

ESS Fyrtårnsmiljø: Hårde materialer i 3D (SOLID)

Fyrtårnet har følgende *partnere*:

DTU Fysik: Henning Friis Poulsen, Søren Schmidt, Susan Stipp, Hugh Simons, Kurt Clausen

DTU Compute: Anders Bjorholm Dahl, Per Christian Hansen

DTU Energi: Luise Theil Kuhn, Jens Wenzel Andreasen, Peter Stanley Jørgensen

DTU Mekanik: Marcel Somers, Grethe Winther

Olie-og-gas DTU: Henning Osholm Sørensen

KU NBI: Joachim Mathiesen

KU Biologi: Matthew Collins

KU Retsmedicin: Niels Lynnerup, Chiara Villa

AU Kemi/i-NANO: Henrik Birkedal

AU Biomedicin: Jesper Skovhus Thomsen

SDU Mads Clausen: Horst-Günter Rubahn

SDU Kemi: Shuang Ma Andersen

RUC INM: Kristine Niss, Jeppe Dyre

AAU Kemi: Morten Mattrup Smedskjær, Yuanzheng Yue

DTI: Nikolaj Zangenberg

ESS: Jonathan Taylor

NWU (USA): Peter W. Voorhees

KTH (S): John Ågren

Derudover har SOLID som *associerede partnere*: Kim Lau Nielsen, Christian Niordson, Jesper Hattel Wolfgang Pantleon (DTU Mekanik), Ellen-Margrethe Hauge, Bente Langdahl, Lars Rejnmark (Aarhus Universitetshospital), Tim Dyrby (Hvidovre Hospital), Dorthe Ravnsbæk (SDU Kemi) og Jon Sporning (DIKU).

Der er vedlagt støttebreve fra Rockwool, Grundfos, Vestas, Danfoss, JJ X-ray og Xnovo Technology, samt PSI og IFD.



Billedet af Hirtshals fyrtårn illustrerer fyrtårnsmiljøet: Selve fyrtårnet har som et grundforskningscenter fokus på stor videnskabelig højde og synlighed inden for materiale- og sundhedsforskning. De omkringliggende bygninger huser infrastrukturer og fremmer vekselvirkningen med det øvrige samfund. Sammen udgør de fyrtårnsmiljøet SOLID. SOLID vil benytte Hirtshals fyrtårn som kursuscenter.

Projektbeskrivelse for ESS Fyrtårnsmiljø: Hårde materialer i 3D (SOLID)

Fyrtårnet SOLID har som vision at *udføre banebrydende forskning inden for neutron og synkrotronbaseret 3D imaging af hårde materialer og derigennem blive verdensførende inden for materialeforskning*. Derved udnyttes de nye neutron- og Røntgenkilder til at understøtte Danmarks muligheder for at løse globale udfordringer og positionere sig i den stærke internationale konkurrencebetonede vidensøkonomi.

En række forhold understøtter at SOLID virkelig vil blive et fyrtårn:

- Dansk materialeforskning har mere end et dusin ledende grupper. SOLID [samler for første gang disse til en fælles indsats](#) – og det med en meget ambitiøs dagsorden. Målet er at vi som de første kan lave visualiseringer i 3D på alle relevante længdeskalaer og knytte disse til multiskala forståelse og modellering.
- Drømmen om designe hårde materialer ved hjælp af en computer kan dermed for første gang indfries. [Danmark kan således stå i spidsen for et paradigmeskift inden for materialeforskningen](#) inden for en bred vifte af felter fra energimaterialer og metaller over knoglemedicin til arkæologi. Dette vil udgøre en forskningsmæssig bedrift og [en historisk innovationsmulighed](#).
- [Miljøet bliver effektivt det største imaging center af sin art på verdensplan](#). Det er ansvarligt for et instrument på DanMAX ved MAX-IV, et Europæisk flagskibsinitiativ på ESRF og et regionalt data analyse center. Det er dybt involveret i opbygningen af [neutron instrumenterne ODIN og BEER på ESS](#). Dette suppleres af opbygningen af en 950 m² infrastruktur på DTU, DANFIX, der sikrer en unik forankring.
- SOLID indebærer en meget væsentlig [kapacitetsopbygning på tværs af landet](#), så imaging udbredes fra få specialister til at være til nytte for en stor kreds af danske forskere og virksomheder. Der tilføres et [stærkt vækstlag](#), som fremadrettet sikrer dansk forskning inden for området.
- Danske virksomheder er stærkt integreret i arbejdet idet [35 virksomheder er tilknyttet imaging industri-portalen](#) på DTU. Inden for SOLID indgår 6 af disse samt DTU i et strategisk samarbejde.
- [Miljøet og ledelsen har viljen og evnen til at eksekvere](#) visionen. Dette fremgår af den nationale og internationale samling der har ledt til dannelsen af infrastrukturer, samfundspartnerskaber mm.

Fyrtårnet vil bidrage markant til indfrielsen af Danmarks ESS strategi ved at uddanne ~ 100 kommende neutronbrugere og fasttømre forbindelsen til ESS-DMSC. Fyrtårnet vil bidrage til den succesfulde opstart af ESS ved at definere "first science" på ODIN og BEER allerede i 2022. En start af fyrtårnet i slutningen af 2019 vil desuden være stærkt opportunt da DanMAX og DANFIX tages i brug i 2020.

Den ansøgte finansiering vil tilføje miljøet den kritiske masse, som gør at SOLID også vil kunne fungere som et generelt kompetencecenter inden for imaging, som kan løfte f.eks. digitaliseringen af den danske natur- og kulturarv og betyde at bio-imaging miljøet i Danmark tilføjes en forskningsmæssig kant ved at blive introduceret til brugen af neutron- og Røntgenmetoder.

1. Formål og hovedmålsætning

Vision og mål for fyrtårnsmiljøet

Hårde materialer udgør fundamentet for mange industrielle sektorer såsom energi, metal, off-shore, konstruktion og byggeri og er allestedsnærværende i naturen i form af f.eks. træ, knogler, jord og bjergarter. På samme måde som dyr og planter er opbygget på hierarkisk vis med celler, væv, organer etc., har langt de fleste hårde materialer en kompleks indre struktur, der strækker sig over længdeskalaer fra nanometer til centimeter. En stor forskningsmæssig udfordring handler derfor om at forstå og skræddersy materialernes indre struktur på de forskellige skalaer, idet styrke, effektivitet, levetid og pris dermed kan ændres radikalt. Dette er kernen i "materials science" som disciplin. Tilsvarende er samspillet mellem de mange længde-skalaer essentiel for forståelsen af en lang række sygdomme i knogler og tænder og for design af implantater.

Forskning i hårde materialer er derfor fuldstændig afhængig af at man kan kortlægge denne hierarkiske struktur. Siden 1960'erne har elektron mikroskopi været den dominerende teknik. Men dette er en destruktiv metode, hvilket betyder at man ikke kan følge, hvordan strukturen udvikler sig over tid indeni prøver af en repræsentativ størrelse. Imidlertid er der gennem de sidste 15 år sket en revolution, idet brugen af synkrotron-

stråling har medført, at man kan optage 3D Røntgen film af strukturudviklingen med stadig bedre rum- og tidsopløsning. Med ESS forventes neutron imaging at komme til at undergå en tilsvarende stærk udvikling. Tilsammen har de nye teknikker et kolossalt potentiale for materiale- og medicinsk forskning og for industrien. Forskerne i SOLID har været pionerer inden for området, flere nationale og regionale infrastrukturer er under opbygning ligesom en industriportal har over 30 samarbejdspartnere.

Visionen med SOLID er *at samle de danske kræfter i 3D imaging af materialer, lave banebrydende forskning i 3D imaging og dets anvendelser på hårde materialer og dermed gøre Danmark til et verdensførende kraftcenter i materialevidenskab igennem ny viden og uddannelse af fremtidens topforskere inden for feltet.* Mere konkret er målet:

- at udvikle neutron imaging som en stærk og effektiv teknik, med unikke egenskaber f.eks. til at visualisere biologisk materiale og strømning af væsker, gasser eller elektricitet indeni store emner.
- at opbygge et bredt funderet dansk forskningsmiljø, med det mål at neutron og Røntgen imaging bliver en kernekompetence blandt de mange stærke danske forskningsgrupper inden for hårde materialer. SOLID omfatter 14 forskningsgrupper på 6 danske universiteter samt 6 virksomheder. SOLID vil understøtte en kraftig kompetenceopbygning, herunder med nye undervisningsaktiviteter på bachelor til ph.d. niveau, såsom en fælles ph.d.-skole.
- at blive en regional science hub og et nationalt kompetence center indenfor 3D imaging.

Forskningen i SOLID spænder bredt fra energimaterialer over 3D print til knoglesygdomme. Der er imidlertid et bemærkelsesværdigt stort sammenfald mht. både udfordringer og potentiale, hvilket gør at materialeforskning og life science i høj grad kan samtænkes. Mere konkret vil kombinationen af de hver for sig overlegne kilder, ESS og MAX IV, for **første gang gøre det muligt at kortlægge den indre struktur af et materiale, dens tilblivelse og dens forandring under anvendelse – på alle de relevante længde- og tidsskalaer.** Dette betyder at vi kan generere og anvende en ny generation af langt mere realistiske multiskala materialemodeller. Dette ville være en fundamental "game changer", idet bedre modeller præcist er den brik, der mangler for at kunne virkeliggøre drømmen om at designe nye materialer ved hjælp af computer-modeller. En sådan tilgang vil kunne lede til en stærkt accelereret design process (og dermed kortere time-to-market) for alle de berørte videnskabelige felter og industrielle sektorer. SOLID konsortiet med den foreslåede bemanding og infrastruktur er det eneste på verdensplan, der vil kunne løfte en sådan vision inden for de næste 5 år. Tilsvarende vil en multiskala 3D beskrivelse være nøglen til forbedret forståelse af grundlæggende problemstillinger i knogle- og tand-biologi, og dermed til udvikling af nye lægemidler og diagnostiske metoder f.eks. inden for knogleskørhed.

Forskningsmiljø



SOLID er et grundforskningsfyrtårn med fokus på forskningsmæssig excellence. Som skitseret herover står det på to ben: multiskala analyse og anvendelser (materialetemaer) med det centrale mål at samle førende danske grupper i en fælles satsning. På metodesiden har en strategisk dansk satsning over de sidste 5 år skabt kimen til en unik kobling mellem neutron/Røntgen fysik og instrumentering, data analyse/Scientific Computing og 3D materiale modellering, der allerede nu er førende. Denne forskningsmæssige styrke-position vil blive udbygget, især inden for neutron området, men først og fremmest vil SOLID sigte på at bringe den samlede metodik i anvendelse inden for en bred vifte af forskningsområder, hvor Danmark i forvejen står

stærkt, for dermed at bidrage til en bredere materialeteknologisk udvikling i landet. SOLID vil især finansiere en række nye samarbejder med strategisk sigte, men omfatter også materialetemaer hvor den samlede 3D metodik allerede er etableret og fremover forventes finansieret på anden vis. Et væsentligt slutmål med SOLID er en **integration af hele miljøet** således at alle partnere efterfølgende vil være i stand til at anvende og promovere sig på hele pakken – noget som ellers ville være forbeholdt 1-2 grupper. Antallet af temaer forventes derfor også at blive øget med tiden i takt med at nye partnere inddrages og nye eksterne bevillinger kommer i hus.

Fyrtårsmiljøet omfatter en række nationale og regionale infrastrukturer, som tilsammen vil komme til at udgøre den største klynge af sin art inden for neutron og Røntgen imaging i verden:

- *ODIN og BEER instrumenterne på ESS (2022)*. Centrale forskere i SOLID er meget stærkt involveret i både science case og design af de to instrumenter, herunder definition af de første eksperimenter.
- *Instrument ved DanMAX på MAX IV (2020)*. Med ledelse og bemanning fra SOLID kredsen.
- *Beamlinie på ESRF (2020)*. Et europæisk [flagskibsprojekt](#) dedikeret til visionen bag SOLID. Beamlinien er designet af gruppen bag SOLID og SOLID sikres præferentiel måletid.
- *3D imaging centeret på DTU (2020)*. 10 Røntgen scannere, der komplementerer storskala faciliteterne. Der er p.t. en dialog med SFU om at centeret bliver en national infrastruktur, DANFIX¹
- *Imaging data analyse centeret QIM (2019)*. Et samarbejde mellem DTU, KU, LU, MAX IV og ESS med ansvar for data analysen på faciliteterne. QIM vil være samlokaliseret med SOLID og DANFIX.
- *ESS DMSC*. Neutron imaging software vil blive udviklet i tæt samarbejde med DMSC.

Disse infrastrukturer vil have en meget bred brugerskare spændende fra universitetsgrupper over hospitaler til samarbejde med museer om digitalisering af den danske natur- og kulturarv. Med koblingen til SOLID sikres en videnskabelig spydspids og en uddannelsesplatform, og der skabes en Europæisk Science Hub. Samtidig sikrer koblingen til dette omgivende miljø at SOLID får en stor berøringsflade. På modelsiden komplementeres indsatsen med to af de absolut stærkeste grupper på verdensplan, CHiMaD og HERO-M2i. Disse deler visionen bag SOLID og vil bidrage med udveksling af studerende og rekruttering.

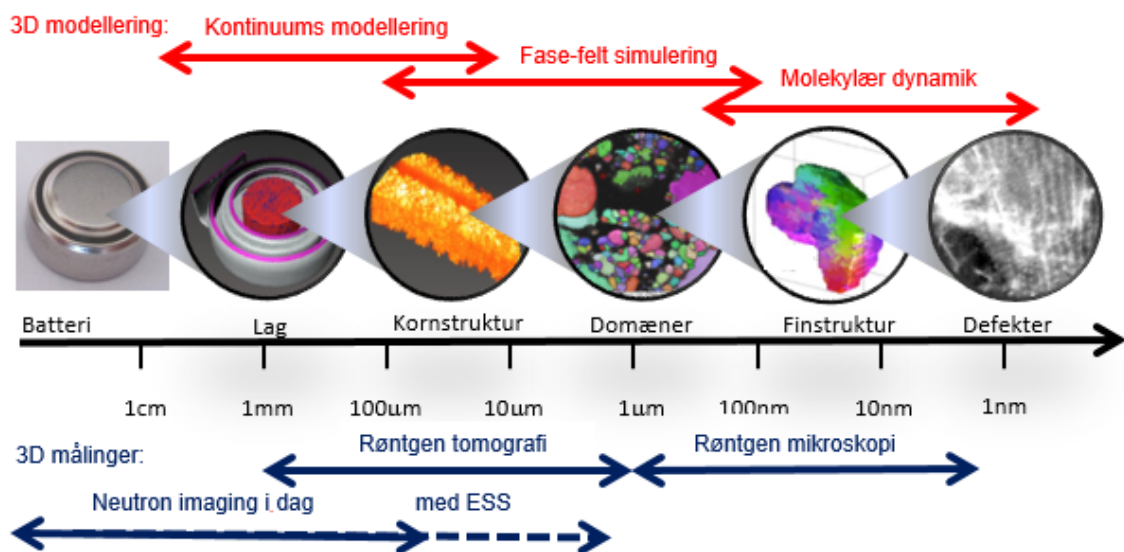
Mange virksomheder vil kunne bruge fyrtårnets multiskala tilgang til at forstå materialer og fremstillingsprocesser bedre, så de målrettet kan udvikle stærkere, mere effektive og miljømæssigt bedre materialer. Fyrtårnet vil gennem deltagelse i LINX, industriportalen på DTU og Teknologisk Institut (DTI) engagere virksomheder i diskussioner af de nye muligheder og igangsætte målrettede erhvervs-innovationsprojekter. Desuden oprettes en særskilt følgegruppe målrettet industriel brug af ODIN og BEER, under ledelse af DTI.

Tematisk afgrænsning, problemstillinger og forskningsspørgsmål for selve fyrtårnet

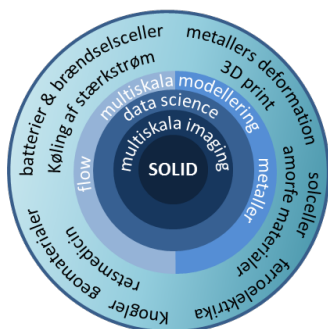
Materialevidenskab og -teknologi handler i sit væsen om at forstå relationen mellem fremstillingen og forarbejdningen af materialer og deres egenskaber, såsom styrke, ydeevne og eventuelle nedbrydning. Fremstillingsprocessen præger den indre struktur af et materiale og den indre struktur bestemmer dets egenskaber. Visualisering af strukturen er helt afgørende for at forstå de underliggende mekanismer, vekselvirkningen mellem fænomener på flere skalaer og som grundlag for opstillingen af kvantitative materiale modeller. En realistisk model af hvordan ydre påvirkninger ændrer den indre struktur under brug kan derfor bruges til at forudsige et materiales ydeevne og levetid. På den baggrund er der konsensus i materialeforskningen om at fremtiden vil være design af materialer på en computer, da dette vil være væsentligt hurtigere end den nuværende tilgang med trial-and-error. Forbedrede materialer er samtidigt centralt for løsningen af mange af de store samfundsmæssige udfordringer, vi står overfor (eksemplificeret ved FNs verdensmål).

Imidlertid er den nuværende generation af multiskala modeller typisk alt for primitive – de mangler især at kunne forudsige ændringer af strukturen under anvendelsen. Dette skyldes hovedsagligt *manglen på eksperimentelle teknikker, der ikke-destruktivt kan følge ændringerne i strukturen, i 3D og på alle relevante længdeskalaer*. Denne karakterisering er nødvendig både for at "se" hvad der sker – og dermed kunne formulere modellerne – og for efterfølgende at validere dem. Den centrale hypotese i SOLID er, at ESS og MAX IV vil kunne give unikke data, som muliggør formulering og test af en ny generation af materiale-modeller. Samtidig kobler SOLID disse tekniske fremskridt til de i forvejen stærke danske materiale miljøer, hvorved et unikt verdensførende kraftcenter opstår.

¹ Brugerkredsen omfatter 25 institutter, 4 museer, 3 hospitaler, 3 GTS institutter og ca. 35 virksomheder.



Til illustration er herover vist strukturen af et batteri. De enkelte komponenter, såsom elektroder, indeholder krystaller (korn) af diverse faser. På en finere skala optræder domæner inden i kornene og på en endnu finere skala defekter. Strukturerne på de mange skalaer kobler alle direkte til specifikke egenskaber af batteriet.



På den baggrund er det SOLID's målsætning rutinemæssigt at optage 3D film på

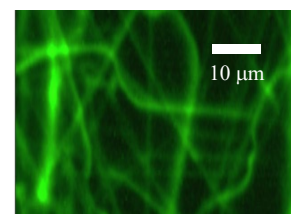
alle længdeskalaer fra 10 nm og op efter. Dette vil i sig selv være et videnskabeligt gennembrud. Imidlertid har regnekraften i de sidste år udviklet sig så hurtigt, at de store datamængder kan håndteres effektivt, og samtidigt tillader computerne nu materiale-modellering i 3D på store emner. *Fyrtårnets ambition er derfor at tage det fulde skridt: At integrere imaging metoderne, data science og modelleringen og derved muliggøre en disruptiv udvikling inden for materialeforskning og design.*

SOLID's forskning skaber gennembrud i materialetemaer (sort) baseret på en fælles unik metode platform (hvid).

I det følgende præsenteres de arbejdsplaner, som SOLID i første omgang vil arbejde med inden for hhv. anvendelse og metodebenet af fyrtårnet. Med **blåt** markeres temaer som foreslås direkte finansieret af SOLID ansøgningen. Med **sort** markeres temaer som er fuldt eksternt støttet. I parentes angives de grupper som samarbejder om temaet, med forbogstaver defineret i sektion 2, og med temalederen understreget.

Materiale og sundhedsvidenskab (materialetemaer)

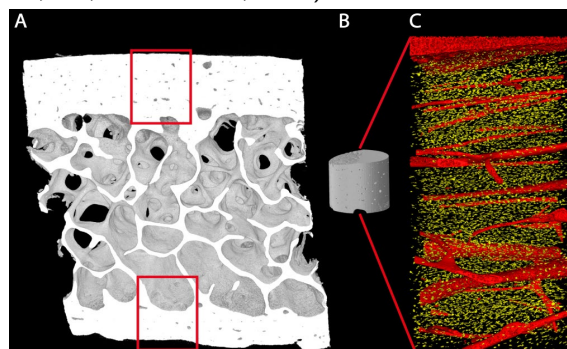
Deformation af metaller (DTU: HFP, GW, ABD; NWU: PWV) Når man deformere et metal introduceres billioner af defekter – dislokationer - som selvorganiserer i mønstre på mange længde skalaer. Ganske bemærkelsesværdigt eksisterer der ikke materiale modeller, som kan forudsige hvordan denne organisering finder sted. Alle modeller af metaller styrke er derfor fænomenologiske. Problemet er at se hvad der sker. Gruppen har bygget verdens første multiskala Røntgen mikroskop med denne problemstilling som science case. Med dette mikroskop har vi for første gang visualiseret dislokationer og deres bevægelse inden i en mm tyk prøve. Sammen med 30 års modelleringserfaring åbnes for et paradigmeskift, hvor metallurgi baseres på first principles. En sådan model af metalstyrke vil få kolossal økonomisk impact og være en spektakulær demonstration af hvordan "material design by computing" visionen kan føres ud i livet. I SOLID vil vi forberede et center-of-excellence på området. Der arbejdes også på demonstration af et tilsvarende unikt neutron mikroskop, med henblik på at foreslå et sådant som en del af den næste bølge af instrumenter for ESS.



Dislokationer (grønne linjer) visualiseret med multiskala Røntgen mikroskop i 2018.

Knogler i sundhed og arkæologi (AU: HB, JST; KU: MC, NL, CV, JM; DTU: SLSS, HOS)

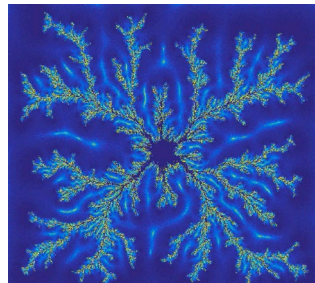
Skelettet er helt centralt for vores sundhed, men er også et spændende hierarkisk opbygget kompositmateriale. Der er stadig store huller i forståelsen af både knoglebiologi og knoglers materiale/struktur sammenhænge. Dette skyldes især manglen på multiskala imaging teknikker. Denne mangel har været en væsentlig hindring for at forstå sygdomme i bevægeapparatet, udvikle effektive behandlinger og stille diagnoser, f.eks. inden for knogleskørhed. I arkæologi er knogler endvidere af særlig interesse, da det ofte er det eneste, der er bevaret, hvorfor knogler er en potentiel kilde til et enormt og detaljeret indblik i, hvordan vore forfædre levede – hvis blot vi kan forstå, hvordan knoglerne ændres i løbet af de mellemliggende mange år i f.eks. jorden. Andre hårde biologiske væv, som skaller, perler, tænder osv. er også af stor materialemæssig og arkæologisk interesse.



Multiskala 3D rendering af en biopsi fra en hoftekam. (A) μ CT data giver overblik, mens synkrotrondata fra de røde områder (B,C) kan kortlægge knogleceller (gule punkter) og blodkar (rødt). SOLID vil lave 3D film af blodstrømme og af informationskanaler i knoglen.

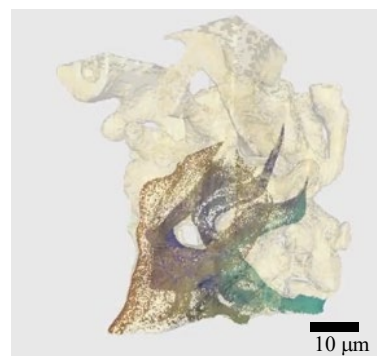
Fyrtårnets værktøjer er således direkte relevante for både medicinsk og arkæologisk forskning. Fyrtårnets forskning kan dermed danne grundlag for nye kliniske anvendelser.

Neutron imaging vil være en game changer inden for dette felt pga. de helt særlige kontrastegenskaber for billeddannelse, medens de nye muligheder i Røntgen imaging med ultrahøj opløsning kan give indsigt i vekselvirkningen mellem knogler, kroppens celler og knoglesygdomme. En central udfordring er, at knogle er et levende materiale gennemvævet af blodforsyning. Ved hjælp af neutron imaging vil væskegennemstrømningen gennem vævet kunne bestemmes, hvilket vil grundlæggende ændre vores forståelse af knogle fra et statisk skelet til det levende, dynamiske væv det i virkeligheden er. Dette har relevans for knoglens mekaniske egenskaber, men også for knogle-remodellering og for effektiv levering af lægemidler.



Flow modellering vil være et **særligt indsatsområde i SOLID**. Flow af væsker eller gasser i porøse materialer er et gennemgribende emne for næsten alle temaer. Partnerne har genereret en unik metodik som tillader en meget kompleks modellering af flow ud fra multiskala Røntgendata. Der er et stort og uopdyrket potentiale for at bruge neutroner til at lave 3D kort over topologien af porerne og film af hvordan (flerfase) væsker såsom blod, vand eller olie flyder igennem materialer. Et mål er derfor at demonstrere og anvende neutron fasekontrast målinger af flow. Dette er også af stor interesse for virksomheder og der er fremskredne planer om et spin out.

Flow i geologiske materialer (KU: JM; DTU: HOS; AU: HB) Væsker i porer og nær overflader har en altafgørende rolle i naturen, f.eks. i dannelsen og forvitringen af bjergarter, i erosion og mobilisering af aflejringer og i væskeakkumulering i grundvandsmagasiner og oliereservoirs. SOLID partnere er pionerer inden for strømningsmodeller på mikrometerskala ved hjælp af 3D Røntgen data (se figur). Der findes desuden etablerede metoder til at måle og modellere flowet på større skalaer fra centimeter til størrelsen af grundvandsmagasiner. Men vi står i det dilemma, at de makroskopiske modeller ikke kan integrere indsigten fra molekylærniveau, idet vi mangler den brobyggende forståelse mellem nano- og centimeter skala. Med SOLID ønsker vi at bygge denne bro gennem komplementær brug af neutron og Røntgen imaging. SOLID giver en helt unik mulighed for at koble længdeskalaerne og dernæst afprøve de nye modeller ved brug af fyrtårnsmiljøets testfaciliteter f.eks. i komparative eksperimenter under tryk- og temperaturforhold, som efterligner Danmarks undergrund. Forskningen i SOLID har bl.a. som mål at forbedre modeller for forureningsspredning og teste mulige scenarier for geologisk CO₂ lagring.



SOLID vil følge spredningen af forurening (farvede punkter) i porøse materialer.

Batterier og brændselsceller (DTU: LTK, SS; SDU: SMA, KU: JM) Fremtidens energisystem er dybt afhængig af nye energiteknologier. Den 3D struktur af materialerne bestemmer komponenternes effektivitet og levetid, da den kontrollerer lagring, transport og omdannelse af gas, væsker og elektricitet. Eksempler på sådanne komponenter er katalysatorer, membraner til gasrensning, brændsels- og elektrolyse-celler, solceller og batterier. For den videre teknologiske udvikling er det helt afgørende at opnå en grundvidenskabelig forståelse af den mikroskopiske sammenhæng mellem sammensætning, styrke, ydeevne, effektivitet, levetid og strømning af gas, væsker eller elektrisk strøm. Neutron imaging er unik, da store emner kan gennemlyses, såsom en hel brændselscelle eller et batteri. Man kan se de enkelte bestanddele og sågar følge strømme af vand, gasser eller endda elektricitet. Figuren viser et helt nyt neutronbillede optaget på J-PARC i Japan. Den viser et tværsnit af en battericelle under afladning (venstre: opladt, højre: afladt), og her ses tydeligt Lithium ionernes vandring ind i grafit elektroden under afladningen.



Med data fra neutron og Røntgen imaging vil vi i SOLID kunne bruge en fysisk kortlagt 3D mikrostruktur som grundlag for 3D modellering af såvel gas strømning og fordeling af elektrisk strøm som udmattelse og dermed levetid af komponenten. Dette vil skabe grundlaget for en dybere forståelse af disse systemer og dermed bane vejen for teknologiske gennembrud.

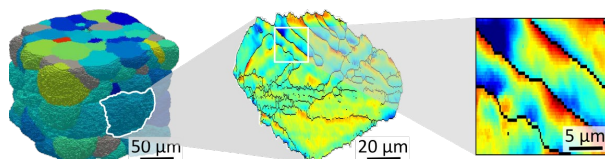
3D printning af hårde materialer (DTU: MS, GW; TI: NZ) 3D printning er en disruptiv teknologi under rivende udvikling. Den indebærer, at en komponent tegnes i en computer og efterfølgende bygges op lag for lag af et pulver, der "svejses" sammen med en laser- eller elektronstråle. 3D printning af plastmaterialer har været muligt i længere tid, mens 3D printning af hårde materialer såsom metaller og keramer stadig er på et tidligt stadie set fra et videnskabeligt synspunkt. Indtil videre har det vist sig, at materialer fremstillet med 3D print har egenskaber, som i høj grad afviger fra de materialer som er fremstillet på traditionel vis. Der er derfor brug for grundlæggende materialeforskning, således at optimering af mikrostrukturen indgår som en integreret del af fremstilling og efterfølgende bearbejdning af metaller. De virksomheder, som vil dominere det fremtidige marked, vil være dem, der kan fremstille materialer og produkter inden for reproducerbare tolerancer, med forudsigelige egenskaber, ydeevne og levetid. I SOLID vil vi opbygge 3D printere på de store faciliteter så vi direkte kan visualisere hvordan mikroskopiske huller og restspændinger opstår under fremstillingen. Dette vil blive kombineret med modeller, der spænder fra molekylær skala til makro skala, for at simulere ændringer i legerings-sammensætning under størkning, fordeling af porøsiteter og spændingsopbygning pga. inhomogen varmfordeling samt revnevækst og brudmekanik.

Amorfe materialer (RUC: KN, JD; AAU: MMS, YY; DTU: HFP) Amorfe materialer, som oxidglas og metalliske glasser, kan principielt bruges langt bredere end det gøres i dag, f.eks. til hele bygninger. Imidlertid er anvendeligheden stærkt reduceret af deres høje skrøbelighed. Der er derfor et ønske om at forstå de strukturelle ændringer, der findes sted ved brud under højt lokalt tryk. De pt anvendte metoder, såsom NMR, er begrænsede til atomar og nanoskala og er ikke i stand til at løse det centrale videnskabelige spørgsmål, da restspændinger opstår og styrke-begrænsende revner udbreder sig over længere afstande, så snart glasoverflader interagerer mekanisk med omgivelserne. For at overkomme denne alvorlige hindring samler vi i SOLID eksperter inden for kemi, mekanik og dynamik af glasser og Røntgen og neutron imaging. Med data fra ESS og MAX IV vil vi i SOLID kunne karakterisere deformations-mekanismer på alle relevante længdeskalaer og kortlægge den komplette tøjningstensor med høj opløsning. Dette vil føre til forbedrede modeller for deformation af amorfe materialer og dermed muliggøre et gennembrud i bottom-up designet af nye kemiske sammensætninger, der tillader plastisk deformation uden brud.

Køling af stærkstrøms elektronik (SDU: HGR; DTU: LTK, KU: JM) Modeller af varmetransport er af åbenlys interesse for design af f.eks. varmevekslere og elektronik. Behovet for stadig mere kraftfulde elektroniske systemer til strømkonvertering fordrer forskning i fundamentale spørgsmål om flow af to-fase væsker i mikro-porøse materialer. Neutron imaging er ideel til visualisering af et sådant flow på grund af den store gennemtrængning og den gode kontrast mht. væsker – men hidtil har dette potentiale langt fra været udnyttet. SOLID samler alle de relevante eksperter, der muliggør et gennembrud. Komplementære målinger med høj-opløselig Helium ion mikroskopi på SDU vil klarlægge rollen af strukturen mellem pore og overflader i relation

til fase nukleering og fase separation. Køling er en kerne aktivitet i det nyåbnede Centre for Industrial Electronics ved SDU. Dette tema vil involvere et tæt samarbejde med Danfoss A/S.

Ferroelektrika (DTU: HS, HFP, GW) spiller en essentiel rolle i mange højteknologiske produkter såsom kondensatorer i mobil telefoner. Behovet for mindre og mere effektive enheder kræver, at materialerne *designes* med skræddersyet funktionalitet. Dette besværliggøres af en kompleks og ofte ødelæggende effekt fra materiale defekter på mange længde skalaer. Med Røntgen mikroskopi kan vi zoom ind i disse materialer og se defekter direkte, jf. figuren. Dette åbner døren for at benytte defekt konfigurationer som et design element i stedet for at være en forhindring. Dette tema finansieres bl.a. via et ERC Starting grant.



Solceller (DTU: JWA, HFP) Uorganiske solceller er ofte polykrystallinske. $\text{Cu}_2\text{ZnSn}(\text{S},\text{Se})_4$ med kesterit struktur er et meget lovende bæredygtigt materiale med en høj teoretisk effektivitet, men sekundære faser og defekter nedsætter ydeevnen. De 3D metoder som er udviklet i SOLID miljøet giver en unik mulighed for at kortlægge disse og forstå deres indvirkning og kan også finde anvendelse på etablerede teknologier som polykrystallinsk silicium. Dette tema finansieres bl.a. via et ERC Consolidator grant.

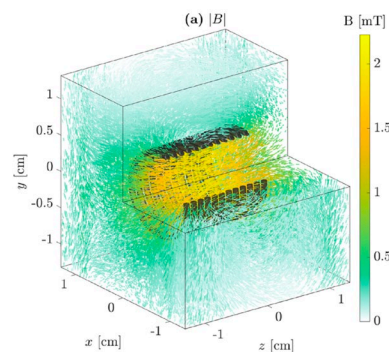
Retsmedicin (KU: NL, CV; DTU: ABD, AU: HB) Der er et stærkt match mellem SOLIDs målsætning/ metoder og visionen for fremtidens retsmedicin. Ved at kunne zoom ind på tænder og kranier forbedres forståelsen af hvordan biomekaniske egenskaber ændres dels med alder, køn, livstilsfaktorer og medicin-brug og dels med traumer og læsioner. Koblingen til 3D biomekaniske modeller er essentiel for estimering af kraftpåvirkninger. Samtidig udgør Antropologisk Laboratoriums skeletsamling på ca. 25.000 individer et næsten udtømmeligt palæoantropologisk skatkammer, med kobling til forskningen i temaet "knogler".

Multiskala analyse

Multiskala imaging (DTU: SS, LTK, HFP, HS, HOS; AU: HB)

Røntgen imaging har undergået en revolution over de sidste 15 år takket være brugen af stadig mere kraftfulde synkrotroner, og er i dag en drivende kraft for materialeforskning. Inden for hårde materialer har SOLID partnerne været pionerer. I grundforskningscenteret M4D udviklede forslagsstillerne således i 2000-2010 metoder til at visualisere tusinder af korn i 3D med en opløsning på 2 μm (3DXRD). Efterfølgende er der i et ERC Advanced Grant udviklet metoder til at zoom yderligere ind i prøven for at visualisere domæner i 3D med en opløsning på ned til 10 nm ([Røntgen mikroskopi](#)). Desuden er metoder til 3D kortlægning af nanokrystallinske materialer (3D-XCT) blevet væsentligt forbedret. De 3D film, der optages, kan sammenlignes punkt for punkt med materialesimuleringer. Metoderne er hidtil først blevet implementeret som beamlinier på verdens nok bedste Røntgenkilde, ESRF i Grenoble, hvorefter de er kopieret af andre synkrotroner. Typisk har vi 5 års forspring, inden metoderne overgår til almen brug.

På neutronsiden har forskerne i SOLID helt nye målemetoder på tegnebrættet. Gennem et langsigtet strategisk forskningssamarbejde med J-PARC (den pt. mest intensive neutronkilde i verden) vil vi etablere unikke karakteringsværktøjer, der kan måle ned til få mA elektrisk strøm internt i materialer. Dette vil være banebrydende, specielt for energikomponenter, såsom kommercielle superledere og batterier der nu kan visualiseres under realistiske betingelser. Derudover vil følgende mangeartede karakteriseringsmetoder blive udforsket: A) fasekontrast imaging, som egner sig til solceller, brændselsceller baseret på lette materialer samt biologiske materialer. B) element analyse, som kan identificere kemiske sammensætninger og ændringer i f.eks. batterier eller amorfe materialer og fabrikation af materialer, såsom 3D print. C) diffraktionsbaseret imaging, hvoraf indre krystallinsk struktur, såsom faser og indre spændinger kan karakteriseres. Disse metoder vil blive implementeret på ODIN og BEER, der med ESS' langt kraftige beam vil gøre gennembrud mulige. På billedet vises et feasibility studie af en kortlægning af magnetfeltet omkring en elektrisk spole og hermed også den elektriske strøm i spolen. Dette er opnået ved brug af et unikt polariseret neutron imaging set-up i kombination med specielt udviklet dataanalyse. Imaging med neutroner udvider generelt



Nye neutron imaging metoder til 3D kortlægning af magnetfelter og elektriske strømme i materialer - demonstreret på en spole. Data fra J-PARC i Japan.

længdeskalaen opadtil og er ydermere komplementær til Røntgen teknikkerne i forhold til kontrast mekanismer.

Ved at tilknytte de eksisterende Røntgen miljøer til et neutron fyrtårn opnås – i tillæg til visionen om multiskala karakterisering – kritisk masse. Ved at anvende de nye instrumenter vi (med)udvikler til ESS, MAX IV og ESRF forventer vi at forøge intensiteten af neutron- eller Røntgen strålen på prøven med 30 til 10.000 gange i forhold til i dag². Herved kan opløsningen af billederne gøres op til 10 gange bedre. Alternativt kan man studere langt flere prøver på den samme tid. Samtidig vil den nationale infrastruktur, DANFIX, give fremragende muligheder for komplementær forskning, undervisning og innovation.

Multiskala modellering og simulering (KU: JM; DTU: HOS, GW, MS) Dansk forskning har meget stærke men hidtil adskilte modelleringsgrupper. For at kunne løfte visionen om "materials design by computing" må disse integreres og komplementære ekspertiser tilføjes på professor niveau. Denne opgave løftes primært af eksterne midler – der udgør en medfinansiering ikke medtaget i budgettet – mens SOLID giver retningslinjer for opbygningen ved at integrere den i to materiale temaer: modeller af metalstrukturer og flow af væsker. Indenfor metalstrukturer er der i 2018 ansat to nye multiskala modellerings professorer på DTU specifikt til at understøtte SOLIDs dagsorden, heriblandt GW. Videre vil to højt profilerede udenlandske miljøer inden for multiskala modellering, med stor erfaring i at kæde multidisciplinære modellerings miljøer sammen indgå som samarbejdspartnere og muligt rekrutteringsgrundlag (se listen med partnere side 12). Flow af væsker udgør et særligt indsatsområde i SOLID (se boks side 5). Her er et multiskala modellering miljø blevet etableret over de sidste 5 år via to store IFD projekter, CINEMA og P-cubed. De modeller der er etableret indenfor f.eks. to-fase flow er unikke, hvilket giver SOLID en klar forskningsmæssig kant.

Data science (DTU: ABD, SS, PCH; ESS: JT, AU; HB) Med eksisterende analyseteknikker tager data-analysen og fortolkningen ofte 100 gange længere tid end selve dataindsamlingen. Det skyldes kompleksiteten og størrelsen af data. Med de endnu større datamængder fra den næste generation af kilder, herunder ESS og MAX IV, vil den eksisterende tilgang til dataanalyse ikke kunne følge med. Tilsvarende er computerkraft også den største begrænsning i relation til 3D modellering. En tilgang, som har stort potentiale til at simplificere dataanalysen, er at bruge datadrevne end-to-end analysemetoder: en game-changer inden for mange andre felter. Fordelen er simpliciteten, idet modelparametre læres fra data, hvilket giver mindre behov design af avancerede algoritmer til specifikke problemer. Dog kræver disse metoder ret store mængder træningsdata. En anden tilgang udnytter at mange materialesystemer har stærke geometriske priors, hvilket ofte udnyttes i simulerede modeller. Målet er at undersøge, hvordan dette kobles til segmentering af volumetriske billeder, og dermed udforske kombinationen af probabilistiske segmenterings-teknikker med fysisk baserede modeller for materiale-strukturer. Kombinationen af stærke kompetencer indenfor materialesystemer, modellering og data analyse gør SOLID til et unikt miljø for denne forskning.

For at sikre at data fra de nye kilder bliver omsat til kvantitative målinger eller anvendt i 3D simuleringer, skal tilgangen til dataanalyse gentænkes. Det er netop grundlaget for QIM, som blev oprettet i 2018. Her er målet at sikre en struktureret tilgang til dataanalyse gennem software pipelines samt uddannelse og samarbejde med brugere. Denne kan umiddelbart overføres til neutron imaging, hvilket sikrer, at SOLID kan producere resultater fra dag 1. Samtidigt er SOLID forskere dybt involveret i såvel simulering som dataanalysen af nye neutron imaging modaliteter – herunder brug af polariserede neutroner. Dette vil ske i tæt samarbejde med DMSC, bl.a. i form af et SOLID ph.d. stipendium, samt en række forventede in kind bidrag.

Kapacitetsopbygning

Fyrtårnet vil bidrage til kapacitetsopbygningen inden for neutronforskning, herunder i de sidste 5 år særligt ved ESS. Samlet set vil universiteterne alene i henhold til den nationale strategi over de 10 år uddanne ca. 500 kandidater og 150 ph.d.'ere med kendskab til neutronforskning. Fordelt på DTU, AU, KU, SDU, RUC og AAU er kandidatantallet henholdsvis 150, 150, 60, 60, 30 og 50. Fyrtårnsmiljøet omkring SOLID vil stå for hovedparten af disse. Heraf anslås ~ 100 at få neutron måletid og som sådan at blive egentlige neutron brugere. Vækstlaget vil desuden blive øget ved også at inddrage undervisningen på bachelor-niveau. 3D imaging centeret vil således kunne håndtere hands-on undervisning for 40 studerende af gangen – med etableringen af DANFIX vil faciliteten blive tilgængelig for kurser fra alle universiteterne.

² I de første 5 år, hvor ODIN og BEER instrumenterne stadig er under opbygning og test, vil de fleste neutronforsøg blive udført på en række andre neutron kilder, specielt J-PARC i Japan, hvor vi har status af langsigtede strategiske brugere.

Konkret vil SOLID operere med et student *life-cycle* koncept. På kandidatniveau har DTU, KU og AU hver især allerede en række specialiserede kurser, hvori neutron og Røntgen imaging indgår. SOLID vil oprette sommeruniversitetskurser som kan tages af alle danske studerende med særligt henblik på at bidrage til kapacitetsopbygningen inden for undervisning på SDU, RUC og AAU. I dette kursus vil de studerende på både bachelor og kandidat niveau få hands-on træning ved DANFIX og ved DanMAX på MAX IV samt ved neutron faciliteter i Europa indtil ESS er operativ. På bachelor og kandidatniveau har DTU to internationalt eftertragtede uddannelser som netop omfatter aspekter af Fyrtårnets kernekompetencer og har "multiskala materiale" som rygrad.

Der vil blive etableret efteruddannelseskurser for industriens medarbejdere, således at de kan opbygge kendskab til neutron imaging metoderne. Ph.d.-uddannelsen vil i Fyrtårnsmiljøet involvere fælles kurser og internationale sommerskoler, hvor også de tilknyttede postdocs vil få udbygget deres kompetencer og netværk. Desuden vil der blive afholdt ca. 6 seminarer pr. år, dels for alle SOLIDs partnere, dels annonceret åbent for alle interesserede forskere.

SOLID vil udnytte synergien med en række aktiviteter i Lund, herunder lede det aftalte dansk-svenske undervisningstiltag på DanMAX. Samarbejdet med Lunds Universitet, ESS og MAX IV er allerede meget veletableret med årlige fælles sommerkurser, fire fælles sommerskoler og gæsteforelæsnings. Videre er lederen af MAX IVs imaging aktiviteter Rajmund Mokso adjungeret professor på DTU Compute.

SOLIDs ph.d.'ere vil udgøre kernen i udbredelsen af de opnåede metoder og resultater inden for analyse, modellering og fremstilling af hårde materialer. Langt hovedparten vil blive uddannet i neutron imaging. Således vil SOLID uddanne fremtidens ledere inden for feltet i både privat og akademisk regi.

Brobygning mellem ESS, MAX IV og dansk forskning og erhvervsliv

Fyrtårnsmiljøet vil påtage sig rollen som bro mellem ESS, MAX IV og dansk forskning (for dansk erhvervsliv, se næste sektion). Centralt i samarbejdet står at

- *SOLIDs partnere har formuleret væsentlige dele af science case for ODIN og BEER og leder udviklingen af de tilhørende neutron imaging modaliteter.* Et langsigtet strategisk samarbejde er ved at blive formaliseret, der bl.a. indebærer at de danske forskere vil lave pilotforsøg under kommissioneringen. Tyngden og synligheden i etableringen af fyrtårnet SOLID er med til at støbe fundamentet for et sådant partnerskab. Andre elementer i samarbejdet vil være detektor udvikling, og prøve-omgivelser til neutron imaging i tæt samarbejde med ESS. SOLID er videre arbejdsplankeleder i et EU infrastrukturprojekt, med det mål at levere dataanalysemetoder til BEER og ODIN, jf. støttebreve. Projektet finansierer 4 delte postdocs. På sigt vil der også være gode muligheder for at integrere de udviklede metoder på det dansk ledede Heimdal instrument.
- *SOLID partnere bygger imaging instrumentet på DanMAX, MAX IV.* Brugerskaren og designet af instrumentet er i høj grad bygget op omkring de videnskabelige cases som er nævnt ovenfor.
- *ESS DMSC er partner i SOLID – og såvel ESS som MAX IV er partnere i QIM.*

Det resulterende tætte samarbejde vil give optimale muligheder for at inddrage især yngre forskere i miljøet. Specielt vil SOLID [uddanne to junior scientists med relation til hhv. ODIN/BEER³ og DanMAX](#). Ambitionen er at disse efter en 4-5 årig ansættelse i SOLID kan medvirke til at sikre at den danske førerposition mht. instrumentering kan fastholdes i endnu en generation. Derudover vil SOLID, ESS og MAX IV søge at udnytte positionen som en science hub i fælles ansøgninger. Dette har hidtil ledet til et bevilget ITN netværk ledet af DTU samt to store ansøgninger til EU.

SOLID har også som mål at være [et dansk kompetencecenter for neutron og Røntgen imaging generelt](#). Miljøet har reelt allerede arbejdet på dette i adskillige år, hvilket fremgår af de fremskredne planer for infrastrukturer, opremset på side 3. En særlig indsats fokuserer på - sammen med Statens Naturhistoriske Museum, Nationalmusset og Statens Museum for Kunst – at forberede en massiv 3D digitalisering af den danske kultur- og natur-arv. Der er også etableret en kontakt med de eksisterende bio-imaging miljøer på bl.a. KU, SDU, DTU, Hvidovre Hospital, Rigshospitalet og Carlsberg Laboratories, hvilket har ledt til fælles forsknings projekter, patentansøgninger og diverse workshops. Tilsvarende er brugen af synkrotroner ved at blive integreret på Skejby og Hvidovre Hospital. Der er tydeligvis en stærk synergi mellem de hårde og biologisk materialer mht. metoder og behovet for multiskala karakterisering. [En finansiering af SOLID vil være afgørende](#)

³ Kun en 2 årig postdoc periode finansieres direkte af SOLID. Resten er medfinansiering.

for at disse tværdisciplinære aktiviteter kan videreføres. Pengene er ganske vist øremærket til forskning i hårde materialer, men SOLID giver kritisk masse og organisation til udbredelse af metoderne til en langt bredere vifte af felter, hvilket kraftigt øger SOLIDs indflydelse på dansk forskning.

Erhvervsmæssig relevans og muligheder

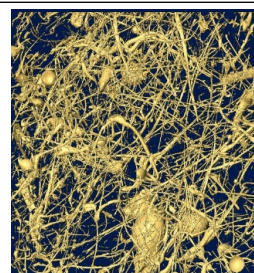
Materialeforskning er grundlaget for en meget væsentlig del af dansk industri. Blandt de relevante sektorer beskæftiger produktion, off-shore, energi, metal og miljø alene over 150.000 personer i Danmark. Hertil kommer dele af medico området. De F&U-aktive virksomheder i disse sektorer er imidlertid udfordret af et ekstremt pres på at kunne udvikle målrettet og hurtigt i den globale konkurrence. Computermodellering af fremstillingsprocesser og materialeegenskaber er ved at udvikle sig til et stærkt værktøj til at nedbringe udviklingstiden ved at minimere trial-and-error tilgange. En stor barriere er dog den manglende evne til at koble a) den mikroskopiske opbygning og forståelse af materialerne, b) de makroskopiske materiale-egenskaber og c) forudsigelserne fra computermodellerne. SOLIDs vision og metoder giver her en helt unik tilgang til at etablere netop denne kobling.

Konkret forventer vi at Fyrtårnsmiljøet på *den korte bane* vil få følgende afledte effekter:

- **Rekruttering og uddannelse.** Danske virksomheder meddeler, at de i høj grad har et problem med rekruttering af materiale- og modelleringsingeniører⁴. Fyrtårnets yngre forskere og den direkte kontakt til virksomhederne i industriportalen vil udgøre et frugtbart rekrutterings-potentiale.
- **Imaging industriportal.** Portalen har siden starten i 2014 løst opgaver for 35 meget forskellige virksomheder. SOLID vil give en akademisk forankring, som gør, at kontakten til virksomhederne nemmere kan adressere mere generelle materialespørgsmål, der opstår på baggrund af målingerne. Erfaringerne fra LINX er, at dette er vigtigt for at høste det fulde innovationspotentiale.
- **Industrivekselvirkning med ESS.** Med afsæt i SOLID vil der blive etableret udviklingssamarbejder med både små og store danske og udenlandske virksomheder. F.eks. er neutroner ideelle prober til rest-spændingsanalyse, som er kommercielt interessant for DTI og deres kunder. Det forventes at 10 erhvervs-ph.d. eller -postdoc projekter vil blive igangsat med afsæt i aktiviteter fra SOLID i perioden 2020-24. Videre vil DTI lede en industrifølgegruppe målrettet anvendelser af ODIN og BEER, hvor danske virksomheder mødes 2 gange årligt for at diskutere deres anvendelses-perspektiver og give input og specifikationer til f.eks. testmiljøer og emnehåndtering.

På mellemlangt sigt er målet at introducere "Materials design by computing" tankegangen til dansk industri, hvilket vil indlede en ny æra af udvikling og konkurrencedygtighed i Danmark. De involverede institutter i fyrtårnsmiljøet har stærke forbindelser til danske og internationale virksomheder. De har endvidere en stærk tradition indenfor innovative materialeløsninger og har tilsammen genereret over 50 spin-out virksomheder. Samtidigt er en dansk Røntgen og neutron industri ved at opstå i disse år. [Xnovo Technology](#), kommercialiserer den Røntgen teknologi, som grundlægges i forskningsregi, ekspanderer på femte år.

Eksempel på industriel anvendelse: ROCKWOOL producerer isoleringsmateriale ved at smelte sten. Når firmaet optimerer sin produktion, kan det resultere i mikroskopiske ændringer i fiberstrukturen i produktet som leder til ændringer i de makroskopiske egenskaber. Imaging kan generere meget detaljerede 3D kort af fibrene i stenulden i produktet (billedet). Baseret på sådanne kort kan firmaet sikre at ændringerne har en positiv effekt på produktets egenskaber samt lave nøjagtige simuleringer af varme- lyd- og brand-isoleringsegenskaberne af deres produkt. Målet er, at sådanne simuleringer kan erstatte de eksperimentelle test og dermed reducere udgifterne og muliggøre en kortere vej til markedet.



Tiltrækning af udenlandske studerende og forskere

SOLID vil have fokus på tiltrækning og indlejring af internationale studerende, postdocs og professorer. Specielt vil vi arbejde på at **tiltrække 2 internationale topforsker fra USA, herunder en finansieret via et DNRF Niels Bohr professorat**, ligesom MC. Antallet af udenlandske gæster vil imidlertid være langt større. Infrastrukturen vil alle have internationale brugere, QIM alene 25 personer om året, der naturligt vil vekselvirke med SOLID. Derudover er det vores erfaring at større grupper på udenlandske universiteter gerne vil udstationere yngre forskere for at blive oplært i de nye multiskala metoder.

⁴ Et white paper i UK estimerede et behov for 4000 nye Røntgen imaging specialister i de kommende 10 år.

2. Etablering og organisering af fyrtårnsmiljøet

Organisation af fyrtårnsmiljøet

Danmark har mange internationalt ledende grupper indenfor "materials science", men indsatsen er kun løst organiseret. Der eksisterer således intet selvstændigt Materials Science institut. Etableringen af et tværgående og samlende fyrtårnsmiljø, med en tilstrækkelig ambitiøs finansiering, er således kritisk nødvendig for at kunne indløse det potentiale som ESS og MAX IV tilbyder. Omvendt vil etableringen af SOLID utvivlsomt virke som en katalysator for et bredere samarbejde. Det er i den forbindelse bemærkelsesværdigt at SOLID ikke bare samler materialegrupperne på tværs af natur/teknik og sundhedsfakulteter om introduktion af ny teknik men også om fælles vision for hvor forskningen overordnet skal bevæge sig hen: mod en multiskala 3D forståelse.

Lederen af SOLID vil være Prof. Henning Friis Poulsen fra DTU. Han er uddannet materialeforsker, fysiker, neutronspreder fra RISØ, var leder af DNR centeret M4D og modtager af ERC bevillingen, d-TXM, der begge er en del af baggrunden for SOLID. Han har leveret flere banebrydende bidrag til imaging og er anerkendt verden over f.eks. for 3DXRD og dark field mikroskopi. Han har stor ledelseserfaring som leder af Danscatt, 3D imaging centeret og co-PI på DanMAX. Han har også erfaring med interaktion med industri og regioner som initiativ tager til LINX, leder af flere Innovationsfondsprojekter, og som co-founder og bestyrelsesmedlem i to spin-outs. *Viceleder* vil være Dr. Henrik Birkedal fra AU. Han repræsenterer bio-imaging og det stærke vækstlag i SOLID og har god ledelseserfaring (se CV).

SOLIDs referencegruppe vil bestå af Henning Friis Poulsen, Søren Schmidt, Luise Kuhn (DTU), Henrik Birkedal (AU), Joachim Mathiesen (KU), Shuang Ma Andersen (SDU), Kirstine Niss (RUC), Morten Smedskjær (AAU), Jon Taylor (ESS), Nikolaj Zangenberg (DTI) og Dorthe Lybye (Rockwool). Derudover vil lederne af DANFIX, DanMAX og QIM samt de to eksterne partnere være tilknyttet som observatører. Gruppen vil mødes 2 gange om året. SOLID vil være lokaliseret på DTU, Lyngby Campus, i tilknytning til den nye bygning til "3D imaging centeret", der indvies primo 2020. SOLID og DANFIX vil dele administration.

Der vil være gruppemøder en gang om måneden for alle partnere. Disse vil jævnligt blive holdt uden for DTU. For at styrke sammenhængskraften og uddannelsesaspektet vil alle ph.d. studerende have en medvejleder fra et andet institut og/eller universitet, ligesom udveksling af studerende/postdocs mellem grupperne vil være en prioritet. Der vil blive etableret online samarbejdsværktøjer.

SOLID vil afholde årsmøder og sommerskoler. Der vil blive holdt en konferenceseerie, der bliver et samlingspunkt for den internationale forskning inden for hårde materialer i 3D.

Som illustreret i figuren på side 2 har Fyrtårnsmiljøet ansvar for flere infrastrukturer. Fyrtårnsmiljøet vil ikke opbygge egne laboratorier, men udnytte at partnerinstitutterne har state-of-the-art

- laboratorier til syntese og forarbejdning af hårde materialer samt fremstilling af komponenter,
- udstyr til komplementær karakterisering med elektronmikroskopi, spektroskopi og overfladeanalyse,
- udstyr til karakterisering af materials mekaniske, fysiske og (elektro-)kemiske egenskaber samt udstyr til karakterisering af materials ydeevne under betingelser som afspejler påvirkninger under anvendelse. Som eksempel kan nævnes [CASMAT](#) centeret og FCH Test Center.

Med etableringen af SOLID skabes et bredt spektrum af karrieremuligheder for yngre forskere. Der vil blive uddannet aktører med meget forskellig ekspertise (materiale forskere, eksperimentallister, modellerings eksperter, computer videnskabsfolk, innovationspiloter) og erfaring med at løse materiale-problemer tværfagligt. Disse vil udgøre et glimrende rekrutteringsgrundlag for industrien og for hospitalssektoren.

Præsentation af partnere

Med 14 institutter fra 6 universiteter som partnere og ~35 virksomheder allerede involveret i industri-portalen repræsenterer SOLID materials science scenen i Danmark. Den videnskabelig tyngde understreges af at 8 af partnerne - med CV vedlagt - er eller har været PI på mindst et center-of-excellence finansieret af Grundforskningsfonden, Villum fonden, ERC Advanced eller Consolidator eller lignende. Samtidigt er der et stærkt vækstlag med flere prismodtagere.

Herunder er en summarisk præsentation af gruppelederne

	Navn	Institut	Age	h ⁵	Primær ekspertise
HFP	Prof. Henning Friis Poulsen	DTU Fysik	57	48	Røntgen imaging, metaller
SS	Seniorf. Søren Schmidt	DTU Fysik	48	29	Neutron imaging, algoritmer
SLSS	Prof. Susan L.S. Stipp	DTU Fysik		38	Biomaterialer, naturlige materialer
HS	Adjunkt Hugh Simons	DTU Fysik	32	12	Ferroelektrika, Røntgen og neutron stråling
KC	Prof. em. Kurt Clausen	DTU Fysik	67	-	Strategisk rådgivning, neutron stråling
ABD	Prof. Anders B. Dahl	DTU COMP	42	13	Data science
PCH	Prof. Per Christian Hansen	DTU COMP	61	48	Scientific Computing
LTK	Sekt.leder Luise Theil Kuhn	DTU Energi	48	20	Energimaterialer, neutron imaging
JWA	Prof. Jens W. Andreasen	DTU Energi	49	37	Solceller, Røntgen imaging
PSJ	Seniorf. Peter S. Jørgensen	DTU Energi	35	10*	Energimaterialer, billedanalyse, modellering
MS	Prof. Marcel Somers	DTU Mek.	59	43	Metalstrukturer, 3D print
GW	Prof. Grethe Winther	DTU Mek.	53	28	Metalstrukturer, modellering
HOS	Henning O. Sørensen	Olie-gas DTU	45	19	Flow i porøse materialer, eksperimentelt
JM	Joachim Mathiesen	KU NBI	42	20	Flow i porøse materialer, simulering
MC	Prof. Matthew Collins	KU Biologi		48*	Bioarkæologi
NL	Prof. Niels Lynnerup	KU Retsmed.	58	28*	Retsmedicin, arkæologi, knogler
CV	Lektor Chiara Villa	KU Retsmed.	37	10*	Retsmedicin, klinisk Røntgen, knogler
HB	Lektor Henrik Birkedal	AU Kemi	47	33	Synkrotron , bioinspirerede materialer
JST	Lektor Jesper S. Thomsen	AU Biomed.	54	38	Røntgen imaging, knogler
HGR	Prof. Horst-Günter Rubahn	SDU MCI	59	37	Nanoteknologi
SMA	Lektor Shuang M. Andersen	SDU Kemi	38	13	Brændselsceller
KN	Prof. Kristine Niss	RUC INM	44	18	Amorfe materialer, dynamik, teori
JD	Prof. Jeppe Dyre	RUC INM	62	51	Amorfe materialer, dynamik, teori
MMS	Prof. Morten M. Smedskjær	AAU Kemi	35	27	Glas kemi og glas mekanik
YY	Prof. Yuanzheng Yue	AAU Kemi	61	41	Glas kemi og glas mekanik
JT	Head of division Jon Taylor	ESS DMSC		-	Data analyse, neutronstråling
NZ	Nikolaj Zangenberg	DTI	45	11	Industrielle anvendelser, metaller
PWV	Prof. Peter W. Voorhees	NWU, USA		65	Modellering, metaller
JÅ	Prof. Jon Ågren	KTH, S		52	Modellering, metaller

Vi bemærker at der er en sund profil blandt lederne på universiteterne med 33% under 45 år⁶. Dermed understøtter SOLID styrkelsen af vækstlaget i dansk forskning og skaber grundlag for mange årtiers excellent forskning. Det er også bemærkelsesværdigt at langt hovedparten af konstellationerne i SOLID er nye: HFP har for eksempel ingen publikationer med de danske partnere uden for DTU. ESS er i dette tilfælde altså virkelig med til at samle dansk forskning – og det med en klar fælles dagsorden. Viljen og evnen til at gribe denne dagsorden fremgår af de mange imaging initiativer (infrastrukturer, samfunds-partnerskaber...) som er sat i værk over de sidste 5 år, ligesom HFP har den nødvendige ledelses erfaring.

De eksterne partnere [CHiMaD](#) og [HERO-M2i](#) på KTH er to verdensførende 3D modelleringsmiljøer, som begge med stor succes har demonstreret "materials design by computing". SOLID vil udveksle yngre forskere med disse i perioder på ½-1 år, alle medbringende finansiering fra deres hjemland. De vil også hjælpe med oprettelsen af en multiskalamodellerings gruppe i Danmark, herunder med rekrutteringen af en international topforsker.

Derudover understøttes SOLID af en række associerede partnere (CV indgår ikke i ansøgningen) der har udtrykt deres interesse i og støtte til initiativet. Disse er listet på forsiden af projektansøgningen: de repræsenterer især interesser fra hospitalerne og fra multiskala modellerings miljøet. De associerede partnere vil blive inviteret med til SOLID seminarer og workshops. Det samme vil partnerne i DANFIX, DanMAX og QIM. Det samlede fyrtårnsmiljø vil som sådan tælle over 50 VIP'er, alene i Danmark.

Opstart

Vi foreslår den **1/11 2019** som startdato. En start af fyrtårnet i 2019 er essentiel fordi:

⁵ h-faktor ifølge Google Scholar (dog *: WoS). Citationsfrekvensen i de fleste af de berørte discipliner er forholdsvis lav.

⁶ Antallet af kvinder er for opadgående: 50% i gruppen under 45 år. I SOLID vil vi målrettet arbejde for lige muligheder og en sund diversitet.

- Dansk forskning har lige nu en enestående mulighed for at blive drivere for et paradigmeskifte inden for materials science. Med ibrugtagningen af DanMAX, den nye bygning til 3D imaging centret og beamlinien på ESRF alle i 2020 vil vi være de eneste i verden, der kan vi optage 3D film på alle relevante længdeskalaer og interface disse til 3D modellering. Bevillingen af fyrtårnet SOLID er imidlertid nødvendig for at samle grupperne og sætte en klar dagsorden. Det er essentielt at rollefordelingen mellem SOLID, infrastrukturer og de associerede projekter er på plads inden infrastrukturerne tages i brug.
- Danmark bør være førende når ODIN og BEER, som nogle af de formodet første instrumenter på ESS, bliver kommissioneret i 2022. For at skabe denne ledende position, må SOLID partnere uden neutronerfaring med det samme kunne gå i gang med neutron aktiviteter.

3. Aktivitetsplan

Budget for de første 5 år

Budget for SOLIDS kerne i Mkr.	SFU	Medfin.	Ekstern (DTU)	Total	Kommentar
VIP	0	12.7	0	12.7	Partnernes egen tid
2 Junior Scientists + 4 postdocs + 15 ph.d.'er	16.7	6.5	8.9	32.1	
TAP	1.2*	1.4	0	2.6	*Sekretær
Udstyr	1.2	0	0	1.2	Neutron detektor
Drift og industri-initiativ*	4.1	3.6	0.1	7.8	*0.3 Mkr
Seminarer	1.0	0	0	1.0	
Overhead	10.6	10.6	0	21.2	
Total	34.8	34.8	9.0	78.6	

Det er essentielt at finansieringen af fyrtårnet modsvarer den tyngde og geografiske repræsentation, som er beskrevet ovenfor. For at muliggøre dette vil de 34.8 + 34.8 Mkr i støtte fra SFU og medfinansiering blive suppleret med 9.0 Mkr (uden OH) i ekstern støtte fra DTU. Det vedhæftede budget, der repræsenterer aktiviteterne i fyrtårnets **kerne**, har derfor et totalbudget på 78.6 Mkr. I budgettet, som er summeret i tabellen ovenfor, repræsenterer beløbene alle nye penge. Det fremgår at hovedparten af de bevilgede og eksterne midler vil gå til uddannelse af yngre forskere. Disse fungerer som lim i centeret, og uddannelsen af disse er essentiel for den forudsete ekspansion og for kapacitetsopbygningen mht. neutronvidenskab.

Tanken med de to Junior Scientists er at de ansættes i længerevarende postdoc stillinger med det mål at føre de stolte instrumenterings traditioner videre til næste generation. Den ene vil blive udstationeret i 4 år på DanMAX og vil fungere som et direkte kontakttled mellem grupperne i SOLID og faciliteten. Den anden vil arbejde på neutron metoder i tæt samarbejde med ODIN og BEER.

	DTU	AU	KU	SDU	RUC	AAU	ESS	DTI	Total
Mkr.	17.27	4.40	4.00	4.03	1.63	2.12	1.00	0.35	34.8

Fordelingen af de 34.8 Mkr fra SFU mellem parterne er som beskrevet ovenfor (inklusive OH). Fordelingen afspejler ønsket om at udbrede imaging bredt i den danske forskningsverden⁷. De eksterne partnere er selvfinansierede.

I fyrtårnsmiljøet vil imidlertid også indgå en række andre eksternt finansierede projekter, som anvender neutron og Røntgen imaging på hårde materialer med en multiskala dagsorden - hvoraf nogle er nævnt i sektion 1. De omtalte infrastrukturer repræsenterer en samlet investering på over 200 Mkr, alene fra dansk side, herunder bygningen af 3D imaging centeret (60 Mkr uden OH). Desuden nyder SOLID godt af eksisterende infrastrukturer til syntese og karakterisering af materialer, inklusiv SEM, TEM, diffraktion etc. med tilhørende teknisk støtte i form af TAP og AC-TAP stab på universiteterne. Denne brede understøttende kapacitet muliggør SOLIDS aktiviteter og udgør en værdifuld medfinansiering, som ikke er medtaget.

⁷ ESS har pt kun etårige bevillinger, jf. støttebrev. Hvis de mod forventning ikke kan medfinansiere dækker DTU beløbet.

Opskalering og forankring af SOLID

Efter *Etableringsfasen*: 1/11 2019 – 1/11 2024 vil SOLID have manifesteret sig som et europæisk Science Hub. Fyrtårnet vil have taget medansvar for den succesfulde opstart af ESS ved at definere en række af "first science" eksperimenterne på ODIN og BEER. Alle infrastrukturer producerer resultater og der er oprettet et integreret multiskala modelleringsmiljø i Danmark. Uddannelsen af yngre forskere bruges strategisk til at opnormere staben hos andre interessenter. Gennem SOLID er der skabt videnskabelig gennembrud på flere felter fra metoder til anvendelser af imaging.

I *Konsolideringsfasen* 1/11 2024 – 1/11 2029 vil SOLID sikre en indlejring på minimum det samme niveau som i etableringsfasen. Faktisk er det SOLID's ambition at styrke positionen som et internationalt synligt grundforskningsmiljø. Fyrtårns-miljøets organisation og de komplementære kompetencer hos partnerne gør, at mulighederne for ekstern finansiering er meget bredspektrede. Herunder DNRF, Villum, Novo-Nordisk og ERC centers-of-excellence, materiale-programmer i ud- og indland, ERC og Saupere Aude programmer for yngre forskere, og innovationsmidler. Hertil kommer at *Science Hub* begrebet får stadig mere opmærksomhed fra EU. Det bemærkes at mange af partnerne har en glimrende track record mht. bevillinger. Dette sammenholdt med finansieringslandskabet ovenfor og opbakningen fra universiteternes ledelser gør, at vi mener, at målsætningen for opskalering og forankring er realistisk.

Vi bemærker at **der alene på DTU og alene i 2018 er ansat 2 professorer, 1 seniorforsker og 1 lektor med direkte reference til – og motiveret af – SOLID** (GW, WP, HOS, HS). Vi forventer en jævn opbygning af kapacitet over hele landet svarende til mindst 5 VIP'er inden for de næste 5 år, herunder to professor. Det er videre vores ambition over de samlede 10 år at tiltrække to internationale topforskere, herunder en neutron/materiale ekspert og en til multiskala modelleringsmiljøet.

I 2024 vil den samlede forskningsmetodik (3D imaging og 3D modellering) endvidere være så moden, at den kan anvendes til mere anvendte og kommercielle aktiviteter. Der ligger som nævnt et kolossalt innovations-potentiale i at være de første til at implementere "materials design by computing" paradigmet bredt for strukturelle materialer. Som forberedelse til denne fase har SOLID som partnere de to grupper, som er indtil videre er længst fremme i USA og Europa mht. design ud fra materiale modeller. Endvidere har vi haft strategiske diskussioner med firmaet [Questek](#). Dette har som det første - og hidtil eneste – designet nye materialer fra first principle inden for visse nicheområder til bl.a. Apple.

Aktivitetsplan for SOLID's kerne for de første fem år

Aktiviteterne i SOLID er i høj grad bygget op omkring uddannelsen af yngre forskere. Heriblandt:

En junior scientist med speciale i neutronmetoder. Vedkommende vil være tilknyttet ODIN & BEER. Det videnskabelige fokus vil være på tilvejebringelse af nye målemetoder med polariserede time-of-flight neutroner til måling af 3D og 4D strømme og magnetfelter i energimaterialer.

En junior scientist ved DanMAX. DTU har kontraktmæssigt forpligtet sig til at udstationere en yngre forsker ved beamlinien når den går ind i driftsfasen i 2020. Hvis fyrtårnet bevilges vil personen understøtte SOLID's forskning og blive et naturligt kontaktpunkt. Vedkommendes forskning vil være centralt placeret i relation til SOLID's vision, herunder i relation til multiskala diffraktionsbaseret mikroskopi. (Denne post er 100% finansieret eksternt, dvs. under DTU's garanti.)

Derudover støttes 15 ph.d. og 4 to-årige postdoc forløb. Nedenfor følger en beskrivelse af de tilhørende forskningsprojekter med angivelse af vejledere:

Ph.d. 1: Visualisering af selvorganisering af dislokationer HFP, GW (DTU). Vha. multiskala Røntgen og neutron mikroskopi visualiseres, hvordan dislokationer samler sig i mønstre. Resultater sammenholdes med eksisterende stærkt modstridende modeller. Det forventes, at nye mekanismer opdages.

Ph.d. 2: Væskeflow i knogler. HB, JST (AU), JM (KU), SLSS (DTU). Væskeflow er centralt for flere knoglesygdomme og grundlæggende knoglebiologi men meget langt fra forstået. Tidsopløst neutron imaging vil kortlægge væskeflow i blodkar i hele knogler mens Røntgen nanoimaging bruges til væskeflow i knoglers cellulære netværk. Resultater sammenlignes med simuleringer.

Ph.d. 3: Knoglestruktur i arkæologi. MC (KU), HOS, SSLS (DTU), HB (AU). Nedbrydningsmekanismer af knogler i jord er ukendt land men relevante for både arkæologi og retsmedicin. Knogler, der har ligget i jord under forskellige forhold, vil blive analyseret med multiskala imaging.

Ph.d. 4: Kan osteocytter nedbryde knogle? JST, HB (AU). Osteocytter udgør >90% af knogleceller. Deres mulige evne til at nedbryde knoglevæv, osteocytisk osteolyse, er stærkt omdiskuteret. For endegyldigt at be-

eller afkræfte denne evne, undersøges knogler fra mus af forskellige musestammer, der lakterer og/eller behandles med binyrebark- eller parathydeahormon.

Ph.d. 5: To-fase flydedynamik i porøse materialer HOS (DTU), JM (KU). Flydedynamikken i 2 fase systemer er svære at bestemme, ikke mindst i porøse systemer med porestørrelser på forskellige længdeskalaer. I dette projekt vil vi undersøge sådanne systemer vha. imaging med både Røntgen og neutroner.

Ph.d. 6: Porøs elektrode grænseflade i polymer brændselscelle SMA (SDU), LTK (DTU). Strukturen af grænsefladen er afgørende for performance af brændselscellerne. *In situ* Røntgen og neutron imaging under drift af cellen er en unik løsning mht. at forstå materiale flow, reaktions- og nedbrydningsmekanismer.

Ph.D. 7: Elektriske strømmønstre i energikomponenter LTK (DTU), SMA (SDU), SS(DTU). Karakterisering med polariseret neutron imaging i 3D af elektriske strømfordelinger i energikomponenter til lagring og energy-harvesting.

Ph.d. 8: Imaging af 3D metal print MS (DTU), NZ (TI). Karakterisering af hierarkisk 3D mikrostruktur-dannelse under 3D print af titan og rustfrit stål ved *in situ* teknikker i relation til temperaturhistorik under printning. Disse aktiviteter indebærer monitorering af den komplekse temperatur fordeling (opvarmning, smeltning, størkning og varmepåvirkning), mikrostrukturkomponenter og 3D spændingsanalyse.

Ph.d. 9: Struktur i amørf materialer ved høje tryk. KN (RUC), MMS (AAU), HFP (DTU). Dette vil være et fundamentalt studie af hvordan tryk påvirker strukturen af amørf materialer på forskellige længdeskalaer. Projektet vil skabe en teoretisk forståelse med udgangspunkt i isomorf teorien som er udviklet på RUC. Dette vil danne baggrund for ph.d. projekt 10.

Ph.d. 10: Deformation og brud i oxidglas. MMS (AAU), KN (RUC), HFP (DTU). De strukturelle ændringer i forbindelse med brud af oxidglas er ikke forstået på længder udover nanoskala. Røntgen og neutron imaging teknikker vil kortlægge den komplette tøjningstensor med høj opløsning. Forskellige glaskemier undersøges for at forstå relationen mellem strukturændringer, restspændinger og revnedannelse.

Ph.D. 11: Væskedynamik i mikroporøse kølesystemer. SC (SDU), LTK (DTU). Poreoverfladen er et væsentligt element i mikroporøse materialer, men vekselvirkningen af væsker med overfladen er langt fra forstået. Projektet kombinerer unikke muligheder i tidsopløst neutron imaging med Røntgen- og He-ion mikroskopi. Derved studeres effekten af strukturen af poreoverfladen på fase-nukleering og -separation i væskesystemer, som benyttes til køling af elektronik

Ph.d. 12: Fasekontrast imaging med neutroner SS (DTU), HB (AU), LTK (DTU). Karakterisering af statiske og dynamiske væsker i materialer med time-of-flight fasekontrast neutron imaging.

Ph.d. 13: Neutron imaging ved ESS, SS (DTU), JT (ESS DMSC), LTK (DTU). Neutron imaging studier med simuleringer og tidlige imaging data fra ESS.

Ph.d. 14: Semi-supervised learning til volumetrisk segmentering ABD (DTU), NL (KU). På grund af 3D billedernes størrelse er det svært at bruge traditionelle deep learning metoder til segmentering. Vi vil undersøge og udvikle learning metoder som udnytter opdeling og multi-skalaanalyse.

Ph.d. 15: Simulering af 3D metal print MS (DTU), JÅ (KTH). Multi-fysik simulering af mikrostrukturudvikling under 3D print af titan og rustfrit stål i relation til temperaturhistorik og residuals-spændinger. Dette bygger videre på Ph.d. 8.

Postdoc 1: Modellering af selvorganisering af dislokationer GW, HFP (DTU). Baseret på visualiserings-resultater fra bl.a. ph.d. 1 formuleres og implementeres nye prædiktive modellerings-strategier for selvorganisering og dens kontrol af metallets styrke og formbarhed.

Postdoc 2: Væskestrømme på grænsen mellem kontinuum- og molekyle-skala JM (KU), HOS, SSLS (DTU). Vi vil bruge eksperimentelle data på mikroskala strømning til at udvikle elektrohydrodynamiske modeller, som effektivt og præcist bestemmer forureningsspredning ned til skalaer, hvor overfladekemi er en væsentlig kontrolparameter.

Postdoc 3: Diffraktionsbaseret imaging med neutroner SS (DTU), LTK (DTU), MS (DTU), NZ (DTI). Multilængdeskala karakterisering af krystallinske materialer med diffraktionsbaseret time-of-flight neutron imaging med anvendelse i energimaterialer, 3D print og biologiske materialer.

Postdoc 4: 3D segmentering fra appearance og simuleringer ABD (DTU), JM (NBI). Ofte er segmenteringer baseret på 3D billeddata behæftet med usikkerhed. Da nogle strukturer er fysisk mere sandsynlige, vil vi reducere denne usikkerhed ved at kombinere segmentering med fysisk simulering.