på 1.5 mio. DKK. Dekommisionering af NANOLINE forventes at ville koste 0,2 mio. DKK.