

Indholdsfortegnelse

Introduktion (s 3)

Formål (s 3)

Afgrænsning af kortlægning (s 3)

Potentiale for forskning og udvikling i hårde, bløde og biologiske materialer (s 4 – 10)

Spidskompetencer på Københavns Universitet (s 11 – 20)

Spidskompetencer på Danmarks Tekniske Universitet (s 21 – 25)

Anbefalinger til fremme af nedbrydelse af barrierer og understøttelse af muligheder (s 26 - 27)

Introduktion

I de kommende år vil to af verdens største og mest avancerede forskningsinfrastrukturer blive bygget i Lund; The European Spallation Source (ESS) samt MAX IV. Brugen af disse stærke neutron og røntgen kilder vil åbne op for en række nye muligheder i relation til undersøgelse af materialer på nano- og atomar niveau – indenfor hårde, bløde og biologiske materialer. Eksperimenterne på ESS supporteres af forskningsinfrastrukturen ESS Data Management og Software Centre, som placeres i København.

København og Danmark vil have stor fordel ved at ligge så tæt på faciliteterne, som vil have en stor indvirkning på den fremtidige forskning og undervisning på universiteterne. Med den rette indsats kan faciliteterne fungere som en saltvandsindsprøjtning for forskning og innovation i Danmark og på sigt få afgørende betydning for erhvervslivets vækst.

Erfaringerne fra områder med lignende avancerede forskningsinfrastrukturer viser at det er kritisk vigtigt at starte tidligt, hvis en region skal drage nytte af en facilitet. Dette er grunden til at Region Hovedstaden har taget initiativ til at igangsætte en række konkrete tiltag, hvis formål er at bygge bro og etablere samspil mellem danske forskningsmiljøer og erhvervsvirksomheder om udnyttelsen af ESS og MAX IV. De har i den forbindelse initieret projektet *ESS og MAX IV som vækstmotorer i Hovedstadsregionen*. Kortlægningen af spidskompetencer i forskningsmiljøerne er en underaktivitet til dette projekt.

Formål

På nuværende tidspunkt er det kun få forskningsmiljøer på universiteterne i Region Hovedstaden, som gør brug af forskningsfaciliteter som ESS og MAX IV. Formålet med kortlægningen er at identificere eksisterende forskningsmiljøer, der har ekspertise indenfor brugen af røntgen og neutroner. Desuden at identificere miljøer der med fordel kunne gøre brug af teknikkerne.

Afgrænsning af kortlægning

Kortlægningen begrænser sig til Københavns Universitet og Danmarks Tekniske Universitet. Der er naturligvis spidskompetencer i relation til brugen af røntgen- samt neutron-spredning repræsenteret på Danmarks andre universiteter. Men da Vækstmotorprojektets hovedfokus ligger i Region Hovedstaden, er der sket en afgrænsning til KU og DTU.

Potentiale for forskning og udvikling i hårde, bløde og biologiske materialer¹

MAX IV vil når den står færdig have den højeste brillans samt mindste vertikale emmitans i verden. Ligeledes vil ESS være mindst en faktor 10 kraftigere end de bedste nuværende neutronkilder i USA og Japan og 100 kraftigere end den nuværende europæiske neutronkilde ILL. Dette er et resultat af nye teknologiske landevindinger for synchrotronstråler og neutronkilder. ESS og MAX IV vil således være enestående, når det gælder om at undersøge og forstå hårde, bløde og biologiske materialer.

På ESS og MAX IV, vil det være muligt at bruge neutron- og røntgenstråling til samme typer af eksperimenter, men eftersom neutroners og røntgenphotoners egenskaber er meget forskellige vil vekselvirkning med prøven/materialet være meget forskellig. Dette kan med fordel udnyttes ved at lave eksperimenter på den samme prøve ved hhv. ESS og MAX IV. En mulighed der vil være langt mere tilgængelig end ved andre anlæg i verden, idet ESS og MAX IV blot ligger 1 km fra hinanden.

Kombinationen af resultater fra eksperimenter ved ESS og MAX IV giver altså forskere unikke muligheder for nye videnskabelige gennembrud indenfor alle typer af materialer.

I den følgende tekst vil perspektiverne for forskning i hårde, bløde og biologiske materialer blive gennemgået. I den forbindelse vil potentialerne for konkrete forskningsområder blive beskrevet.

ESS og MAX IV kommer til at have stor påvirkning på materialevidenskab i den bredeste forstand. Dette er baseret på neutron- og røntgenstrålings evne til at give nøjagtig information om atomers position og bevægelse, om størrelse og form af objekter på nanometer skala, om stoffers magnetiske egenskaber, samt strålingstypernes evne til at gennemtrænge større mængder af stoffer.

Potentialet for studiet af materialer er stor. Arbejdet er tværdisciplinært og dækker over fysik, kemi, engineering, geologi, kunst/arkæologi samt life science. I det følgende vil disse områder blive beskrevet nærmere. Mange af emnerne er allerede relevante for forskningen på Københavns Universitet samt DTU i dag, eller kunne med rette bliver relevante i fremtiden.

Hårde materialer

Geoscience

Geo videnskaben vil kunne have glæde af så at sige alle teknikkerne som vil være tilgængelige på ESS og MAX IV; imaging, diffraktion, spektroskopi samt in-situ studier. På MAX IV vil det være

¹ Afsnittet "Potentiale for forskning og udvikling i hårde, bløde og biologiske materialer" er baseret på uddrag fra publikationen "University of Copenhagen and the future use of neutron and X-ray sources" fra Københavns Universitet, Maj 2013.

muligt at bestemme mineral fordelingen i sten ved hjælp af røntgen diffraktion, som vil kunne blive en standard metode. Samtidigt vil det på ESS være muligt at understøtte undersøgelserne på MAX IV idet det er muligt at bestemme placeringen af lette elementer så som vandindholdet i porer i sten eller i jord. Både på MAX IV og ESS kan diffraktion og uelastisk spredning under ekstrem høje temperaturer og tryk afsløre strukturer af mineraler og deres faseovergange under forhold der minder om dem der er i jordens indre. Denne viden kan på sigt bidrage til at forstå og forudse vulkansk aktivitet samt jordskælv.

Det vil være muligt at lave 3D kortlægning af mineraler i stærkt inhomogene sten ved brug af røntgen og neutron tomografi, uden at skulle ødelægge sjældne prøver. I relation til meteoriter, vil det være muligt at få viden om forholdene i det unge solsystem. Den samme teknik kan bruges for detaljerede undersøgelser af fossiller samt andre paleontologiske beviser på fortidens liv.

MAX IV og ESS vil ligeledes vise store potentiale i relation til at afsløre detaljer om krystalstruktur og hydrogen dynamikker af iskerner fra f.eks. Grønland eller Antactis. Dette vil kunne give vigtig viden om fortidens klima.

Energi materialer

Et meget vigtigt område for ESS og MAX IV bliver at udvikle materialer der vil medvirke til at der sker en reduktion i jordens energi ressourcer samt energi lagring. Dette strategiske mål dækker over en række vigtige områder; lettere og stærkere konstruktionsmaterialer, batterimaterialer med forbedret kapacitet og holdbarhed, lettere og mere effektive hydrogenlagrings materialer, effektive katalysatorer, solceller med forbedret effektivitet, nye materialer til brændselsceller samt forbedrede termoelektriske materialer der omdanner overskudsvarme til elektricitet. Det er ofte nødvendigt at forstå materialers atomare eller mesoskopiske egenskaber for at åbne en detaljeret forståelse af hvordan man kan forbedre et materiale. I den forbindelse kan røntgenstråling benyttes til at opnå generelle atom- og nanoskala strukturer af materialerne, imens neutroner kan bruges til specifikt at identificere (probe) positionen af specielle grundstoffer (især hydrogen), og studere atomernes dynamik og bevægelse.

Funktionelle materialer

Der er en stor klasse af materialer som har fysiske egenskaber, med et stort samfundsmæssigt potentiale. Blandt disse egenskaber er magnetisme, elektrisk ledningsevne, polarisering samt elasticitet. Eksempler på forskning indenfor dette felt er magnetisme i molekyler samt andre nanoskala objekter til optimering af datalagring, nye stærke magnetiske materialer (f.eks. generatorer) samt superledning hvor målet er at skabe materialer der kan superlede ved stuetemperatur. Sidstnævnte vil have stor værdi i relation til dannelse samt transport af elektrisk strøm.

En ny klasse af materialer multiferroiske, har både elektriske, magnetiske samt elastiske egenskaber, og de er forudset til at have store potentialer f.eks. som sensormaterialer. MAX IV vil

kunne bruges til at studere struktur samt magnetiske egenskaber ved disse materialer, imens ESS især vil være stærk på at studere magnetisk struktur, gittervibrationer og dynamik i materialerne.

Engineering materials

I kombination vil ESS og MAX IV være stærke værktøj til at studere materialer, der i dag er normale i forbindelse med byggerisektoren så som stål, aluminium, legeringer, cement, træ og composit materialer. Formålet med studierne er at forstå mekanismerne bag nuværende problemer så som metaltræthed, svejsefejl samt dehydrering. Røntgen og neutron metoder vil være i stand til at afsløre revner, kornstørrelse, stres og belastning såvel som kemiske ændringer.

Materialer med nanostruktur

Udviklingen i relation til den store forøgelse i brillians har gjort moderne røntgen synchrotron faciliteter i stand til at udvikle en række nye teknikker til visualisering af strukturer af hårde og bløde materialer ned i nanometer skalaen. Dette er opnået ved at udnytte kildens lille størrelse samt nye optiske enheder til at fokusere røntgenstrålen til mindre end 50 nanometer og derved danne billeder af 3D strukturer af individuelle nanoskala objekter. Disse nye analytiske enheder har stort potentiale i udviklingen af nye funktionelle materialer samt indenfor life science og medicinske afbildningsmetoder.

New state of matter

Over det sidste årti, er der kommet en ny serie af stoffer til, som ved lave temperaturer afslører nye tilstandsformer, hvor elektroner er korreleret på en måde, som kun kan forklares ved kvantemekaniske metoder. Denne erkendelse er fundamental for vores forståelse af naturen på samme måde som kosmologi og partikel fysik, og egenskaber af disse materialer er i visse tilfælde en direkte manifestation af forhold kendt indenfor atom og partikel fysik, som Yukawa kræften og Higgs mekanismen. Disse korrelerede materialer kan på sigt bidrage til nye paradigmer i forhold til den måde information behandles, også kendt som "quantum computing". Blandt nye opdagelser indenfor disse materialer inkluderer quantum phase transitions, spin ice, magnetiske monopole, skyrmions samt topologisk orden. Pump-probe eksperimenter på disse systemer med røntgen og neutroner kan afsløre egenskaber af kvantetilstande ved ydre påvirkning (temperatur, tryk, magnetfelt); et emne som er af stor interesse indenfor grundlæggende kvantemekanik.

ESS vil også blive brugt til at studere egenskaberne af neutronen selv, herunder elektriske dipol moment, dets kvantemekaniske bølgeegenskaber og dens henfald og livstid.

Bløde materialer

Polymer systemer

Polymer og polymer/uorganiske nanocompositter har en bred vifte af anvendelser i det daglige liv, og et potentiale for endda mere avancerede anvendelser. Eksempler på dette er brugen af selvassocierede amphifile molekulære systemer, der danne transparente geler som vil kunne benyttes i transport af lægemidler eller drug delivery systemer eller erstatte dele af den

menneskelige krop. Et eksempel på dette er nye polymere/uorganiske compositter der erstatter glaslegemet i øjet. Et relateret materiale dog med en helt anden anvendelse er polymer/nanopartikler til brug i membraner med katalytisk funktion i brændselsceller. Både røntgen- og neutronsprengningsteknikker er centrale i studiet af sådanne materialer. Neutronsprengning har en speciel fordel indenfor polymervidenskaben, idet det store antal af hydrogen atomer gør det muligt at mærke med deuterium, således at det er muligt at studere egenskaber for enkeltmolekyler.

Udvikling af lægemidler

En af de store forhindringer i forhold til udviklingsprocessen af nye lægemidler, er at finde den optimale doseringsform (f.eks. tabletter eller kapsler) samt hvordan disse skal fremstilles.

Traditionelt sker undersøgelser af den egnede dosis af et lægemiddel ved hjælp af trial-and-error, hvor de mekaniske og kinetiske egenskaber samt den termodynamiske stabilitet bliver testet eksperimentelt. De traditionelle metoder er således kun i stand til at undersøge egenskaberne efter der er sket en karakterisering af doseringsform. Intensiteten af synchrotron lyset samt fluxen af neutroner fra spallationskilden giver mulighed for design af hidtil ikke mulige eksperimenter, så som tidsopløste studier samt studier af lægemidler på submicron længdeskala.

De nye værktøj på storskala faciliteterne åbner op for muligheder i forhold til at studere ændringer imens de sker, *in situ*, samt for at karakterisere inhomogenitet og krystaline materialer ned på nano-niveau, ved at bruge en lang række af eksperimentelle teknikker; studie af krystallers egenskaber ved kombination af in-situ mikro-indentation og røntgenmikroskopistudier; *in-situ* tryk studier ved brug af synchrotron pulverdiffraktion; *in-situ* opløselighedsstudier ved brug af pulverdiffraktion (PXR) samt små vinkel spredning (SAXS); Stabilitetsstudier af polymorfe strukturer ved brug af multi-temperatur røntgen og neutron eksperimenter; og studier af defekter, uorden og blandede faser af krystaller ved brug af røntgenmikroskopi og målinger af diffus spredning.

Fødevidenskab

En voksende efterspørgsel på sunde fødevarer samt produkter med øget funktionalitet, kræver en dybere forståelse for de grundlæggende strukturer og interaktioner i fødevarer. De fleste metoder der bruges i dag indenfor fødevidenskab er indirekte makroskopiske målinger, så som vandtab i pølser eller faldtallet i korn. Med metoderne som vil være til rådighed på ESS og MAX IV vil det være muligt at lave direkte målinger på mikrostrukturerne samt dynamikken i fødevarer, og derved opnå en grundlæggende forståelse af de processer der finder sted på mikro- og nanoniveau. Ved brug af røntgen- og neutronsprengningstekniker vil det være muligt at undersøge de enkelte byggesten i fødevarer, f.eks. proteiner, kulhydrat og lipider. Derudover vil hurtige røntgentomografi metoder gøre det muligt at få in-situ 3D billeder af de ændringer der sker i fødevarer i takt med at den bliver tilberedt. Et eksempel på dette kunne være at se hvad der sker under bagning af brød eller tilberedning af kød.

Kunst samt kulturarv

Det gælder for en række af de humanistiske discipliner et de objekter der bliver undersøgt er sjældne og kan kun blive undersøgt ved ikke-destruktive undersøgelser. Eksempler på dette er sjældne og kostbare kunstværker samt historiske og arkæologiske artefakter. I den relation kan røntgen og neutroner være af stor betydning, i det kombinerede tomografiske og mikroskopiske teknikker kan bruges til at visualisere indre strukturer og indikere distributionen af elementer i sjældne objekter. Et eksempel på dette kunne være at afsløre tidlige skitser under berømte malerier. Endvidere vil diffraktionsteknikker muligvis kunne bruges til at studere krystalline strukturer som vil kunne afsløre f.eks. den proces der er blevet brugt til produktion af objektet.

Life Science

I de seneste år er menneskets forståelse af cellulære og molekylære processer i levende organismer blevet markant forbedret takket være en nye teknologiske landvindinger indenfor molekylærbiologi, cellebiologi, kemi og fysik. Eksempelvis bliver både de humane genomer samt genomer fra en række andre organismer næsten rutinemæssig sekvenseret, hvilket giver viden om et utal af gener der koder for et forbløffende antal af forskellige proteiner. Disse proteiner spiller en vigtig rolle i reguleringen af funktionen af komplekse biologiske systemer lige fra en enkelt celle til mennesket. Man er umiddelbart kun lige begyndt at forstå kompleksiteten af disse systemer, selvom at denne indsigt er nødvendig for at finde nye behandlingsformer imod lidelser som kræft, diabetes, fedme, smitsomme- samt neurodegenerative sygdomme. Denne indsigt er nødvendig for at kunne udvikle strategier for forebyggelse af sygdomme og der igennem at forbedre livskvaliteten. I lyset af en hurtigt voksende population af ældre, især i de udviklede lande, er udfordringen endnu større og kræver stor investering i sundhedsvidenskab samt adgang til de bedst mulige instrumenter.

Adgangen til avancerede instrumenter og infrastruktur er blevet mere og mere vigtig sammen med den tværdisciplinære vekselvirkning med andre videnskabelige discipliner som fysik og kemi, for at kunne håndtere de grundlæggende udfordringer der er i biomedicinsk forskning. Evnen til at dissekere og visualisere atom og molekylære strukturer af biomolekyler er af central og voksende betydning. Dette kræver adgang til en bred vifte af forskellige metoder, der alle kræver adgang til instrumenter på storskala faciliteter så som røntgen- og neutronspreddning, NMR (nuclear magnetic resonance) samt elektronmikroskopi. Etableringen af ESS og MAX IV vil bidrage til en række nye, vigtige muligheder for forskerne i Hovedstadsregionen.

I det følgende vil mulige anvendelsesområder for brugen af røntgen og neutroner, hvor Københavns Universitet allerede har stærke ekspertiser, blive gennemgået.

Farmakologi og drug discovery

Den seneste udvikling indenfor krystallografiske metoder har gjort det muligt at krystallisere både eksisterende samt potentielle mål for lægemidler her i blandt membranreceptorer, transportører samt ionkanaler. Krystallisering af disse proteiner samt bestemmelse af atomstrukturen ved hjælp

af stærke røntgenkilder som dem ved MAX IV forventes at blive et kæmpe fokusområde i de komne år. Forventningen er at sådanne undersøgelser vil give en vigtige ny indsigt i den molekylære funktion af disse proteiner samt hidtil uhørt indsigt i forhold til interaktion mellem lægemiddel og receptor samt mekanismer for hvordan lægemidlet virker. Dette kan måske være med til at revolutionere nye opdagelser indenfor lægemidler ved at facilitere rationel lægemiddel design og udvikling af nye typer af lægemidler med skræddersyede funktioner samt målrettede leveringsmekanismer.

Drug delivery

Hvert år identificeres der en række nye potentielle lægemidler, desværre er kun et fåtal anvendelige grundet udfordringer i forhold til at transportere lægemidlet til dets mål samtidigt med at det bibeholder sin virkning. De fleste moderne drug delivery systemer er afhængig af partikler ned i nanoskala. For at opnå forståelse og kontrol af disse systemer er det nødvendigt at kende strukturen. Dette kan opnås ved en kombination af brugen af neutron og røntgen spredning samt elektronmikroskopi.

Cellebiologi og sygdom

Brugen af røntgen krystallografi sammen med røntgen- og neutronspreddning er vigtige teknologier i forsøget på at forstå og adskille mekanismer der er ansvarlige for regulering af intracellulære netværk for signallering samt hvordan ændringer i disse kan lede til ændringer i cellefunktion samt sygdom. Anvendelse af røntgen- og neutronspreddningsteknikker kan vise sig at være særlig vigtige i forståelsen af den molekylære struktur og dynamik af protein-protein samt protein-lipid komplekser kritisk vigtig for oprettelse af cellens homeostase.

Smitsomme sygdomme

Smitsomme sygdomme er blandt verdens store udfordringer, som en konsekvens af, at der er opstået flere og flere multiresistente bakterier. Det er således af stor vigtighed at der sker en udvikling af ny antibiotika, der virker og transporteres anderledes. Anvendelse af røntgen- og neutronspreddningsteknikker vil kunne give vigtig strukturel information om potentielle antibakterielle targets for antibiotika, samt belyse de molekylære mekanismer der ligger bag infektionen. Derudover vil spredningsteknikkerne kunne bruges i forsøget på at afdække hvordan processen for infektion er medieret f.eks. for vira.

Syntetisk biologi

Syntetisk biologi repræsenterer et område i vækst der kombinerer videnskab og teknik til at designe nye biologiske funktioner og systemer. Ved at lære at håndtere intakte biologiske molekyler og moduler, især gennem selvansamling, er målet at opnå indsigt, værktøj samt teknologier til at lave og karakterisere systemer med nye skræddersyede biologiske funktioner. Adgangen til topklasse røntgen og neutron kilder er essentiel for disse anstrengelser for at opnå indsigt i struktur samt kontrol af selvansamling af nano-strukturer.

Miljøvidenskab og toksikologi

Forurening fra eksempelvis nanopartikler repræsenterer i stigende problem i det nuværende samfund. Der vides meget lidt om de konsekvenser de har på menneskets helbred. Brugen af røntgen- og neutronspreddningsteknikker kan vise sig at være et vigtigt værktøj i bestræbelserne på at afdække de toksikologiske effekter af disse partikler i menneskets celler.

Medicinske implantater og materialer

Både røntgen- og neutronspreddningsteknikker er utrolig værdifulde når det kommer til studiet af egenskaber og strukturer af biomaterialer. Der er således store potentialer i udvikling og forbedring af medicinske implantater. Dette inkluderer eksempelvis forbedret tandimplantater samt strategier for regeneration frem for at erstatning af knoglevæv.

Spidskompetencer på Københavns Universitet

Ekspertisen indenfor brugen af røntgen og neutroner i det videnskabelige arbejde begrænser sig til få forskningsmiljøer på Københavns Universitet. Aktiviteterne foregår primært på Niels Bohr Institutet, Kemisk institut samt Biostructural Research.

SCIENCE

Niels Bohr Institutet

Forskningen på Niels Bohr Institutet spænder over astronomi, geofysik, nanofysik, partikelfysik, kvantefysik og biofysik. Under NBI udmærker især X-ray and Neutron Scattering (XNS) gruppen sig i brugen af røntgen og neutron spredning.

X-Ray and Neutron Science Section – XNS

Sektionen fokuserer på strukturelle studier samt forholdet mellem struktur og funktion indenfor molekylær- og materialevidenskab. Forskningen bevæger sig indenfor feltet strukturel materialevidenskab i sin bredeste definition, der spænder fra magnetisme og superledning til syntetiske polymerer, biomolekyler og farmaci.

Blandt de systemer der studeres er magnetiske samt superledende materialer. Målet er at opnå grundlæggende forståelse for solid state fænomener og deres termodynamik samt at observere nye fysiske effekter og egenskaber. Andre emner er tættere på mulige anvendelse, såsom multiferroiske materialer (sensor materialer), og nano-magneter (medicin, datalagring). Det langsigtede mål er at skabe grundlag for optimale fremtidige materialedesign samt nye applikationer. Der benyttes overvejende uelastisk neutronspreddning og neutroddiffraktion til at undersøge ovenstående materialer.

Polymerer og kolloider er materialer, der bredt anvendes i dagligdagen. Eksempler på disse er husholdningsartikler og fødevarer. Disse materialer, reagerer ofte kraftigt, selv når de udsættes for meget små påvirkninger, der afspejler den hårfine balance mellem de forskellige interaktioner. Strukturelle undersøgelser er afgørende for forståelsen af disse fænomener, en forståelse der åbner nye muligheder for øget kontrol af parametre f.eks. i nye formuleringer. Til de strukturelle undersøgelser benyttes småvinkel røntgen- og neutronspreddning (SAXS og SANS).

Bio-macromolekyler samt molekylære ansamlinger udgør grundlaget i fødevarer, farmaci og moderne medicin. Forståelse for forholdet mellem struktur og funktion er afgørende for design og udvikling af ny medicin. XNS gruppen benytter i den forbindelse SAXS og SANS til at opnå en bedre forståelse for dette.

Andre eksempler på gruppens forskning er polymorfisme i lægemidler; hydreringsprocesser samt udvikling af den porøse strukturdannelse i dentalcement; og dynamik i lukkede systemer,

herunder vand i ler og beton, lokalbedøvelse og kræftmedicin kompleksbundet i forskellige deliverysystemer. Fælles for denne forskning er at opnå forståelse af effekterne af strukturelle ændringer på de fysiske egenskaber i og induceret rundt om et materiale. Til denne forskning benyttes en lang række teknikker her i blandt elastisk og in-elastisk neutron spredning samt røntgen- og synkrotronstråling.

Ved brug af røntgen og neutroner til billeddannelse kan opnås et rumligt billede af struktur og funktion dels i 2D ved hjælp af radiografi, men også i fuld 3D via CT-skanning. Sektionens aktiviteter inden for imaging spænder vidt over energiteknologi, odontologi, medicinalindustri, geovidenskab, fødevarevidenskab, ikke-destruktiv testning og dynamiske studier. Et særligt videnskabeligt fokus er på at kombinere flere forskellige billedmodaliteter. Derudover er imaging aktiviteterne kendetegnet ved en høj grad af samarbejde med industrien.

Gruppen har stort fokus på at udvikle metoder til røntgen og neutron baseret videnskab. Gruppen er dybt involveret i instrumentprojekter i tilknytning til ESS og MAX-IV. Eksempel på dette er udviklingen af backscattering spektrometer MIRACLES (Multi-Resolution Analyser Crystal for Life and Energy Science) til ESS. Desuden samarbejder gruppen på neutron instrumentering på PSI (CH), HZB (D), og FRM-2 (D) samt på røntgen instrumentering på MAX-II. Gruppen er medforfatter på instrumentet-simuleringspakkerne McXtrace (røntgen) og McStas (neutroner). Desuden arbejder den med software til dataanalyse og visualisering til små-vinkel spredning- samt billeddata.

Kontakt: Kell Mortensen (kell@nbi.ku.dk), Kim Lefmann (lefmann@nbi.dk), Lise Arleth (arleth@nbi.ku.dk) og Robert Feidenhansl (robert@nbi.ku.dk).

Hjemmeside: <http://xns.nbi.ku.dk/>

eScience

Gruppen arbejder i grænsefladen mellem teori og praksis, og den arbejder indenfor tre områder af computing science. De første to er hhv. modellering og simulering samt high performance computing. Det sidste område fokuserer på opsamling, opbevaring samt behandling af store mængder videnskabelig data.

Gruppen er involveret i en række aktiviteter med flere virksomheder, både store og små.

Professor Stig Skelboe fra eScience gruppen var leder af Data Management and Software Center (DMSC) for ESS i perioden oktober 2010 - oktober 2013. DMSC og ESS er i en planlægningsfase for tiden med begrænsede samarbejdsmuligheder for eScience gruppen. Når DMSC påbegynder metode- og software udvikling for de kommende instrumenter, vil der imidlertid åbne sig en række muligheder.

Flere af de kommende instrumenter vil være så meget anderledes end eksisterende, at der skal udvikles nye metoder til data reduktion og analyse. Det forventes ligeledes, at flere af de nye instrumenter vil generere betydeligt større datamængder end lignende eksisterende instrumenter.

eScience gruppens kontakt med MAX-lab har indtil videre været ret beskeden. Den formoder imidlertid, at MAX IV vil have behov, der meget ligner behovene på ESS, og at der vil blive muligheder for samarbejde. Den største udfordring kan blive at etablere et sådan samarbejde.

Kontakt: Stig Skelboe (skelboe@nbi.dk), Brian Vinter (vinter@nbi.ku.dk)

Hjemmeside: <http://www.nbi.ku.dk/Forskning/escience/>

Kemisk Institut

Uorganisk Sektion

Baseret på koordinationskemi er det muligt at opnå kontrol over det rumlige arrangement af elektronspin og over deres vekselvirkninger. Denne type af spinarkitektur muliggør design af de magnetiske egenskaber af såvel molekulære systemer som systemer med højere dimensionalitet f.eks. magnetiske kæder og gitre. Nye typer af enkelt-molekyl magneter og molekyler, der fungerer som 0-dimensionale magnetiske kølere er vigtige mål for forskningen i gruppen, men der er også fokus på aspekter af informationsbehandling vha. manipulation af spin – såkaldt "spintronics". I forbindelse med kortlæggelse og forståelsen af de elektroniske egenskaber og magnetiske strukturer af disse nye materialer, er anvendelse af neutronbaserede teknikker helt central. Fra sådanne teknikker fås information om magnetiske interaktioner (uelastisk neutronspreddning, INS) og om rumlig magnetisk strukturer (polariseret neutroddiffraktion, PND). Desuden er Røntgenbaserede teknikker såsom XMCD helt afgørende for gruppens studier af magnetiske molekyler på overflader. Gruppen anvender en lang række af de store forskningsinfrastrukturer rundt om i verden her i blandt ILL, ISS, BESSY, ESRF og FRM II.

Kontakt: Jesper Bendix, bendix@kiku.dk

Hjemmeside: www.ki.ku.dk

Biofysisk og biouorganisk sektion på Kemisk Institut

Anvendelse af Røntgenstråling og neutronkilder til opklaring og kortlægning af den rumlige opbygning for et bredt spektrum af materialer er essentiel for sektionens brede spektrum af forskningsprojekter. Takket være en bevilling fra Villum fonden i 2013 råder gruppen over to nye "state of the art" røntgendiffraktometre, som anvendes undersøgelser af faste stoffer både krystallinske og ikke krystallinske. Gruppen har ekspertise i anvendelsen af røntgensynkrotron stråling til forskellige typer af eksperimenter (diffraktion, små-vinkel spredning, spektroskopi og imaging) på biologiske og medicinske materialer. Endvidere har gruppen mere end 20 års erfaring

med at fremstille krystaller af proteiner, som er en forudsætning for at man kan få kendskab til den tredimensionale opbygning af strukturen på atomart niveau.

Gruppen har stor erfaring med undersøgelser af store biologiske molekyler og komplekser: proteiner, proteinkomplekser, protein-kulhydrat og protein-DNA komplekser. I disse indgår undersøgelser af enzymer og deres virkemåde. En del af projekterne foregår i samarbejde med danske virksomheder. Gruppen samarbejder med andre strukturbioologiske grupper i København og Danmark med hensyn til adgang til synchrotroner, bl.a. igennem programmer som Biostruct-X. Kortlægning af strukturerne af mindre molekyler og deres forskellige krystalformer er en anden vigtig del af aktiviteterne. Disse molekyler er f.eks relevante som lægemidler, indgår i agrikulturmekanismen og som fødevarer ingredienser. Samarbejdet med forskere fra Kemisk Institut, der studerer hårde materialer har endvidere givet gruppen stor viden om strukturundersøgelser af disse materialers opbygning.

Kontakt: Leila Lo Leggio, (leila@chem.ku.dk), Sine Larsen (sine@chem.ku.dk)

Hjemmeside: <http://www.ki.ku.dk/Forskning/biophysinorgchem/>

Membrane Properties

Gruppen studerer de fysiokemiske egenskaber af bionanostrukturer i bulk eller på overflader. Gruppens hovedinteresse er på nuværende tidspunkt relateret til forståelse af de vigtigste fysiokemiske egenskaber af biomembraner i relation til drug delivery, antibakteriel aktivitet samt nanotoksicitet. Gruppen benytter sig af en kombination af teknikker hver røntgen og neutron spredning hjælper med at belyse sammensætning og strukturelle detaljer der ellers vil være svære at opnå.

Kontakt: Marité Cárdenas Gómez (cardenas@nano.ku.dk)

Hjemmeside: <http://nano.ku.dk/english/research/membraneproperties/>

Kemisk Biologi og Nanobiovidenskab

Sektionen for Kemisk Biologi og Nanobiovidenskab forsker i grænseområdet mellem kemisk syntese, biologi og biofysik. Den fokuserer på at forstå biologiske samt kemiske fænomener på nano-skala og anvender disse indsigter i udviklingen af biomedicin.

Gruppen har et specielt fokus på bestemmelse af topologien af de novo designede proteiner og selvansamlingen af kemisk modificerede proteiner ved brug af små vinkel røntgen spredning, SAXS. Dette arbejde sker i samarbejde med XNS gruppen på NBI.

Kontakt: Knud Jørgen Jensen (kjj @ chem.ku.dk)

Hjemmeside: <http://www.ki.ku.dk/Forskning/bionanochem/>

NanoGeoScience

Gruppen arbejder for at opnå ny grundlæggende viden om og forståelse af vekselvirkninger mellem væsker og naturlige faste stoffer. Denne viden bruges i deres forskning, der overordnet fokuserer på 5 områder: i) undersøgelse af nanopartikler, der kan rense specifikke forureningsstoffer fra grundvandet, ii) undersøgelse af nanopartikler, som kan binde og uskadeliggøre giftige stoffer i affald, iii) at forstå de grundlæggende mekanismer, bag observationen af øget olieudvinding ved brug nye olieudvindingsteknikker samt udvikle procedure til at bestemme de petrofysiske parametre fra kridts nanoskalastruktur med henblik på at få billigere og hurtigere metoder til at evaluere potentialet i mindre olieforekomster, iv) reducere mængden af CO₂ i atmosfæren ved at binde den i stenformationer, v) biomineralisering, dvs. forstå hvordan biologiske organismer styrer dannelsen af mineraler.

Gruppen benytter sig af en række teknikker til at kortlægge nano- og mikrostrukturen af mineraler og deres overfladeegenskaber. Disse teknikker inkluderer spektroskopiske metoder som røntgen foton spektroskopi (XPS), lav- og vidvinkel røntgenspredning (fx SAXS og WAXS) og røntgentomografi (CT skanning). Herudover benyttes røntgendiffraktionsmetoder med rumlig opløsning (three-dimensional X-ray diffraction microscopy). Disse røntgenteknikker komplementeres af mere traditionelle makroskopiske laboratorie eksperimenter og teoretiske beregninger.

Kontakt: Susan L. Stipp (stipp@nano.ku.dk)

Hjemmeside: <http://nano.ku.dk/groups/nanogeo/>

Datalogisk Institut

Billedgruppen

Billedgruppen forsker i machine learning, billedanalyse, -processering, -visualisering, og geometriske fysiske simuleringer. Arbejdet baseres på anvendt matematik, statistik, numeriske beregninger, algoritmik, og til den fysiske forståelse af billedannelsen og dens støjkluder. Anvendelserne ligger indenfor astronomi, bioimaging, medicinsk billedanalyse, computer vision i forbindelse med automatisering og overvågning. Forskningen spænder fra grundvidenskabelig forskning i matematiske metoder til at karakterisere geometriske strukturer og deres statistiske egenskaber til anvendt forskning i samarbejde med industrien i bioteknologi, farmakologi, fødevarerproduktion, industriel fremstilling, energi og råstoffer. I relation til ESS og MAX-IV kan DIKU levere forskning, metoder, og software til tomografisk rekonstruktion, segmentering, geometrisk karakterisering og visualisering af 3/4D billeder.

Kontakt: Mads Nielsen (madsn@di.ku.dk) og Jon Sparring (sparring@di.ku.dk)

Hjemmeside: <http://http://www.diku.dk/forskning/Billedgruppen/>

ANDRE på SCIENCE

Statens Naturhistoriske Museum (SNM)

CryMi (Crystallography & Mineralogy) Task Force, Geobiology and Mineral Science Section under SNM

Forskningsgruppen arbejder med diffraktionsteknikker indenfor to felter. Det første omhandler mineral identifikation og kvantitativ faseanalyse med pulverdiffraktionsteknik og Rietveld refinement. Det andet felt undersøger krystalstruktur for mineraler og syntetiske uorganiske krystaller under forskellige temperatur og tryk med monokrystal Røntgen- og neutrodiffraktion.

Gruppen er ansvarlig for Røntgendiffraktionslaboratorium i Geocenter Denmark som råder over Bruker-AXS Advance 8 pulverdiffraktometer og forskellige opvarmingskamre til både pulver og monokrystalprøver samt en række Diamond Anvil Cells til højtryksundersøgelser.

Undersøgelser udføres med laboratorieteknikker samt brug af store faciliteter (synchrotroner i Grenoble og Hamburg, neutron centre i Grenoble og München) i samarbejde med forskningsgrupper fra Ørstedes og Niels Bohr Institutterne samt Universiteter i Padova, Perugia og Jülich.

Kontakt: Tonči Balic-Žunić (toncib@snm.ku.dk)

Hjemmeside: www.facebook.com/groups/GeobioMineralogy/

Centre for star and planet formation (STARPLAN) under SNM

En af centerets fokusområder er kortlægge Solsystemets dannelse vha en type meteoritter der kaldes kondritter. Kondritter består af primitiv støv og partikler der dannedes i en skive omkring Solen kort efter Solen var dannet – og længe inden planeterne dannedes. Hver partikel i disse kondritter er dannet som en selvstændig partikel i kredsløb om Solen. De fleste analyser af meteoritterne kræver selvsagt at man skærer dem i stykker – og her er det uvurderligt at have adgang til en 3D analyse af meteoritten inden man skærer. Der findes meget sjældne typer inklusioner og partikler og her er det selvsagt vigtigt at snittet lægges korrekt så vi får adgang til at studere dem – uden at skære det hele væk. Vi arbejder på at bruge en kombination af røntgen og neutroner til at lave en 3D analyse der tillader os at skelne mellem forskellige typer partikler i meteoritterne.

Kontakt: Henning Haack([hh @ snm.ku.dk](mailto:hh@snm.ku.dk))

Hjemmeside: www.starplan.net

SUND

Biostructural Research

Gruppens forskning bidrager til basal grundvidenskabelig forståelse af biologiske processer på atomart niveau. Forskningen danner grundlag for design af nye lægemiddelstoffer, som er unikt tilpasset den tredimensionelle struktur af enkelte receptorer, enzymer, transportmolekyler og andre proteiner, der er impliceret i sygdomme. Blandt gruppens eksperimentelle portfolio er metoderne røntgen krystallografi samt brugen af små vinkel røntgen spredning (SAXS).

Kontakt: Michael Gajhede (mig@sund.ku.dk)

Hjemmeside: http://drug.ku.dk/research/biostructural_research/

BioSAXS

Under Biostructural Research ligger BioSAXS gruppen, der forsker i en række proteinsystemer, med relevans i den farmaceutiske verden. Der er særligt fokus på undersøgelser af peptid og protein fibrillering. Gruppen benytter biofysiske samt strukturelle metoder til karakterisering af makromolekyler, med særlig ekspertise på brugen af småvinkel røntgen spredning (SAXS) i opløsning.

Kontakt: Bente Vestergaard (bente.vestergaard@sund.ku.dk)

Hjemmeside:

http://drug.ku.dk/research/biostructural_research/saxs_method_development_and_studies_of_fibrillation/

Pharmaceutical and Physical Chemistry Group, Institut for farmaci

Forskningen fokuserer på design og udvikling af drug delivery systemer, baseret på relevante fysiologiske *in vitro* modeller. Gruppen arbejder specifikt med lægemiddelformuleringer samt karakterisering af nanostrukturer af drug nanocarriers. Af særlig interesse er karakteriseringen af lipid drug nanocarriers samt selvansamlende nanomaterialer ved brug af en række teknikker inklusiv SAXS samt SANS. I den forbindelse benytter gruppen sig af synchrotron og neutron faciliteter.

Kontakt: Anan Yaghmur (anan.yaghmur@sund.ku.dk)

Hjemmeside: http://pharmacy.ku.dk/research/section_pharm_design/pharm_phys_chem/lipid_based_nanostruc/

Laboratoriet for Molekylær Neurofarmakologi og Genetik

Laboratoriets strukturforskning er overvejende centreret om de to transmembrane protein-klasser: G-protein koblede receptorer og natrium-koblede neurotransmitter transportere.

Endvidere er laboratoriet også strukturelt interesseret i proteinet PICK-1, der udover at binde til

ovenstående receptorer og transportere også er associeret med membraner på en endnu ikke afklaret måde. Forskningen indenfor disse proteiner fokuserer på, hvordan de grundlæggende udfører deres funktion i transmission af signal over membranen eller – for PICK-1 vedkommende – hvordan det styrer regulering og lokalisering af membranproteiner i nerveceller. Med røntgen og neutron teknikker forsøger laboratoriet at opnå atomar indsigt i hvordan proteinerne udfører deres funktion ved at transmitterer signaler fra substrater og inhibitorer fra det ekstracellulære miljø til det intracellulære. Dette gøres ved at 'låse' proteinerne i bestemte konformationer (med ligander, mutationer eller nanobodies). Proteinerne oprenses og forsøg med at opnå krystallinske betingelser udføres. Dette udføres med henblik på røntgen krystallografi. Projekterne med neurotransmitter transportere udføres i samarbejde med Poul Nissen, Aarhus universitet. Samtidig forsøger laboratoriet at opnå lav-resolution indsigt i transporterens struktur ved at rekonstituere oprenset protein i en lipidmembran på en overflade og analysere prøven med polariseret neutron reflektivitet. For PICK-1 har laboratoriet, i samarbejde med Lise Arleth fra KU NBI, opnået en lav-resolution struktur med SAXS.

Kontakt: Ulrik Gether (gether@sund.ku.dk), Claus Juul Løland (cllo@sund.ku.dk), Søren G.F. Rasmussen (sgfr@sund.ku.dk) og Kenneth Madsen (kennethma@sund.ku.dk)

Hjemmeside: <http://inf.ku.dk/english/research/labs/neuropharm/research/molneuropharm/>

Forskningsgrupper på KU der samarbejder med spidskompetencerne

For en række forskningsgrupper gælder det, at de ikke selv har kompetencerne til at udføre selve eksperimenterne. I de tilfælde indgår grupperne samarbejde med forskningsgrupper, der har disse kompetencer. Grupperne kan således ikke klassificeres som at have direkte spidskompetencer i brugen af røntgen og neutroner. Imidlertid vurderes det relevant at inkludere grupperne i denne kortlægning, for at give den bedst mulige oversigt over forskningslandskabet på KU.

Institut for Fødevarervidenskab, Sektion for Mejeri, kød og planteproduktteknologi

Sektion for Mejeri, kød og planteproduktteknologi arbejder med udgangspunkt i mejeriprodukter, mælkebaserede ingredienser og produktionsprocesser for at opnå grundlæggende viden om fysiske, kemiske, biokemiske og teknologiske processer, der påvirker og kan anvendes til at styre sensorisk og ernæringsmæssig kvalitet samt holdbarhed. I samarbejde med XNS på NBI, har gruppen benyttet røntgendiffraction samt småvinkel røntgen spredning (SAXS) til bl.a. at forstå mikrostrukturen af smør under forskellige forhold, for derved at forstå krystalliseringsadfærden i det færdige produkt.

Kontakt: Jes Knudsen (jes@food.ku.dk)

Hjemmeside: <http://food.ku.dk/english/about/sections/dairy-meat-plant/>

Institut for Plante- og Miljøvidenskab (PLEN)

Gruppens forskning dækker plante- og miljøvidenskab inklusiv analytisk kemi. Gruppen har et tæt samarbejde med den australske synkrotronkilde via samarbejde med den tidligere kollega Enzo Lombi (University of Adelaide). Gruppen benytter synkrotron-imaging til kortlægning af den multi-elementale sammensætning af kerner fra landbrugsplanter såsom ris, byg og hvede. Desuden benyttes XANES til bestemmelse af de kemiske bindingsforhold (metal speciering). Gruppen råder selv over eximer laser ablation udstyr med en resolution ned til 1 mikron koblet til ICP-MS hvorved koncentrationer i det lave ppm ($\mu\text{g/g}$) område kan bestemmes.

Kontakt: Søren Husted (shu@plen.ku.dk)

Hjemmeside: http://plen.ku.dk/english/research/plant_soil/

Signal transduction, Sektion for Transport Biologi, Institut for Plante- og Miljøvidenskab

Gruppen arbejder på at identificere komponenter af signaltransduktionsvejen, der fører til regulering af plasmamembran H^+ -pumpen. Proton pumpen er et essentielt enzym i plantecellen, nødvendig for pH homeostasis og næringsstofoptagelse.

I gruppens forskning bliver der benyttet en bred vifte af teknikker for at opnå den fulde forståelse for de processer, der finder sted i planter på det cellulære niveau. I samarbejde med XNS gruppen på NBI og projektet UNIK benytter gruppen sig af SAXS/SANS til at få strukturel information plasmamembranproteinet H^+ -ATPase indsat i nanodisc hvorved de bliver opløselige. Målet er strukturel information om membran proteinet indsat i nanodics i kompleks med regulerende proteiner.

Kontakt: Anja Thoe-Fuglsang (atf@plen.ku.dk)

Hjemmeside: http://plen.ku.dk/english/research/transport_biology/

Biomembranes, Institut for Plante- og Miljøvidenskab, Transportbiologi

Forskningsgruppen fokuserer på organisering, funktion samt regulering af cellemembranpumper. Disse proteiner er nanomaskiner der udfører en lang række essentielle cellulære funktioner, såsom transport af ioner, lipider og metabolitter imellem cellen og det ekstracellulære miljø eller mellem de cellulære rum. Detaljeret indsigt i strukturen samt hvordan membranpumperne fungerer på det molekylære niveau, bidrager til en øget forståelse af de vitale processer, der sker i celled membraner. Dette åbner muligheder for nye applikationer indenfor feltet syntetisk biologi. I samarbejde med XNS gruppen på NBI samt gruppen Membrane Properties under Nano Science Center (KU), arbejder forskningsgruppen med at udvikle procedurer og strategier til studie af

membranpumper og deres komplekser i opløsning ved brug af røntgen- og neutronsprengningsteknikker.

Kontakt: Thomas Günther-Pomorski (tgp@plen.ku.dk)

Hjemmeside: http://plen.ku.dk/english/research/transport_biology/biomembranes/ og
http://synbio.ku.dk/research/researcher_profiles/thomas_pomorski/

Spidskompetencer på Danmarks Tekniske Universitet

DTU Fysik

NEXMAP – stærkt korrelerede elektronsystemer

Den stærkt korrelerede elektrongruppe i afdeling NEXMAP på DTU Fysik gør brug af neutron- og røntgenspredning sammenkoblet med lab-baserede teknikker til undersøgelse af de magnetiske egenskaber af materialer. Især ligger fokus på indbyrdes forhold af magnetisme og funktionalitet f.eks. den afgørende rolle for magnetisme i høj-temperatursuperledere. Desuden er gruppen involveret i udviklingen af neutroninstrumentering for European Spallation Source, ESS.

Kontakt: Niels Bech Christensen (nbch@fysik.dtu.dk)

Hjemmeside: http://www.fysik.dtu.dk/english/Research/NEXMAP/Research/Correlated_electrons

Diffraktionsbaseret rekonstruktionsteknikker

Forskning i diffraktionsbaserede rekonstruktionsteknikker til Synkrotron- og Neutron faciliteter samt inden for Elektronmikroskopi. Ikke-destruktiv karakterisering af krystallinske materialer på nano- og mikrometerlængdeskala. Nogle aktiviteter er i tæt samarbejde med DTU Compute.

Kontakt: Søren Schmidt (ssch@fysik.dtu.dk)

Hjemmeside: <http://www.fysik.dtu.dk/english/Research/NEXMAP/Research/Methods/Novel-data-analysis-methods>

Neutron- og røntgeninstrument-simuleringsgruppe, NEXMAP, DTU Fysik

Neutron- og røntgeninstrumentssimuleringsgruppen fra NEXMAP-afdelingen på DTU Fysik udvikler og anvender Monte Carlo raytracing simuleringssoftware McStas og McXtrace til henholdsvis neutron- og røntgenstråling. Koden anvendes verden over af grupper fra faciliteter og universiteter til design og optimering af beamlines samt virtuelle eksperimenter og undervisning. Ved virtuelle eksperimenter genereres det virtuelle datasæt med instrument-specifik opløsnings respons på prøvens opførsel, som præcist efterligner, hvad man ville måle på det fysiske instrument. Gruppen er aktivt involveret i simulering af fremtidens ESS-instrumenter.

Kontakt: Peter Willendrup (pkwi@fysik.dtu.dk)

Hjemmeside:

<http://www.fysik.dtu.dk/english/Research/NEXMAP/Research/Methods/Instrument-Simulation-techniques>

<http://www.mcstas.org>

<http://www.mcxtrace.org>

Ultrahurtig materialefysik – Molecular Movies

Forståelse af funktionelle materialer kræver forståelse af real-time-struktur-dynamik af devices eller molekyler involveret i en kemisk reaktion. Via brug af røntgensynkrotroner og fri-elektron-lasere (XFELs), som genererer ultrakorte, ultraintense glimt af røntgenstråler, kan vi optage "snapshots" af molekyler, væsker eller krystalgitre. Ved at kombinere disse snapshots kan vi skabe en "film" af strukturændringerne.

Kontakt: Martin Meedom Nielsen (mmee@fysik.dtu.dk)

Hjemmeside: <http://www.fysik.dtu.dk/english/Research/NEXMAP/Research/Ultrafast>

DTU Kemi

Protein- og røntgenkrystallografi hos DTU kemi

Struktur-mæssig karakterisering af metalloproteiner og enzymer via brug af røntgenkrystallografi, SAXS og EXAFS. Struktur-mæssig karakterisering af materialer via brug af røntgen- og neutronpulverdiffraktion, og EXAFS.

Kontakt: Kenny Ståhl (kenny@kemi.dtu.dk) og Pernille Harris (ph@kemi.dtu.dk)

Hjemmeside:

http://www.kemi.dtu.dk/english/Research/PhysicalChemistry/Protein_og_roentgenkrystallografi

DTU Energikonvertering

Atomarskala-modellering og materialer

Vi gør brug af synkrotronstråling til in situ tidsopløste- og strukturelle studier af energimaterialer f.eks. i batterier eller til brint- og ammoniaklagring. Vi gør primært brug af diffraktion, men også XAS og XPS. Neutron pulverdiffraktion bruges til krystalstrukturløsning og kvasielastisk neutron spredning sammenkoblet med DFT-beregninger bruges til studier af dynamik.

Kontakt: Poul Norby (pnor@dtu.dk) og Tejs Vegge (teve@dtu.dk)

Hjemmeside: www.ecs.dtu.dk

Visualisering og strukturanalyse (Imaging and Structural Analysis, ISA)

Visualisering og strukturanalyse af funktionelle materialer til energiteknologier er hovedkompetencer for forståelsen af de fysiske og kemiske egenskaber af disse komplekse multifase materialer. Sammensætning, struktur, morfologi og især overflade- og grænsefladeegenskaber er i fokus. ISA anvender og udvikler avanceret visualiserings- og strukturanalyseteknikker ved brug af røntgen-, neutron-, elektron- eller ionstråling til studie af samspillet af de kemiske eller fysiske egenskaber og morfologi og struktur. Adskillige af teknikkerne kan anvendes sideløbende og in situ.

Kontakt: Luise Theil Kuhn (luku@dtu.dk)

Hjemmeside: <http://www.ecs.dtu.dk/Forskning/Faciliteter>

DTU Imaging

DTU Imaging Industriportalen

DTU industriportalen fungerer som forskningshub til industriel brug af stor-skala-faciliteter som eksempelvis MAX-IV og ESS. Det primære mål for industriportalen er at assistere virksomheder til løsning af hastesager relateret til materialeforskning ved at tilbyde ekspertviden via brug af neutroner og røntgenstråler og tilhørende dataanalyse. Industriportalen inkluderer adgang til state-of-the-art-laboratorie røntgenvisualiseringsudstyr, som tilbyder ikke-destruktiv 3D karakterisering på mikrometer- og submikrometerskala.

Kontakt: Erik Mejdal Lauridsen (emla@dtu.dk)

Hjemmeside: www.imaging.dtu.dk

DTU Compute

DTU Compute – Afdeling for billedanalyse og computergrafik (IMAGE)

Billedanalyse og computergrafik spiller to afgørende roller inden for automatiseringsprocesser og i vores hverdag. Begge er tæt linket til statistik, algoritmer, videnskabelig beregning, optik, kamera-/sensorteknologi, grafik, hardware og anvendelsesområder som f.eks. life science, medicinal visualisering, materialevidenskab, fødevarerkontrol, produktionsteknologi og geoinformatik. Denne afdeling dækker hele spektret fra grundlæggende til strategisk forskning og lægger vægt på det erhvervs-mæssige. Fokus er på at bevare en stærk metodisk forskningsbase og transformere dette til resultater inden for undervisning, rådgivning og innovation gennem anvendt forskning. Med hensyn til ESS og MAX-IV vil IMAGE levere forskning, metoder og software segmentering af mængder af billedfiler i strukturelle enkeltdele f.eks. kornstørrelse/form, grænseflader/overflader, nedsivningsveje, kurvninger/åbninger, revnebredde og - udbredelse. Desuden vil IMAGE levere rammen for billedvisualisering og simulering inkl. spredning.

Kontakt: Rasmus Larsen (rlar@dtu.dk) og Anders B. Dahl (abda@dtu.dk)

Hjemmeside: <http://www.compute.dtu.dk/forskning/Billedanalyse>

DTU Compute – Afdeling for videnskabelig beregning

Vores forskning fokuserer på matematisk modellering, differentialligninger, optimering og kontrol, inverse problemer, rekonstrueringsmetoder og høj-præstationsberegninger. Inden for visualisering og tomografi udvikler vi computermæssige algoritmer til produktion af en ny generation af rekonstruktion og metoder, som kan inkorporere mange typer af priorer for at kunne beregne de mest præcise og troværdige billeder. Arbejdet bliver støttet af en avanceret forskningstildeling fra the European Research Council.

Kontakt: Per Christian Hansen (pcha@dtu.dk)

Hjemmeside: <http://www.compute.dtu.dk/forskning/SC>

DTU Mekanik

DTU materialer og overfladeteknologi

Hoved forskningsemner for afdelingen inden for materialer og overfladeingeniørarbejde er avanceret overfladeingeniørarbejde og materialedesign, mikrostruktur udvikling og fase transformationer materialepræstation og degradering. Mikrostrukturelle forandringer i forbindelse med elektro deposition, korrosion, metal/gas vekselvirkning, deformation og træthed karakteriseres via synkrotronstråling såvel som gennem udvikling af indre spændinger.

Kontakt: Wolfgang Pantleon (pawo@dtu.dk)

Hjemmeside: <http://www.mek.dtu.dk/english/Sections/MTU>

DTU Vindenergi

Afdeling for materialevidenskab og avanceret karakterisering, DTU Vindenergi

Struktur­mæssig karakterisering og modellering af metaller, legeringer og nanometaller inklusiv overflader. Fokus ligger på forståelsen af den strukturelle udvikling ved plastisk deformation og annealing og desuden relationen mellem struktur og processering og materialeegenskaber. Eksperimentelle metoder inkluderer elektronmikroskopi (SEM, TEM, HREM med fokus på in-situ og ikke-destruktive 3D observationer), synkrotron røntgenstråling (3DXRD, 3DXRM med fokus på 4D undersøgelser), mekanisk testning, DSC, lab røntgenstråler (f.eks. tomografi).

Kontakt: Dorte Juul Jensen (doje@dtu.dk)

Hjemmeside: www.vindenergi.dtu.dk

DTU Nutech

Strålingsfysik, neutronics

Neutronics forskningen ved strålingsfysikprogrammet bidrager til design, drift og sikkerhed af nucleare installationer. Igangværende aktiviteter fokuserer på udviklingen og anvendelsen af neutrontransportmodeller til design af ESS target station og af ITER fusion reactor diagnosesystemer.

Kontakt: Bent Lauritzen (blau@dtu.dk)

Hjemmeside: <http://www.nutech.dtu.dk/Forskning/Straalingsfysik>

DTU Danchip

DTU Danchip, Det nationale center for mikro- og nanofabrikation

Silicium mikro- og nano-maskinforarbejdning, MEMS strukturer deposition og strukturering af tynde film ned til 10nm kritisk dimension. Nuværende projektportefølje inkluderer mikro-maskinforarbejdning i høj opløsning af silicium røntgenlinser og bløde røntgenzone-plader. Elektronstråling og dyb UV Stepper litografi i 1350nm ned til klasse 10 state-of-the-art renrumsfacilitet. Mulighed til strukturering og deposition af en bred vifte af materialer f.eks. metaller, dielektrika, magnetiske tynde film, sjældne naturmaterialer. Danchip er interesseret i projekter, hvor mikrostrukturering og tynde filmmaterialeforskning kan lede til nye røntgen/neutron optiske elementer og detektorer.

Kontakt: Jörg Hübner (jhub@danchip.dtu.dk)

Hjemmeside: www.danchip.dtu.dk

DTU Byg

Afdeling for bygningsmaterialer

Røntgen transmissions/attenuerings- målinger bruges til studier i forandringer i byggemateriale densitet, som resultat af vandbevægelser. Bevægelsen af vand er opgjort ved en måling af et forskelligt antal absorberede fotoner, som transmitteres gennem prøven før og efter vandbevægelsen.

Kontakt: Kurt Kielsgaard Hansen (kkh@byg.dtu.dk)

Hjemmeside: <http://www.bygmat.byg.dtu.dk/>

DTU Space

DTU Space Detektor Gruppen

DetektorGruppen ved DTU Space udvikler og tester røntgen og gammastråle detektorer til anvendelse i rummet. Gruppen udviklede røntgendektoren JEM-X til ESA's INTEGRAL mission og designede røntgen og gammastråle sensoren MXGS til ESA's ASIM mission. Gruppen er pt. ved at udvikle en ny højenergi detektor med #D positioneringsegenskaber. Denne detektor skal anvendes som sensormodul for et avanceret Compton-teleskop

Kontakt: Carl Budtz-Jørgensen (carl@space.dtu.dk) og Irfan Kuvvetli (irfan@space.dtu.dk)

Hjemmeside:

http://www.space.dtu.dk/english/Research/Instruments_Systems_Methods/Xray_Detectors

Anbefalinger til fremme af nedbrydelse af barrierer og understøttelse af muligheder

Generelt set er der tre markante udfordringer:

- Eksperimenterne er relativt tunge mht. omkostninger og arbejdstimer
- Teknologierne anvendes af relativt få forskningsgrupper i forhold til universitetsverdenen som helhed
- Anvendelse af teknologierne kræver kompetenceforøgelse hos nuværende ikke-brugere mht.:
 - Hvilke muligheder eksisterer der for eksperimenter
 - Hvordan planlægges disse (simulationer af forventet output etc)
 - Hvordan gennemføres de
 - Hvordan analyseres data

Erfaringsmæssigt er det ikke nogen let opgave at skaffe nye brugere, det kræver en vedvarende indsats over en længere periode. Det anbefales derfor at der afholdes decideret målrettede møder el. lign. former for netværksarrangementer mellem ikke-brugere og eksisterende brugere, hvor man fortæller om nye muligheder, forklarer hvad der hidtil er gjort og undersøger behovene hos potentielle kommende brugere. Det er vigtigt at understrege at sådanne møder udmunder i vedvarende kontakter og samarbejder. Dette kan være en udfordring for forskningsgrupper for hvilke der i forvejen stilles store krav om performance og budgetoptimering. Hvis en sådan indsats skal have nogen effekt må det derfor anses for nødvendigt at der fra rektorat/institutedelse "anbefales" at der som minimum skal indgås et vist antal samarbejder på tværs af grupper og institutter inden for en given tidsramme. Det ligger dog implicit i kortene at en sådan indsats kræver et ekstra skub i form af øget finansiering. Hvis det ønskes at der skabes nye brugere gennem sådanne initiativer er det derfor vigtigt at sikre tilstedeværelse af de rette strukturer for finansiering. Om de kommer fra regionerne, EU, universiteterne, ministeriet eller fra allerede eksisterende puljer der støtter samarbejde på tværs af forskningsmiljøer kan afklares fremadrettet, men det kan ikke forventes at forskningsmiljøerne kan imødekomme en så arbejdstung indsats uden at få tilført midler til formålet.

Projektet CoNEXT (Fertilizing the ground and harvesting the full potential of the new neutron and X-ray research infrastructures close to Copenhagen University) er et eksempel på hvordan Københavns Universitet prøver at imødekomme dele af ovenstående problematik. Projektet går på tværs af fakulteter og forener forskere der er erfarne brugere af storskala faciliteter med andre, der kan se et stort potentiale i faciliteterne. På nuværende tidspunkt er 31 forskere fra 5 fakulteter (SUND, HUM, JURA, SOC og SCIENCE) involveret i CoNEXT. Alle er engageret i tværfakultære

samarbejdsprojekter rettet mod de store faciliteter. Det er et af målene med projektet, at alle på KU bør få kendskab til de store neutron-og røntgen-kilder og deres videnskabelige potentiale. Gruppen af de involverede forskere forventes at vokse i løbet af årene. Projektperioden løber mellem 2013 og 2016.

Det faktum at teknologierne benyttes af relativt få forskningsgrupper i forhold til universitetsverdenen som helhed, bliver understøttet af publikationen "Nordic Neutron Scattering Communities 2008 – 2013 – a bibliometric study" udformet af Kim Lefmann og Anders Bakke fra Københavns Universitet. I rapporten fremgår det, at det danske neutronspretningsmiljø kun består af 89 personer, hvoraf kun 10 af disse, kan defineres som ekspert brugere. Hvis Danmark skal høste de fordele der forventes at komme grundet den korte afstand til ESS i Lund samt at DMSC ligger i København, bør der foretages en række initiativer for at stimulere neutronspretningsvidenskaben i Danmark. Før der bliver peget på konkrete initiativer bør styrkeområder samt områder med potentiale for udvikling tages med i betragtningerne.

Styrkelse af både neutron- og røntgenspretningsmiljøerne er også vigtig, hvis ambitionen om at få flere virksomheder til at benytte sig af de komne samt de eksisterende storskala faciliteter. I mange tilfælde vil det være nødvendigt at samarbejde med universiteterne i relation til at planlægge og udføre eksperimenterne samt den efterfølgende dataanalyse.