



Utredning av synkrotronljus- och frielektronlaserlandskapet utifrån den svenska forskningens behov

Utredning av synkrotronljus- och frielektronlaserlandskapet utifrån den svenska forskningens behov

Per Ahlberg, Uppsala Universitet
Gisela Brändén, Göteborgs Universitet
Anders Nilsson, Stockholms Universitet
Marianne Sommarin, Umeå Universitet

VR1916
Dnr 2018-00061
ISBN 978-91-88943-15-6

Swedish Research Council
Vetenskapsrådet
Box 1035
SE-101 38 Stockholm, Sweden

Innehållsförteckning

Förord	4
Sammanfattning	5
Summary	6
1. Introduktion	7
2. Svenskt forskningsbehov	9
2.1 Fysik, kemi och materialområdet	9
2.1.1 Framtida användning av MAX IV	9
2.1.2 PETRA III-satsningen	10
2.1.3 Nedstängningen av ESRF under dess uppgradering	10
2.1.4 FEL-experiment	11
2.2 Strukturbiologi	11
2.2.1 Uppgradering av ESRF	11
2.2.2 Framtida användning av MAX IV	12
2.2.3 FEL-experiment	13
2.3 Tomografi	14
3. MAX IV	16
3.1 Strålrören	16
3.2 Tilldelning av stråltid	17
3.2.1 Större programansökningar	17
3.2.2 BAG-ansökningar	18
3.2.3 Stråltid för testexperiment/rapid access	19
4. P21 på PETRA III	20
5. ESRF	21
5.1 Uppgraderingen och konsekvenser för svenska forskare	21
6. Frielektronlasrar (FEL)	23
6.1 EU-XFEL	23
6.2 Svensk FEL	24
7. Svenska universitet	26
7.1 Aktiviteter vid universiteten	26
7.2 Akademisk koppling till MAX IV och EU-XFEL	28
7.3 Kompetensutveckling och nya användare	28
7.4 Utbildnings- och träningsinsatser	29
8. Behov av nya strålrör och tekniker	31
9. Datahantering och teoristöd	32
10. Koppling till ESS	33

11. Rekommendation runt finansiering av SR/FEL anläggningar	34
12. BILAGOR.....	35
Bilaga 1: Frågor till Universitetsledningarna i samband med kartläggningen av synkrotron- och frielektronlaserlandskapet utifrån den svenska forskningens behov	35
Bilaga 2: Frågor till intervjuade forskare.....	36
Bilaga 3: Frågor till intervjuad personal på MAX IV	38
Bilaga 4: Terms of Reference för ”Utredning av synkrotron- och frielektronlaserlandskapet utifrån den svenska forskningens behov”	39

Förord

Vetenskapsrådet har idag stora åtaganden gällande finansieringen av synkrotroner (SR) och frielektronlaser (FEL) för produktion av röntgenljus. Engagemangen inom området drivs av den breda nyttan som denna typ av anläggningar har för svensk forskning. Via Rådet för forskningens infrastrukturer (RFI) finansieras idag fyra anläggningar inom området: Max IV (Lund), ESRF (Grenoble, Frankrike), Petra III & European XFEL (båda i Hamburg, Tyskland). Den i särklass största satsningen görs mot det nationella Max IV-laboratoriet vid Lunds universitet.

Givet de stora investeringarna som görs har RFI under 2018 beslutat att genomlys SR/FEL-området. Syftet med utredningen är att kartlägga den svenska forskningens behov inom området samt att utröna i vilken mån dagens allokering av resurser på bästa sätt möter dessa behov. En extern grupp av fyra nationella experter har anlitats bestående av Anders Nilsson (Stockholms universitet, ordförande), Gissela Brädén (Göteborgs universitet), Per Ahlberg (Uppsala universitet) och Marianne Sommarin (Umeå universitet). Resultatet av gruppens arbete presenteras i den föreliggande rapporten. Arbetet genomfördes under 2018 och rapporten presenterades för RFI i början av 2019. Efter det har den diskuterats med ett antal berörda parter inom det svenska akademiska systemet.

Rapporten ger en utmärkt översikt av området samt en rad konkreta och användbara råd och rekommendationer. Det är nu upp till RFI och andra aktörer inom infrastrukturområdet att beakta dessa i det fortsatta arbetet med att skapa så goda förutsättningar som möjligt för den forskning som nyttjar SR/FEL-källor. Å RFI:s/Vetenskapsrådets vägnar vill jag tacka utredarna för ett mycket gediget arbete.

Stockholm, maj 2019

Björn Halleröd
Huvudsekreterare, Rådet för forskningens
infrastrukturer (RFI), Vetenskapsrådet

Sammanfattning

Vi har som arbetsgrupp fått i uppdrag av Rådet för forskningens infrastrukturer (RFI) inom Vetenskapsrådet att kartlägga den svenska forskningens behov av forskningsinfrastruktur för synkrotronljus (SR) och frielektronlaser (FEL) för att ge bättre underlag till framtida beslut rörande finansiering.

Den Terms of Reference som utfärdats av RFI och som definierat och avgränsat utredningens frågeställningar är återgiven i Bilaga 4. Utredningen fokuserat på tre huvudfrågor rörande SR- och FEL-områdenas betydelse för det svenska forskningssystemet: i) tydliggöra samt rekommendera hur det svenska forskningsbehovet kan tillfredsställas, ii) utreda hur framtida svensk excellens inom områdena kan säkerställas samt iii) föreslå mekanismer för breddning av forskning och utbildning vid de svenska universiteten.

Vi ger löpande genom texten rekommendationer för hur vi anser att RFI inom Vetenskapsrådet bör prioritera framtida finansiering av SR/FEL-anläggningar och sammanfattar de viktigaste delarna i avsnitt 11.

Anders Nilsson (ordförande), Stockholms Universitet

Per Ahlberg, Uppsala Universitet

Gisela Brändén, Göteborgs Universitet

Marianne Sommarin, Umeå Universitet

Summary

The Council for Research Infrastructures (RFI) at the Swedish Research Council has tasked us as a working group to investigate the needs of Swedish research for research infrastructure for synchrotron radiation (SR) and free electron lasers (FEL) in order to provide a better basis for future funding decisions.

The Terms of Reference issued by RFI, which has defined and limited the scope of our inquiry, are included here as Appendix 4. Our work has focused on three areas concerning the relevance of the SR and FEL fields for the Swedish research system: i) clarify and recommend how Swedish research needs can be satisfied, ii) investigate how future Swedish excellence within the area can be safeguarded, and iii) suggest mechanisms for widening the research and education programmes connected to SR and FEL at Swedish higher education institutions.

Throughout the text, we give recommendations for how the RFI at the Swedish Research Council could prioritise the funding of SR/FEL facilities, and we summarise our most important findings in Section 11.

Anders Nilsson (Chair), Stockholm University

Per Ahlberg, Uppsala University

Gisela Brändén, University of Gothenburg

Marianne Sommarin, Umeå University

1. Introduktion

Idag delfinansierar Vetenskapsrådet i huvudsak fyra anläggningar inom detta område; Max IV i Lund, ESRF i Grenoble, Petra III i Hamburg samt European XFEL (EU-XFEL), också belägen i Hamburg. Den största svenska satsningen inom SR/FEL-området, och forskningsinfrastruktur i stort, är Max IV där Vetenskapsrådet som huvudfinansiär bidrar med en årlig driftsbudget på 310 MSEK. Vidare avser Vinnova, Formas och Energimyndigheten tillsammans att bidra med 25 MSEK/år, de svenska universiteten med 100 MSEK/år och KAW med 15 MSEK/år för data-lagring. Uppstarten av Max IV:s strålrörsprogram är vid tidpunkten för denna rapport försenad och endast ett fåtal strålrör är i drift för användare – flera sätts dock i drift i början av 2019. ESRF är unik i det europeiska SR-landskapet. Det är den enda källan som är gemensamt finansierad av de bidragande länderna (alla andra europeiska SR-källor är nationellt finansierade) och den används av svenska forskare¹ speciellt för hårdröntgentekniker. ESRF har stängs ned för en uppgradering av lagringsringen sedan i slutet av 2018 och planeras åter vara i drift till hösten 2020. Vetenskapsrådet är engagerat i ett forskningssamarbete med Tyskland (Röntgen Ångström Cluster) och inom ramen för det samarbetet finansierar Vetenskapsrådet ett materialvetenskapligt strålrör, P21, vid synkrotronkällan Petra III på Desy, som tagits i kommissioneringsfas under hösten 2018. Detta strålrör täcker området för extremt hård röntgen (40-150 keV) och kompletterar därigenom stålrören på Max IV vilka primärt används vid lägre energier. Genom den svenska finansieringen av P21 har svenska forskare även prioriterad tillgång till övriga instrument vid Petra III. EU-XFEL är en frielektronlaserkälla som nyligen tagits i drift och som har haft ett användarprogram under ungefär ett år. Sverige är sedan 2009 delägare i det tyska bolaget European XFEL GmbH som äger anläggningen. Sverige har bidragit med 1,53 % av konstruktionskostnaderna, vilket motsvarar ca 160 miljoner kronor samt bidrar till driftkostnaderna beroende på svensk användning.

Historiskt sett har svenska forskare varit banbrytande i utvecklingen av röntgenområdet vilket bl.a. har resulterat i två Nobelpris i fysik för utvecklingen av röntgenspektroskopi och röntgenelektronpektroskopi (Manne och Kai Siegbahn, år 1924 respektive 1981). Denna tradition har bevarats även idag och Sverige ligger i röntgenforskningens framkant, speciellt inom spektroskopiområdet men också inom röntgenspridning, proteinkristallografi och paleontologisk tomografi. För ett land av Sveriges storlek är därför användningen av SR- och FEL-källor mycket stor. Vi kan nämna att strax efter uppstarten av världens första FEL-källa inom röntgenområdet, LCLS i USA, var Sverige den tredje nationen efter USA och Tyskland med flest forskare som medsökande på stråltidsansökningar. Under de senaste åren har svenska forskare deltagit vid cirka 10 % av experimenten vid LCLS. Gamla Max-lab hade cirka 450 svenska användare under sitt sista år, 2015, varav 150 var forskningsledare (principle investigators, PI's). Den totala användningen av Max-lab, inklusive internationella användare, nådde ett maximum 2014 med cirka 1000 forskare. Denna

¹ Med svenska forskare avses alla forskare anställda vid svenska universitet, svenska forskningsinstitut, svensk industri och andra svenska organisationer oberoende av nationalitet.

siffror förväntas att öka till uppskattningsvis cirka 3000 forskare per år på grund av flera faktorer när Max IV är helt igång med alla 16 strålrören. Det är dock idag svårt att uppskatta användarsiffror de närmaste åren på grund av förseningarna i strålrörsuppbyggnaden (se avsnitt 3.1). Svenska forskare har använt 2,7 % av den totala stråltiden på ESRF under de senaste åren. Sverige har även använt Petra III flitigt med cirka 100 svenska forskare per år. Dessutom är svenska forskare aktiva vid i stort sett alla viktiga SR- och FEL-källor runt om i världen förutom de ovan nämnda; till exempel vid de europeiska anläggningarna Bessy-II, SLS, Soleil, Diamond, Alba, Elettra, Fermi och vid SSRL, ALS, LCLS, NSLS II, APS, Spring-8, Sacla, PAL, utanför Europa.

En viktig fråga är huruvida svenska forskare kommer att återvända till att använda Max IV efter Max-labs nedstängning 2015, och den försening vi sett vid uppbyggnaden av strålrören vid anläggningen. Under tiden har många forskare skapat kontakter och samarbeten med de andra synkrotronkällorna. Kommer det komma helt nya användare till Max IV som aldrig tidigare har använt synkrotronljus men ser stora möjligheter med de unika teknikerna? Hur klarar speciellt strukturbilogerna nedstängningen av ESRF och kan de överföra sin forskning till Max IV istället? Får Sverige tillräcklig forskningsutdelning av medlemskapet i EU-XFEL? Hur kan vi säkerställa att svenska forskare får tillgång till Max IV i en tuff internationell konkurrenssituation? Det är några av de mycket viktiga frågor som kommer att belysas i denna rapport, tillsammans med rekommendationer för att bättre tillfredsställa behovet av tillgång till SR- och FEL-anläggningar för svenska forskare.

Baserat på den Terms of Reference som Vetenskapsrådet utfärdat (se bilaga 4) har vi genomfört vår kartläggning genom intervjuer av forskare vid de svenska universiteterna. Vi har ställt frågor om strategisk planering vid de svenska universiteterna samt fört samtal med vetenskaplig personal vid strålrören på Max IV och ledande personer vid andra SR- och FEL-anläggningar. Frågeformulären vi använt finns bifogade som bilagor till denna rapport. Vi gav även en presentation av våra preliminära slutsatser vid Max IV:s användarmöte i september 2018 med efterföljande diskussioner i mindre grupper för att få in ytterligare synpunkter ifrån forskarsamhället.

2. Svenskt forskningsbehov

Här genomlyses en del av de tydliga forskningsbehov som kommit upp i samband med intervjuerna av svenska forskare. De tekniska behoven av SR- och FEL-tekniker skiljer sig åt för olika ämnen.

2.1 Fysik, kemi och materialområdet

2.1.1 Framtida användning av MAX IV

Röntgen- och elektronspetrotekniker för studier av fasta material, ytor, vätskor och gasfas har varit en nyckelverksamhet vid gamla Max-lab. Dessa tekniker kommer förbättras genom strålrören Veritas, Hippie, Balder vid 3-GeV-ringen på Max IV samt Flexpes, Species, Bloch och Finestbeams vid 1.5-GeV-ringen. Något som kraftigt förbättras vid Max IV jämfört med gamla Max-lab är utbudet av mikroskopitekniker, vid strålrör såsom Nanomax, Softimax och Maxpeem, vilka kraftfullt kommer att öka möjligheterna för karakterisering av material på nanometernivån. I den nya strålrörportfolion finns också Cosaxs och Formax vilka huvudsakligen är fokuserade på liten vinkelspridning av röntgenstrålning, vilket också ger information om materialet på nanometernivå men i det reciproka rummet. Det som dock tydligt saknas är strålrör för vidvinkelspridning (WAXS) både för amorfa och kristallina prover där det senare ger diffraktionsmönster av stor betydelse för materialforskning. Här kommer en viss tillgänglighet ges via Danmax som dock ger förtur till danska forskare. I det sammanhanget är det viktigt att Sverige fullt ut bygger materialdiffraktionsstrålröret vid P21 vid Petra III eftersom det finns ett stort behov inom svensk materialforskning för diffraktionskapacitet.

Rekommendation: Max IV behöver stärka möjligheterna för svenska användare inom materialvetenskap, kondenserad kemi och fysik att genomföra röntgenspridnings- och diffraktionsexperiment.

Det finns en osäkerhet hos många svenska forskare om de kommer att kunna erhålla tillräckligt mycket stråltid vid Max IV för att täcka deras forskningsbehov. Eftersom prestandan på Max IV är i toppklass kommer det bli tuff konkurrens om stråltiden; inte bara med andra forskare ifrån Sverige utan också med internationella användare. Därför har flera av dem vi intervjuat uttryckt att de avser att söka stråltid vid Max IV men också samtidigt vid flera andra internationella anläggningar och sedan genomföra experimenten där deras ansökan beviljas. Dock har flera betonat att om de kan erhålla all nödvändig stråltid vid Max IV kommer de inte att söka vid andra anläggningar. För att motivera Vetenskapsrådets investering för uppbyggnaden och driften av Max IV är det väsentligt att svenska forskare kan erhålla tillräckligt med stråltid vid Max IV. Naturligtvis är det viktigt att projekten håller hög vetenskaplig nivå men om forskare erhåller stråltid vid andra anläggningar med bra prestanda visar det likväl på hög vetenskaplig kvalitet på deras ansökningar. När det är mycket hård

konkurrens med många bra projektförslag kan det ibland vara mycket lite som avgör om en stråltidsansökan hamnar över eller under det beviljande strecket.

Rekommendation: Det är viktigt att en plan utarbetas så att svenska forskares behov av stråltid vid specifika strålrör vid Max IV kan samordnas så att de inte behöver söka tid på motsvarande strålrör vid andra anläggningar.

Idag kan forskare ansöka om att erhålla stråltid någon gång under den närmaste 6-9 månadersperioden vid Max IV. Dock efterfrågar många forskare att kunna planera experiment över en längre tidsperiod. Detta är speciellt viktigt för att bygga upp unika provmiljöer t.ex. för in-situ studier inom gränsskiktsvetenskap, studier av magnetiska och ferroelektriska material men också för att skapa jonkällor för experiment inom atomfysik. Dessutom kan en längre planeringshorisont vara väsentlig för att doktorander ska kunna planera sin forskarutbildning ur ett längre perspektiv. Liknande behov kan också föreligga för forskningsledare vilka behöver planera experiment inom ramen för bidrag från forskningsfinansiärer som Vetenskapsrådet, ERC, SSF och KAW för att nämna några.

Rekommendation: Det är önskvärt att Max IV erbjuder möjligheter till programansökningar för specifika strålrör med stråltider som erhålles under en period som sträcker sig över 2-3 år (se även punkt 3.2).

2.1.2 PETRA III-satsningen

Det finns potentiellt många användare av strålröret P21 vid Petra III i det svenska forskarsamhället. Informationsinsatser har gjorts för att öka kunskapen om strålrörets kapacitet och planerade tidslinjer för driftsättning, till exempel genom information vid Max IV:s användarmöte och på Petra III:s webbplats. Strålröret är trots detta tämligen okänt bland många av de svenska potentiella användarna.

Rekommendation: Eftersom många som funderar på SR-experiment i Sverige noga tittar på strålrörskapaciteten som redovisas på Max IV:s hemsida vore det bra om det där också finns information om samt en länk till Petra III:s information om P21. Det bör också ske en koordinering mellan personal vid P21 och Max IV inom diffractionsområdet. Om det i framtiden byggs ett diffraktionsstrålrör för materialområdet vid Max IV bör de båda anläggningarna samarbeta och uppmuntra användare att använda båda strålrören.

2.1.3 Nedstängningen av ESRF under dess uppgradering

Det finns behov av ny hemvist för de forskargrupper som idag genomför eller planerar experiment vid ESRF med oelastisk hårdröntgenspridning inom material/kondenserad fysikområdena. Eftersom ESRF stänger ned kommer denna verksamhet inte vara möjlig under en tvåårsperiod. Samtidigt bygger Max IV upp kapacitet för oelastisk röntgenspridning inom mjukröntgenområdet vid strålröret Veritas, däremot saknas idag möjligheter för oelastisk hårdröntgenspridning som passar den kondenserade fysikens material.

Rekommendation: Strålröret Balder på Max IV skulle passa bra för oelastisk hård-röntgenspridning och bör också utveckla provuppställningar som passar den kondenserade fysikens material. Det kan också vara bra att koordinera verksamheterna på Balder och Veritas så att användare enkelt kan göra experiment inom båda energiområdena om så önskas. Om kapaciteten på Balder inte räcker till bör man överväga att ge hög prioritet vid framtida planering av nya strålrör på 3-GeV-ringen till ett undulatorstrålrör optimerat för oelastisk hårdröntgenspridning i området 5-15 keV.

2.1.4 FEL-experiment

EU-XFEL kommer att signifikant öka den möjliga användningen av ultrasnabba röntgentekniker, eftersom det finns 3 undulatorer vid EU-XFEL som kan köras parallellt. Det ger en trefaldig ökning av den kapacitet som tidigare funnits på LCLS. Frågan är dock om Femtomax vid Max IV kommer att vara konkurrenskraftigt när dess intensitet är många storleksordningar mindre än FEL-källorna. Här är det viktigt att ett ordentligt svenskt behov som motsvarar investeringen identifieras. Det finns idag många svenska forskare som är intresserade av FEL-experiment men har haft svårt att kunna erhålla stråltid på grund av den tuffa internationella konkurrensen.

Rekommendation: Max IV bör erbjuda svenska forskare att inför experiment vid eller stråltidsansökan till EU-XFEL få möjlighet att genomföra förstudier vid Femtomax inom ultrasnabb diffraktion.

2.2 Strukturbiologi

Vid de flesta stora svenska lärosäten finns idag starka forskargrupper inom strukturbiologi för vilka tillgången till röntgenljusanläggningar är avgörande. Dessa grupper har i olika konstellationer haft tillgång till större mängd stråltid vid ESRF genom BAG-ansökningar, beskrivet nedan (Lunds universitet, Göteborgs universitet, Stockholms universitet, Karolinska institutet, Uppsala universitet och SLU). Vid senaste utlysningssomgången vid Max IV tilldelades samma forskarmiljöer samt Umeå universitet stråltid vid Biomax. Svenska strukturbiologigrupper har också varit tidiga och framgångsrika användare av FEL-anläggningen LCLS och efterföljande Sacla, PAL och senast EU-XFEL trots hård konkurrens om experimenttid.

2.2.1 Uppgradering av ESRF

Inför nedstängningen av ESRF i december 2018 har svenska forskargrupper inom strukturbiologi redan i viss utsträckning flyttat över sin verksamhet till t.ex. Diamond för att täcka upp sina behov. Det finns ingen stor oro bland forskare inom svensk strukturbiologi inför nedstängningen av ESRF utan de flesta räknar med att täcka sina behov vid Diamond, Petra III och Max IV. Det finns en uttalad förhoppning om att kunna överföra stora delar av experimenten till Biomax. Detta är dock helt beroende av det finns en välfungerande datahantering och experimentuppställning inklusive en robot för att byta prover.

ESRF:s uppgraderingsprogram ESRF-EBS är av stort intresse för svenska strukturbiologer, inklusive uppgraderingen av strålröret ID29 som kommer vara dedikerat för seriell kristallografi. ESRF-EBS beskrivs utförligare under punkt 5.1 nedan.

Rekommendation: *Det är viktigt med en prioritering av funktionaliteten vid Biomax för att kunna täcka det behov som följer av ESRF:s nedstängning. Det är nödvändigt att det finns tillräckligt stor tillgång av stråltid så att man kan tillgodose det svenska behovet av standardiserade proteinkristallografiexperiment.*

2.2.2 Framtida användning av MAX IV

Det finns ett stort intresse och stöd för Max IV inom svensk strukturbiologi och en förhoppning om att Max IV kommer spela en viktig roll för framtida svensk forskning inom området. De strålrör som är intressanta för svenska strukturbiologer är främst Biomax (öppen för användare sedan 2017) och Micromax (beräknas vara tillgänglig för användare under 2022). Biomax är ett *state-of-the-art* strålrör som är avsett för röntgendiffraktionsexperiment av makromolekyler med mål att tillhandahålla en pålitlig experimentuppställning med hög automatisering. Micromax är ett strålrör som nu befinner sig i designfas och vars finansiering säkrades från NovoNordisk Foundation under 2018. Micromax kommer vara designad för speciellt utmanande proteinprover och tidsupplösta röntgendiffraktionsexperiment av makromolekyler i form av seriell kristallografi. Till skillnad från Biomax kommer Micromax tillhandahålla olika typer av provmiljöer och erbjuda större flexibilitet i utformningen av experiment.

Förutom dessa två proteinkristallografi-strålrör finns även stort intresse bland svenska strukturbiologer för att studera proteinstrukturer genom röntgenspridningsexperiment vid Cosaxs. Enligt den nuvarande planen ska Cosaxs börja ta emot användare 2020. Det finns även intresse bland delar av forskarsamhället för att använda röntgenspektroskopi vid Balder (tillgänglig för användare under 2019) för att studera proteiner med metallcenter och länka dessa spektroskopiska data till röntgendiffraktionsexperiment på samma proteiner. Vid LCLS finns möjligheten att samla tidsupplöst röntgenspektroskopidata simultant med diffraktionsdata och en sådan experimentuppställning planeras även vid EU-XFEL. I det sammanhanget kan det vara intressant med förberedande experiment vid Balder i kombination med Micromax vid Max IV.

För standardiserade röntgendiffraktionsexperiment vid kryotemperaturer, som de vid Biomax, är funktionaliteten att automatiskt kunna byta prover avgörande för att kunna testa ett stort antal proteinkristaller på ett effektivt och säkert sätt. Brister i funktionen av provbytarroboten vid Biomax har gjort att kristallproverna tidigare har behövts bytas manuellt. Sedan november 2018 har dock dessa problem avhjälpats vilket förbättrar användarvänligheten av strålröret betydligt. En fungerande robot är även avgörande för att t.ex. läkemedelsföretag ska vara intresserade av att i större utsträckning samla diffraktionsdata vid Biomax.

Vid intervjuer med svenska forskare inom strukturbiologin är en återkommande kommentar att det är avgörande med pålitligheten vid Biomax samt bra support från strålrörets anställda. Svenska forskargrupper kommer välja att göra experiment vid den anläggning där allt fungerar utan krångel, de får bra service och har tillgång till tillräckligt mycket tid.

Rekommendation: *En experimentuppställning med hög pålitlighet, en väl integrerad dataanalys och tillräckligt hög bemanning av strålröret bör vara väldigt högt prioriterat vid Biomax.*

Inom strukturbologi är systemet med Block Allocation Group (BAG) proposals väletablerat. De flesta svenska strukturbologimiljöer har sedan länge varit del av en BAG vid ESRF för makromolekylär kristallografi och Saxs, och systemet används även vid Diamond Light Source. Det här förfarandet är inarbetat och mycket uppskattat inom strukturbologin eftersom det tillhandahåller både långsiktighet och flexibilitet för den enskilda forskargruppen. I senaste ansökningsomgången vid Max IV (april 2018) introducerades systemet med BAG-ansökningar för experimenttid vid strålröret Biomax. BAG-ansökningsförfarandet beskrivs mer utförligt under punkt 3.2.2.

Rekommendation: *En betydande del av stråltiden vid Biomax bör avsättas för BAG-ansökningar. Införandet av BAG-ansökningar till andra strålrör bör utvärderas i diskussioner mellan Max IV och användarna. Tilldelningen av stråltid genom BAG-ansökningar till forskargrupper vid svenska universitet bör följas upp så att den inte blir för låg. Se även punkt 3.2.2.*

Micromax kommer vara anpassat för små proteinkristaller, datasamling vid rumstemperatur och tidsupplösta experiment med hjälp av seriell kristallografi. Det sker just nu en snabb utveckling av metoden seriell kristallografi, både vad gäller experimentuppställningar och dataanalys. Ett antal möjliga provmiljöer kommer testas vid Biomax i väntan på konstruktionen av Micromax, och dessa kommer till viss del vara tillgängliga för användare. Planeringen av strålröret bör ske, och sker redan, i dialog med framtida nationella och internationella användare.

Rekommendation: *En hög flexibilitet vad gäller provmiljöer vid Micromax är önskvärt. Design och utveckling av experimentuppställningar bör även fortsatt ske i nära samarbete med akademiska grupper i Sverige och utomlands.*

2.2.3 FEL-experiment

Flera svenska forskargrupper har varit ledande under utvecklingen av metoden seriell kristallografi vid FEL-anläggningar och har under flera år varit framgångsrika i att säkra stråltid vid LCLS och Sacla. Tyvärr är metoden mycket specialiserad och det är väldigt svårt för nya användare att få experimenttid för seriell kristallografi. Detta beror på att det krävs specialkunskaper för att bereda prover, utföra experiment och analysera data. Dessutom är det tuff konkurrens om stråltiden.

Rekommendation: *Vid intresse från nya FEL-användare vore det önskvärt med en mekanism där förberedande experiment kunde utföras vid Max IV och där forskare vid Max IV kunde tillhandahålla viss expertis. Detta skulle öka möjligheterna för nya svenska forskargrupper att få tillgång till EU-XFEL.*

2.3 Tomografi

Tomografisk avbildning med synkrotronljus faller inom två olika områden med olika tekniska krav: biomedicinsk tomografi på biologiskt material som t.ex. vävnadsprover eller levande djur, och geologisk/paleontologisk tomografi på material som t.ex. bergartsprover och fossil vilka huvudsakligen består av olika mineral. Biomedicinska prover kräver inte höga energier eftersom materialet inte absorberar mycket röntgenstrålning, å andra sidan innebär risken för skadeverkningar på materialet att scanningen bör gå snabbt och ge låga strålningsdoser. Geologiska prover och fossil riskerar normalt inte att skadas av scanningsprocessen men kräver höga till mycket höga energier för att uppnå adekvat genomlysning.

Inom det biomedicinska fältet innefattar svensk synkrotrontomografisk forskning för närvarande studier av perifera nerver och benimplantat (båda gjorda på döda preparat) och lungfunktion (gjord på levande djur). Den sistnämnda forskningen utförs vid ESRF och SLS men involverar även forskare vid Max IV.

Nästan all svensk paleontologisk synkrotronmikrotomografi utförs vid ett av två strålrör, ID19 på ESRF och Tomcat på SLS. Valet av strålrör beror till stor del på materialet som skall studeras. Tomcat kan maximalt uppnå 45 keV medan ID19 kan nå mer än 300 keV. Detta innebär i praktiken att Tomcat bara kan användas för att studera små fossil (upp till någon centimeter i diameter) som inte är inneslutna i bergart, medan ID19 kan genomlys exemplar med en diameter på mer än 20 cm. Små exemplar kan studeras med hög upplösning (voxelstorlek ned till 0.16 μ m) vid båda strålrören.

För närvarande erbjuder Max IV inte tomografi och kommer heller inte att göra det förrän strålröret Danmax tas i full drift under 2020 – alltså ungefär samtidigt som ESRF öppnar igen efter uppgraderingen. Danmax är dock ett strålrör avsett för materialvetenskap och inte anpassat för biomedicinsk tomografi. Det planerade strålröret Medmax skulle bli en utmärkt resurs för biomedicinsk tomografi men har skjutits på en obestämmd framtid utan att detta beslut har kommunicerats till de potentiella användarna.

På grund av den begränsade energin (maximalt ca 35 keV) kommer Max IV aldrig att kunna ersätta ESRF som ljuskälla för tomografiska studier av större fossil. Däremot kan den möjligen utgöra ett alternativ till Tomcat för scanning av små prover. Under ESRF:s nedstängning konstrueras ett nytt tomografiskt strålrör, EBSL3, bredvid gamla ID19. EBSL3 kommer att ha betydligt bättre teknisk prestanda än ID19, med bland annat möjligheter för faskontrast med mycket långa propagationsavstånd, och kommer dessutom att vara optimerat för ”rapid throughput” med hög scanningshastighet. Med dessa egenskaper kommer EBSL3 på ESRF att bli det främsta strålröret i världen för fossiltomografi. Det kan tilläggas att det även kommer att vända sig till industriella användare, som en världsunik facilitet för tomografi av stora och högabsorberande föremål (t.ex. bilmotorer).

Rekommendation: Max IV kan potentiellt bli en utmärkt facilitet för biomedicinsk tomografi, men detta är helt avhängigt att det planerade Medmax-strålröret kommer att färdigställas. Det finns en stark önskan från svenska biomedicinska forskare, framförallt ifrån konsortiet som studerar lungfunktion, att strålröret byggs så snart som möjligt för att Sverige ska kunna ligga i framkant när det gäller avbildning av

vävnadsmikrostrukturer. Det är alltså önskvärt att en tydlig tidslinje för uppbyggnaden av Medmax fastställs och kommuniceras till potentiella användare. Eftersom Max IV på grund av den begränsade energin inte kan ersätta ESRF som ljuskälla för tomografiska studier av fossil är det av stor betydelse för svensk paleontologisk forskning att den svenska finansieringen av ESRF fortsätter. Framtida tillgång till det nya strålröret EBSL3 kommer att vara avgörande för den fortsatta utvecklingen av svensk synkrotronbaserad paleontologi.

3. MAX IV

3.1 Strålrören

Under 2018 uppmärksammades förseningar rörande färdigställandet av ett flertal strålrör vid Max IV. En av Vetenskapsrådet utsedd panel utvärderade under sommaren 2018 Max IV:s projektledning för strålrören. Ett flertal tydliga brister påpekades och rekommendationer till nödvändiga förbättringar gavs. Max IV:s styrelse fick i uppdrag av Lunds universitet och Vetenskapsrådet att utarbeta en åtgärdsplan som man nu tillsammans med Max IV:s ledning genomför. En ny ledning för Max IV tillsattes, med två nya vice-direktörer varav en också utsetts till interim direktör. Ledningen arbetar med att åtgärda de brister som påpekats i projektledningen av strålrörsuppbyggnaden och dess organisation och kommunikation.

Ett självständigt projektkontor håller på att byggas upp och har redan resulterat i förbättrad samordning och ett bättre nyttjande av de resurser som krävs för att effektivisera strålrörsuppbyggnaden och ge en tillförlitlig prognos för när strålrören kan öppnas för användare.

Av de 16 finansierade strålrören är vid tiden av rapportskrivningen tre (Biomax, Hippiie och Nanomax) öppna för användare och ytterligare sex (Finestbeams, Bloch, Balder, Maxpeem, Veritas, SPF-Femtomax) under driftsättning. Av de senare är fyra öppna för expertanvändare, men alla sex beräknas öppnas för användare under 2019. Ett prioriteringsarbete pågår för att så snabbt som möjligt kunna öppna övriga sju strålrör för användare (Species, Flexpes, Softimax, Cosaxs, Danmax, Formax, Micromax). Dessa är idag i olika stadier av design/uppbyggnad. Se Max IV:s hemsida www.maxiv.lu.se för aktuell information om strålrören.

Rekommendation: *Det är viktigt att Max IV fortlöpande kommunicerar med det svenska forskarsamhället om förändringar av tidsplanen för strålrören. Denna information är särskilt viktigt för forskarutbildningen vid universiteten och högskolorna för att göra det möjligt för doktorander att skapa realistiska projektplaner.*

För de två strålrören, Formax och Micromax, som är de senaste strålrören som beviljats finansiering, förväntas inga större förseningar då de inte konkurrerar om resurser på samma sätt. Formax och Micromax är de enda strålrören i designfasen och beräknas vara färdigställda och öppna för användare år 2022. Diffmax och Medmax har diskuterats och finns i planeringsstadiet men har ännu inte en säkrad finansiering. För Diffmax finns medel för konstruktion och uppbyggnad reserverade hos KAW men medel för drift måste säkras innan byggstart.

Rekommendation: *De strålrör vars finansiering inklusive drift nu måste säkras för att kunna byggas är Diffmax och Medmax, där båda bedöms ha en mycket hög prioritet för det framtida användarsamhället. För Medmax behövs det även en starkare förankring hos forskare vid universiteten och universitetssjukhusen som möjliggör att finna finansörer samt medverkan ifrån de nordiska länderna, speciellt Danmark.*

3.2 Tilldelning av stråltid

Det förekommer en diskussion om hur stor tilldelningen av stråltid vid Max IV blir till svenska forskare och huruvida det blir nödvändigt med en kvotering så att det svenska nyttjandet motsvarar investeringarna som gjorts av de svenska finansierarna. Siffror som förekommit i diskussionerna ligger mellan 50-75 % och kommer ifrån universitetens referensgrupp (URG). Som en jämförelse är exempelvis den Schweiziska användningen av Swiss Light Source (SLS) runt 50 %. Vid SLS har man inte tillämpat någon kvotering. Övrig tid vid anläggningen har gått dels till användare i EU-länder (runt 39 %) och dels till användare utanför EU (runt 11 %). Det har framhållits som önskvärt i Schweiz att få ett stort internationellt utbyte av forskare vilket stärker den nationella forskningen.

Rekommendation: *Det är viktigt att stråltid enbart tilldelas baserat på en vetenskaplig bedömning och det är viktigt för Sverige att attrahera internationella samarbeten och användare ifrån hela världen som skapar en stimulerande miljö. Så länge den svenska tilldelningen ligger omkring 50 % som medelvärde på Max IV bör ej någon kvotering genomföras av vanliga stråltidsansökningar (större program presenteras nedan). Dock bör inte den svenska användningen falla under 40 % vid svenskfinansierade strålrör.*

Som diskuterats ovan önskar många forskare att konsolidera sina stråltidsansökningar på Max IV när det finns strålrör och instrumentering som kan erbjuda önskade egenskaper och prestanda. Som också diskuterats önskar forskare att kunna engagera sig vid vissa specifika strålrör, delta i utvecklingen av instrumentering samt i vissa fall tillföra utrustning för unika experiment.

Vissa länder har säkrat prioritet till en viss andel stråltid genom att bidra med investeringar i strålrör eller annan instrumentering enligt en formel som Max IV tagit fram, till exempel Danmark som finansierar strålröret Danmax. Dessutom har också Finland och Estland en prioritet genom investeringen i Finestbeams. Sverige har ett liknande arrangemang vid Petra III med investeringen vid P21 som ger svensk prioritet. Någon prioritet för svenska forskare till stråltid vid Max IV genom investeringarna gjorda av Vetenskapsrådet, Vinnova, KAW och de svenska universiteten finns inte idag. Det betyder att det i nuläget finns en nackdel för svenska forskare i konkurrensen med andra länder som har en viss prioritet vid Max IV. Formen för stråltidsansökningar bör diskuteras vid de olika strålrören och anpassas efter det som passar användarna bäst vid just det strålröret. Som tillägg till vanliga stråltidsansökningar, ser vi att de olika alternativen nedan skulle kunna vara intressanta för tilldelningen av stråltid vid Max IV.

3.2.1 Större programansökningar

Vid flera SR-anläggningar har det funnits olika typer av arrangemang där användare som har drivit finansiering av ett strålrör eller bidrar med betydelsefull instrumentering eller har ett stort engagemang med betydelsefull forskning ges möjligheten att erhålla mer stråltid utöver det som utdelas genom vanliga stråltidsansökningar (som enbart gäller en period på 6-9 månader framåt i tiden). Vid Petra III kan forskargrupper som har gjort investeringar bjudas in att skriva en långtidsansökan som ger fler

stråltider under en längre period (2 år) än vanliga ansökningar. Vid Advanced Light Source (ALS) i Berkeley tillämpas ett liknande förfarande som kallas ”approved programs” och gäller under 3 år. Dessa ”approved programs” utvärderas av ALS scientific advisory committee och bedöms baserat på vetenskaplig excellens och/eller investeringar. Dessa kan ge stråltid på upp till 10 % vid ett specifikt strålrör. Vid Diamond Light Source är den här formen av ståltidsansökan tillgänglig för en majoritet av stålrören.

Rekommendation: *Det är önskvärt att skapa möjligheter till större programansökningar vid Max IV för enskilda forskargrupper eller större konstellationer. Dessa bör vara öppna för svenska forskare genom den investering som de svenska forskningsfinansiärerna har gjort gentemot Max IV. Om andra nationer gör större investeringar kan de också inkomma med liknande ansökningar. Dessa program bör utvärderas baserat på vetenskaplig excellens och granskas av någon av Max IV:s kommittéer (SAC eller PAC) för att därefter beslutas om av Max IV:s styrelse. Programmen kan löpa under 2-3 år och sedan genomgå en ny utvärdering där också uppnådda resultat bör vara en viktig faktor. Dessa program kan vara knutna till ett specifikt strålrör eller involvera flera. En viktig komponent bör vara ett engagemang hos forskargruppen vid det aktuella strålröret med en nära samverkan med Max IV:s vetenskapliga personal. Det bör inte föreligga något krav på finansiering eller investering från forskargruppen, eftersom svensk finansiering redan gjorts.*

Detta arrangemang ger svenska forskare en klar prioritet (utan kvotering men där vetenskaplig excellens är en viktig faktor) som är förknippad med den redan gjorda svenska investeringen. Det skapar också en närmare samverkan mellan starka forskargrupper och Max IV:s personal samt konsoliderar olika forskargrupperns aktiviteter vid Max IV.

3.2.2 BAG-ansökningar

Ett alternativ till programansökningar som kan passa vissa forskningsområden bättre är så kallade Block Allocation Group (BAG) proposals. För strukturbiologi har det vid ESRF, Diamond och flera andra synkrotroner under lång tid funnits ett system för sådana stråltidsansökningar. Detta går ut på att en konstellation av forskargrupper gör en gemensam ansökan som ger dem regelbunden tillgång till experimenttid vid ett eller flera strålrör under en längre period, vanligtvis två år. En BAG-ansökan skulle t.ex. kunna ge tillgång till ett antal timmars stråltid vid någon av de olika stationerna för makromolekylär kristallografi vid ESRF varannan månad under en period av två år. Förfarandet med BAG-ansökningar ger de individuella forskargrupperna både flexibilitet och långsiktighet i sin tillgång till stråltid. Det här förfarandet är väletablerat och uppskattat inom strukturbiologin. Vid ESRF har användandet av BAG-ansökningar varit fokuserat mot strukturbiologi. Vid Diamond Light Source däremot används ansökningsformen mycket mer generell. Där är det idag möjligt att göra BAG-ansökningar vid en majoritet av strålrören och inom alla olika discipliner. I senaste ansökningsomgången vid Max IV (april 2018) introducerades systemet med BAG-ansökningar för strålröret Biomax.

Rekommendation: Det är mycket önskvärt att användandet av BAG-ansökningar finns kvar vid Biomax också i framtiden. Tilldelningen av stråltid till svenska forskargrupper genom detta förfarande bör följas upp så att den inte blir för låg. Det är också önskvärt att utreda möjligheten att införa systemet med BAG-ansökningar även vid ytterligare strålrör.

3.2.3 Stråltid för testexperiment/rapid access

Ytterligare en möjlig form för stråltidsansökningar är så kallad rapid access. Rapid access kan användas för att snabbt tilldela en mindre mängd stråltid åt en forskargrupp för en kompletterande studie eller för att göra en studie av genomförbarhet inför en normal ansökan.

Rekommendation: Det bör övervägas att ge nya användare stråltid för initiala testexperiment via rapid access. Det vore i så fall önskvärt att sådana ansökningar kan lämnas in löpande under året.

4. P21 på PETRA III

Satsningen på att bygga P21, ett strålrör baserat på högenergidiffraction på Petra III, har ett starkt stöd bland svenska materialforskare. Den användbara fotonenergin är 40-150 keV. Det betyder att ett stort Q-område kan mätas på en platt pixeldetektor. Det här strålröret kommer att bli ett vasst verktyg för svenska forskare och det kommer dessutom att finnas svensk prioritet. Första ansökningsomgången öppnar i mars 2019 med stråltid senare under 2019.

Rekommendation: *P21-strålröret har varit en helt korrekt satsning och fortsatt stöd bör prioriteras. Vi förväntar oss att betydelsefulla resultat kommer att erhållas för svensk material-, kemi- och fysikforskning. Se även ovan, under punkt 2.1.2.*

5. ESRF

5.1 Uppgraderingen och konsekvenser för svenska forskare

Från december 2018 och fram till 2023 genomför ESRF ett omfattande uppgraderingsprogram, ESRF-EBS (Extremely Brilliant Source). Detta inkluderar en ny lagringsring där elektronerna accelereras med hjälp av hybrid multi-bend achromat-tekniken som är en vidareutveckling från Max IV:s multi-bend achromat-teknologi. Det här kommer att höja briljansen och det koherenta flödet av röntgenstrålarna på ESRF med flera storleksordningar. ESRF blir därmed världens första fjärdegenerationens synkrotron inom hårdröntgenområdet. De första strålrören kommer öppna för användare igen under andra halvan av 2020 och hela uppgraderingen ska vara färdig 2023.

Uppgraderingen innebär uppdatering av strålrören inklusive konstruktion av fyra helt nya strålrör, de så kallade ”EBS flagship beamlines”. Ett exempel som är extra intressant för strukturbiologer är EBSL8 (ID29), ett strålrör för makromolekylär kristallografi som efter uppgraderingen kommer användas för seriell kristallografi med provmiljöer liknande de som planeras för Micromax. Vid EBSL8 kommer man efter uppgraderingen kunna nå en röntgenfluxdensitet vid provet som är 300 000 gånger högre än idag.

Det finns en förhoppning bland svenska forskare att kunna flytta över en stor del av de standardiserade experimenten inom makromolekylär kristallografi till Max IV. Dock kommer det finnas fortsatt anledning för svenska forskare att använda ESRF även efter att Max IV är i full drift. Inom strukturbiologi kan det till exempel vara specifik expertis som finns vid ett visst strålrör eller speciella provmiljöer.

Inom de tomografiska forskningsområdena innebär förseningarna av uppbyggnaden av Max IV att anläggningens möjligheter att kompensera för stängningen av ESRF till viss del har gått om intet. Max IV erbjuder för närvarande ingen tomografi och den svenska tomografiska forskning som sker på ESRF kan alltså inte flytta över till Max IV under uppgraderingsprocessen. Den paleontologiska forskningen, för vilken en flytt till Max IV skulle vara av begränsat intresse (på grund av den alltför låga energin även om ett tomografiskt strålrör fanns att tillgå), har förberett sig för stängningen genom att scanna stora mängder fossilmaterial som underlag för de kommande två årens forskning.

För den paleontologiska forskningen är den viktigaste aspekten av uppgraderingen konstruktionen av ett annat av de fyra ”EBS flagship beamlines”: det nya tomografiska strålröret EBSL3, vid strålrörsport BM18. Det strålrör som i dag används för merparten av de tomografiska experimenten, ID19, är världsledande genom dess kombination av hög energi, stort bildfält och kapacitet för faskontrast. Dess begränsningar börjar dock bli alltmer tydliga; både akademiska och industriella användare efterfrågar möjligheter att scanna större objekt, uppnå högre upplösning, få bättre faskontrast vid höga energier och nå snabbare scantider så att fler objekt kan scannas under ett experiment. EBSL3 designas för att lösa dessa problem. Strålröret blir 220 meter långt. Tack vare den nya ljuskällans extremt höga koherens kommer högkvalitativ faskontrast med propagationsavstånd på upp till 35 m att vara

möjlig vid energier upp till 350 keV. Högupplöst heltomografi kommer att kunna utföras på objekt med dimensioner på upp till 2,5 m x 1,5 m och en vikt på upp till 300 kg. Strålröret kommer att vara automatiserat för att underlätta byte mellan olika inställningar.

Det färdigställda EBSL3 kommer att vara det utom all jämförelse främsta tomografiska strålröret i världen för stora högabsorberande objekt. Max IV kommer aldrig, på grund av sina inbyggda begränsningar, att kunna tillhandahålla något liknande. Detta innebär att tillgång till EBSL3 kommer att vara helt nödvändig om svensk paleontologisk tomografisk forskning skall bibehålla sin internationellt ledande position.

Rekommendation: Även om en stor del av de standardiserade experimenten inom strukturbioingenjöringen samt spektroskopiexperiment inom den kondenserade materiens fysik kan flytta över till Max IV är det viktigt med fortsatt svensk medverkan vid ESRF. Detta gäller speciellt inom tomografi men också för vissa typer av experiment inom biomedicinen.

6. Frielektronlasrar (FEL)

Svenska forskare tillhör forskningsfronten inom FEL-orienterad röntgenvetenskap med ett brett användningsområde och har tidigt varit engagerade i experiment vid FEL-anläggningarna LCLS i Stanford och Flash i Hamburg. Speciellt inom områdena avbildning och röntgenspridning i biologiska system, atom- och molekylforskning med intensiva pulser, dynamik efter laserexcitationer i kondenserad materia som inkluderar magnetiska och korrelerade elektronsystem, dynamik i kemiska system såsom katalys, solenergi och fundamentala frågor runt vatten. De forskargrupper som tidigt kunde medverka vid FEL-experiment har varit framgångsrika och genom att många deltar i stora samarbetskonstellationer har de haft stora möjligheter att erhålla stråltider vid LCLS, Sacla, Flash, SwissFEL, Fermi, PAL och EU-XFEL. I Sverige är också intresset stort för en möjlig svensk FEL-anläggning, vilket blivit uppenbart genom de workshops som genomförts i Sverige (se 6.2) och under de intervjuer som vi gjort under kartläggningen.

Rekommendation: *Det är viktigt att Sverige behåller den höga profilen med starka grupper som driver FEL-baserad forskning. Samtidigt är det essentiellt att nya svenska användargrupper har möjlighet att genomföra FEL-experiment. Det skulle vara önskvärt att en samordning sker inom Sverige där grupper med erfarenhet kan ge råd till nya användare. Ett sådant forum skulle kunna faciliteras av RFI på Vetenskapsrådet i form av möten och andra stimuleringsmedel, kanske med speciellt finansierade program.*

6.1 EU-XFEL

EU-XFEL invigdes i september 2017 och samma månad öppnade de två första experimentstationerna för användare: SPB/SFX and FXE. SPB/SFX står för Single Particles and Biomolecules/Serial Femtosecond Crystallography och är ett instrument för att göra avbildningar av biomolekyler samt för seriell kristallografi. Det är därmed ett högintressant instrument för svenska strukturbiologer. FXE står för Femtosecond X-ray Experiments och är ett instrument för röntgendiffraktion, röntgenspridning och röntgenspektroskopi på ultrakorta tidsskalor inom ett brett område som täcker kemi, biologi och materialvetenskap. Under december 2018 har ytterligare två instrument kommit i bruk: SQS (Small Quantum Systems) för att studera atomer, molekyler och joner i främst gasfas, respektive SCS (Spectroscopy and Coherent Scattering) som möjliggör studier av struktur och dynamik av komplexa material. Slutligen, under 2019 planeras de sista två instrumenten komma i tidig driftfas: MID (Materials Imaging and Dynamics) för struktur- och dynamikstudier av vätskor, amorfa material och nanostrukturer, och HED (High Energy Density matter) för att kunna studera material under extrema förhållanden. För vissa experiment kan pulsstrukturen vid EU-XFEL innebära komplikationer men en repetitionsfrekvens av 27 000 pulser per sekund öppnar också för möjligheter att samla mycket stor mängd data under kort tid.

Vi förväntar oss fortsatt mycket hög konkurrens om stråltid vid FEL-anläggningar även efter att SwissFEL öppnar för användare under 2019. Dessutom stänger LCLS (där svenska forskare är medsökande på ca 10 % av förslagen som tilldelas totala stråltiden) under 2019 för uppgradering till LCLS II. Det är därför viktigt att stärka konkurrenskraften hos svenska forskare som är intresserade av att göra experiment vid EU-XFEL.

FEL-experiment kräver ofta stora samarbeten på grund av den höga tekniska komplexiteten, vilket gör att tröskeln för studier vid EU-XFEL är mycket hög. Det är trots det viktigt att också nya FEL-användare kan dra nytta av Sveriges investering i EU-XFEL. I dagens svenska forskarsamhälle är forskargrupperna ofta mycket mindre jämfört med liknade grupper i Tyskland och USA. Detta medför stora utmaningar för intresserade grupper i Sverige om de inte redan deltar i stora samarbetskonstellationer. Sådana kan vara svåra att bli inbjuden till om den svenska gruppen inte är välkänd eller har deltagit i tidigare experiment.

Rekommendation: För att höja sannolikheten för svenska forskare att erhålla stråltid vid EU-XFEL som nya FEL-användare är det önskvärt att vetenskaplig personal vid Max IV med relevant tekniskt kunnande kan assistera och ibland delta i experiment vid EU-XFEL. Vissa tester kan genomföras vid Max IV. Detta kan skapa ett nära samarbete mellan Max IV och EU-XFEL samt öka kompetensen, särskilt om det i framtiden beslutas att bygga ett FEL-strålrör vid Max IV som också kan bli en plattform för en framtida expansion mot en hårdröntgen-FEL.

6.2 Svensk FEL

Eftersom det i Sverige finns ett stort intresse för FEL-baserad forskning har det förekommit diskussioner under nästan ett decennium om en svensk FEL. I Stockholm-Uppsala-regionen skapades ett FEL-center finansierat av de lokala universiteten som först hade som målsättning att undersöka möjligheterna för en FEL i Uppsala. Parallellt initierades diskussioner också i Lund i anknäring till Max IV. När den nya 3 GeV-ringen på Max IV planerades drev acceleratorfysikerna i Lund att man skulle bygga den 3 GeV linjäraccelerator som idag fungerar som lagringsringarnas injektor. Tanken var att den kunde vidareutvecklas till en FEL vid ett senare tillfälle.

Under 2016 ordnades ett arbetsmöte för att generera ett vetenskapligt underlag för ett mjukröntgenlaserstrålrör (SXL) vid linjäracceleratorn. Över 100 svenska forskare deltog i arbetet att producera en rapport som mottogs positivt av Max IV:s styrelse. Därefter har en arbetsgrupp tillsatts med finansiering av KAW samt Lunds universitet, Stockholms universitet, Uppsala universitet, KTH och Max IV som har som mål att färdigställa en konceptuell beskrivning av SXL där konstruktionskostnaden bör ligga i storleksordningen av vad två strålrör kostar vid 3 GeV-ringen. Rapporten för den studien beräknas vara klar under 2021. Tidshorisonten för realiseringen av SXL är som tidigast möjlig runt 2023-2024 då de flesta strålrören vid Max IV-ringarna beräknas vara färdigställda. Om SXL byggs finns det möjlighet att förlänga linjäracceleratorn för att senare också skapa en hårdröntgen-FEL.

Hos de forskare som vi har intervjuat angående en svensk FEL är intresset bimodalt. En grupp uttrycker en stor entusiasm där speciellt forskare inom mjukröntgenområdet är mycket intresserade. Den andra gruppen menar att en FEL ej bör byggas

i Sverige och att tillgängliga medel skall helt prioriteras för att fullt ut bygga strålrörsparken vid de båda ringarna vid Max IV och att ett svenskt medlemskap i EUXFEL räcker väl. Denna respons är naturligtvis delvis korrelerad till intresse för FEL-vetenskap men också kopplat till huruvida en hårdröntgen eller mjukröntgen-FEL skulle kunna bli aktuell. Helt klart är att forskare inom livsvetenskaperna är mest intresserade av en hårdröntgen-FEL medan forskare ifrån områdena fysik, material och kemi är mycket intresserade av en mjukröntgen-FEL i linje med SXL projektet. Dessa ser dock också i förlängningen betydelsen av en hårdröntgen-FEL. Vår bedömning är att idag skulle en hårdröntgen-FEL vara för kostsam för Sverige givet en fortsatt uppbyggnad av Max IV och huvudmanskap av ESS. Dock kan SXL-strålröret vara ett första steg mot en framtida svensk större satsning på en hårdröntgen-FEL.

Rekommendation: Det är viktigt att den konceptuella utredningen av SXL färdigställs med en rapport. Sedan bör en konferens ordnas med en uppdatering av det vetenskapliga underlaget för projektet där också det svenska intresset för byggandet av SXL genomlysas. Det senare bör ske både utifrån att SXL är ett enskilt projekt men också som ett första steg mot en framtida större FEL-anläggning som byggs efter att ESS är i full drift.

7. Svenska universitet

7.1 Aktiviteter vid universiteten

Universitetsledningarnas svar på frågorna rörande strategier och framtida planering för forskning som kräver nyttjande av SR/FEL-metoder visar på en mängd aktiviteter och initiativ för att säkerställa fortsatt stark konkurrenskraft rörande tillgång till de internationellt bästa SR/FEL-anläggningarna med speciellt fokus på Max IV. Det är framförallt de universitet som redan idag är stora användare av SR/FEL-anläggningar som har etablerat strategier och gjort större investeringar. Det bör också tilläggas att förutom de satsningar universiteten gjort, och kommer att göra, så tillkommer ytterligare externfinansierade forskningsprojekt inom relaterade områden på individuell forskarnivå. Universiteten har uttryckt att Max IV har alla förutsättningar att bli en stor framgång för svensk forskning, förutsatt tillräcklig finansiering och tillräckligt utnyttjande av lärosätena. Nedan följer några exempel:

Förutom de verksamheter som Lunds universitet har på Max IV så har man under de senaste åren nyrekryterat många forskare som är röntgenanvändare i olika stadier i karriären, från professorer till Research Fellows inom områden som mjuk materia, molekylär geokemi, magnetism, röntgentomografi, avbildning, biomekanik (benavbildning), biospektroskopi av mikrostrukturer, spektroskopi på magnetiska molekyler och nanopartiklar. Flera av Lunds universitets forskare är involverade i tekniska projekt vid Max IV, exempelvis i utveckling av instrumentering, provmiljöer och dataanalys. Områden universitetet ser är i expansionsfas är studier av magnetiska material samt avbildning med röntgenljus, områden inom vilka flera forskare nyligen rekryterats. Behov finns också att stärka gruppen för acceleratorfysik samt återuppbygga en grupp för synkrotronljusinstrumentering efter pensioneringar.

Uppsala universitet har gjort två starka strategiska rekryteringar på professorsnivå för att stärka synkrotronljusforskningen. Universitetet har lång och gedigen erfarenhet av utveckling av synkrotronljusverksamhet såväl vetenskapligt som tekniskt rörande metoder, strålrör och instrument. Universitetet bidrar redan idag med resurser för utveckling av flera strålrör vid Max IV och är redo att bidra ytterligare till utveckling av nya strålrör. På biofysiksidan av FEL-området är man starkt involverad. Ångströmlaboratoriets verkstad vid Uppsala universitet är landets mest avancerade universitetsverkstad och bidrar till byggandet av strålrör, instrument och annan utrustning av relevans för Max IV och andra Big-Science-anläggningar. Den teknisk-naturvetenskapliga fakulteten vid Uppsala universitet har inrättat ett centrum för fotonvetenskap med uppgift att fungera som ett råd i synkrotronljusfrågor och informera om forskningsmöjligheter med synkrotronljus. Man jobbar också med att ta fram förslag på möjliga in-kind bidrag t.ex. nya experimentstationer som skulle kunna bredda forskningsmöjligheterna vid Max IV. Ett likande centrum har inrättats för neutronspridning.

Stockholms universitet har gjort flera mycket starka nyrekryteringar inom fysik och kemi relaterade till synkrotronljusforskning och har ett betydande tekniskt verkstadsstöd för uppbyggnad av instrumentering. Det finns en omfattande verksamhet

runt användandet av FEL-källor relaterad till kemisk och den kondenserade materiens fysik men också strukturbiologi. En gästprofessur är tillsatt för att stödja synkrotronljusbaserade strukturbestämningar vid starka forskningsområden inom geologi och miljö. Fler forskningsatsningar kommer att göras. Stockholms universitet initierade arbetet med att ta fram ett vetenskapligt underlag för ett koherent mjukröntgenlaserstrålrör (SXL) vid Max IV:s linjäraccelerator (se 6.2). En forskargrupp vid universitetet har delfinansierat ett sidorör vid Veritas-strålröret på Max IV.

Linköpings universitet har gjort strategiska rekryteringar inom strukturbiologi (bitr universitetslektor, postdoc) som kopplar till tvärvetenskapliga projekt som ligger mellan medicin, kemi och teknik. En expansion av området sker nu vid universitetet och de kommer att fortsätta bygga kompetens utifrån en stark bas av tillämpad fysik och biofysik, med tillämpningar inom miljö-, material- och patientområdet, där användning av röntgen-/neutrontekniker ingår. Detta innebär omfattande komplementära satsningar på lokal instrumentering och infrastruktur. Prolinc, är en core-facilitet vid Linköpings universitet som har byggts upp för att stödja karakterisering av proteiner inför studier som kräver storskaliga infrastrukturer som t.ex. SR och FEL. Prolinc är en del av Cost-nätverket Arbre/Mobieu med ett 40-tal europeiska noder. Med stöd av ett Röntgen-Ångström Cluster-ramanslag har en kraftig kompetenshöjning skett inom materialvetenskapliga *in situ*-studier med hådröntgen vid universitetet. Man har byggt tre provmiljöer som finns vid P07 strålröret (High Energy Materials Science beamline) vid Petra III.

KTH är tillsammans med Linköpings universitet värdorganisation för det svenska materialvetenskapliga strålröret P21 vid Petra III. Ett centrum "Centre for high-energy X-ray characterisation in materials science" är under etablering och ska främja materialvetenskapliga studier vid Petra III. KTH är även involverade i konstruktionen av strålröret Formax. KTH bygger instrument t.ex. e-beam för bl.a. zonplattor för röntgenoptik och har för avsikt att bygga en spinndetektor för fotoelektron-spektroskopi. KTH har också genomfört strategiska satsningar på forskare (bitr. lektorat, postdocs) inom områdena FEL, mjukröntgenspektroskopi samt röntgen- och neutroddiffraction. Man stödjer också sina forskares resor till SR-källor.

Chalmers har ett samarbetsavtal med Max IV och bedriver ett antal större forskningsprojekt som bl.a. bidrar till utveckling av instrument vid flera strålrör samt utveckling av analysverktyg/modellering av data för att tolka experiment. Man verkar för att koppla sina starka forskningsmiljöer till Max IV. Diskussioner med Max IV om ytterligare instrumenteringsprojekt pågår t.ex. kring Formax, mjukvaruprojekt och avbildningstekniker. Chalmers arbetar för att öka kompetensen hos sin personal, både genom vidareutbildning av befintlig personal men också genom nyrekryteringar av bl.a. biträdande lektorer. Man bygger även upp områden där generationsskifte skett eller där man ser en ökning av intresset för röntgentekniker t.ex. inom mjuk materia och tillämpad forskning som involverar industrin.

Rekommendation: *URG (unviersitetens referensgrupp för Max IV) har varit viktigt för att ge universiteten inflytande över utvecklingen vid Max IV. Det är viktigt att URG:s arbete fortsätter och stärks under de kommande åren. Det är också önskvärt med ökad representation i Max IV:s styrelse och/eller SAC ifrån de universiteten*

som gör stora satsningar i Max IV. Idag finns det dock ingen universitetsreferensgrupp som representerar FEL-verksamheter. Här kan man antingen bredda URG:s roll eller skapa ett eget organ.

7.2 Akademisk koppling till MAX IV och EU-XFEL

I intervjuer med Max IV:s personal har det framkommit ett önskemål om att kunna erhålla antingen en akademisk deltidstjänst eller en adjungerad tjänst vid Max IV i kombination med en anställning vid något av de svenska universiteten. Det skulle också skapa en tydligare karriärväg för forskare vid Max IV. Det har också förekommit diskussioner i URG om att akademiska tjänster vid universiteten kan kopplas direkt till verksamheter vid vissa specifika eller grupper av strålrör vid Max IV. Liknande arrangemang kan också göras med EU-XFEL i Hamburg. Sådana tjänster skulle stimulera en närmare kontakt mellan anläggningarna och de svenska universiteten som kan vara positiv både för anläggningarnas vetenskapliga program men också för universiteten.

Rekommendation: Det bör initieras en diskussion mellan Max IV och universiteten om möjligheten för samfinansierade tjänster. Den diskussionen kan ske genom URG och skulle även kunna inkludera EU-XFEL. Dock bör dessa tjänster vara tämligen begränsade till antalet eftersom resurser till strålröruppbyggnad, underhåll och stöd till användare bör vara huvudprioritet för Max IV och befintliga resurser måste användas effektivt.

7.3 Kompetensutveckling och nya användare

Det är viktigt att man gör en inventering av det vetenskapliga intresset för SR- och FEL-anläggningar och deras strålrör samt stimulerar potentiella nya användare. Många forskare i landet känner inte alltid till de möjligheter som kommer att finnas vid Max IV och EU-XFEL när dessa är fullt driftsatta. Samtidigt kan olika användare bredda sina verksamheter till att använda andra metoder än vad de tidigare har utnyttjat. Det vore därför önskvärt att det finns sammanhang där forskare från olika fält kan fokusera på gemensamma vetenskapliga frågeställningar och därefter diskutera hur olika röntgentekniker kan angripa dessa. Detta kan till exempel ske i form av arbetsmöten som arrangeras i samverkan mellan forskargrupper vid universiteten och anställda vid Max IV och EU-XFEL. Ett exempel på resultat från ett sådant arbetsmöte är SXL-visionen som finns presenterad i en rapport där de vetenskapliga slutsatserna och hur strålröret kan tillfoga nya insikter redovisas. (Se <https://indico.maxiv.lu.se/event/141/material/paper/0.pdf>)

Rekommendation: En serie tematiska arbetsmöten bör initieras vid universiteten och Max IV för olika ämnesområden med fokus på hur SR- och FEL-metoder kan användas för att besvara viktiga vetenskapliga frågeställningar. Ett exempel på områden kan vara den kondenserade materiens fysik, energimaterial, miljökemi, strukturbologi etc. Vid mötena bör internationellt ledande forskare inom dessa områden delta. De behöver dock inte vara användare av röntgentekniker men ha en överblick

över fältet och kunna redovisa viktiga obesvarade frågeställningar. Mötena kan bidra till att eventuella brister på tillgång av vissa tekniker identifieras. Forskargrupperingar som har pågående större aktiviteter inom ramen för program- eller BAG-ansökningar vid Max IV förväntas ta ett mer omfattande ansvar vid arrangerandet av dessa tematiska möten.

Med tanke på den stora investeringen som gjorts för byggandet och driften av Max IV, samt svenskt medlemskap i EU-XFEL som öppnar för unika experiment för det svenska forskarsamhället, behöver användandet breddas till flera grupper. Max IV har tidigare turnerat med ”roadshows” vid de olika universiteten men vår bedömning är att denna verksamhet inte har varit effektiv för att nå nya grupper, mycket på grund av att den skedde för tidigt. När Max IV nu börjar driftsätta en väsentlig del av sin strålrörspark bör anläggningen försöka attrahera nya användare vid de svenska universiteten.

Rekommendation: *Vid ovan nämnda arbetsmöten är det viktigt att även nya grupper deltar. Dessa möten bör annonseras brett i det svenska forskarsamhället men arrangörerna bör också speciellt bjuda in forskare vid universiteten som bedöms att kunna nyttja Max IV och EU-XFEL men ännu inte gjort det.*

7.4 Utbildnings- och träningsinsatser

Max IV har etablerat en utbildnings- och träningsplattform, MEP (Max IV Education Platform). Ett flertal kurser och workshops specifikt centrerade kring de olika strålrören utvecklas tillsammans med de experter som finns hos universitet, institut, konsortier etc. Skräddarsydda kurser för industrianvändare ska organiseras liksom för lärare både i grundskolan och på universitet. Därutöver ska en generell kurs ges om synkrotronljus och dess användning och sommarskolor och vinterskolor kommer att genomföras. On-line verktyg för e-learning och webinarer finns och utvecklas vidare.

Två procent av den tillgängliga stråltiden vid Max IV är tillgänglig för utbildning och träning där öppna utlysningar gör det möjligt att få både hjälp med planering av experiment vid något strålrör för undervisnings syfte och support vid genomförandet.

Som nämnts ovan finns en stor del av SR/FEL-expertisen på universiteten och flera kurser ges på de olika lärosätena. En samordning mellan universiteten för att öka interaktion och utbyten inom utbildningsområdet vore önskvärt och är ett sätt för de forskare som ännu inte är SR/FEL-användare att få tillgång till utbildningar som ges av experter inom olika forskningsområden.

Ett regionalt Interreg-projekt, MAX4ESSFUN (ett delprojekt där parter i regionen Öresund-Kattegatt-Skagerrak ingår), har genomförts där målet var att, med fokus på yngre forskare (doktorander/postdocs), stödja regionen att bli ledande inom användandet av neutron- och synkrotronljus. Ett nytt EU-projekt, Halos (Hanseatic League of Science), lett av Lunds universitet startar 2019 med fokus på livsvetenskaperna och möjliggör en vidareutveckling av det tidigare projektet. Halos inkluderar universitet, regionala utvecklingsaktörer, forskningsanläggningar (Max IV, Desy, EU-XFEL och ESS) och näringsliv.

Linxs (Lund Institute of advanced Neutron and X-ray Science) är ett projekt som ska etablera ett gästforskningsinstitut och en nationell plattform för att öka den svenska användarbasen vid Max IV och ESS. Världens främsta forskare och användare ska lockas till miljön under begränsad tid och interagera med nationella intressenter för att öka kunskap och utveckla forskningsfrågor, till att börja med inom mjuk materia, livsvetenskaper och hård materia.

Rekommendation: För att snabbare utveckla och utöka den svenska användarbasen är det av stor vikt att det finns ett relevant utbildnings- och träningsutbud. En koordinatorsfunktion med uppgift att samordna utbildningsutbudet inom SR/FEL-området vore önskvärt. Funktionen bör även ha vissa resurser för kursutvecklings-, rese- och uppehållskostnader. Nära samarbete med MEP (Max IV:s utbildningsplattform) förutsätts och att funktionen följer hur liknande aktiviteter utvecklas vid EU-XFEL.

8. Behov av nya strålrör och tekniker

Vid intervjuer av svenska forskare, vetenskapligt anställda vid Max IV samt förestandare vid andra anläggningar har det ofta lyfts fram att det finns unika strålegenskaper hos Max IV genom den låga emittansen hos ringarna där laboratoriet kan vara världsledande. Det handlar speciellt om det höga koherenta flödet samt den lilla divergensen hos strålen. Möjligheterna till litet fokus har fått hög prioritet vid de första strålrören genom alla mikroskopi- och avbildningstekniker. Dock är det viktigt att också de två andra egenskaperna utnyttjas effektivt. Den höga koherenta intensiteten öppnar möjligheter för diffraktionsstudier av amorfa material och vätskor genom att mäta "speckles". Detta skulle möjliggöra dynamiska studier med röntgenkorrelationstekniker. Den lilla divergensen tillåter studier av ytor och gränsskikt genom att använda extremt strykande infall. Det har framkommit en önskan hos flera grupper inom material- och kemiområdena att genomföra diffraktionsexperiment och högtrycks-XPS med hårdröntgen där strykande infall är betydelsefulla.

Rekommendation: *Det är betydelsefullt att Diffmax får fullständig finansiering och att strykande infall optimeras för gränsskiktstudier. Detta strålrör bör innehålla både uppställningar för diffraktionsstudier och hårdröntgen-XPS. Det rekommenderas att Max IV tilldelar resurser så att strålrören Cosax och Softimax tidigt kan utveckla korrelationstekniker i samarbete med forskare vid de svenska universiteten. Dessutom kan den verksamheten skapa ett starkt samarbete med MID-stationen vid EU-XFEL som är fokuserad på röntgenkorrelationsmätningar. Dessa två anläggningar kan komplettera varandra och möjliggöra ett stort tidsfönster för dynamikexperiment, från femtosekunder upp till minuter.*

9. Datahantering och teoristöd

Vid våra intervjuer uttrycker de aktiva forskarna inom de olika områdena inget stort behov av stöd runt dataanalys och teoretiska simuleringar. Däremot är det möjligt att sådana behov kan föreligga för nya användare. Det är därför önskvärt att det skapas former för hur nya användare får kontakt med etablerade grupper för att skapa bättre förutsättningar för samarbeten kring dataanalys och teoristöd.

En utmaning för alla faciliteterna inklusive Max IV är att på ett effektivt och säkert sätt processa och lagra data. Ur ett användarperspektiv är det viktigt att rådata lagras lokalt under en tillräckligt lång tid och att pre-processning kan ske lokalt vid Max IV så att inte den fulla datamängden behöver överföras till användarna. Detta är en fråga som är central vid EU-XFEL där ett speciellt användarkonsortium DataXpress har etablerats där svenska grupper ifrån Uppsala universitet deltar.

Rekommendation: Max IV bör ges en aktiv roll i att sammanföra nya användare med erfarna forskargrupper inom olika områden runt dataanalys och teoristöd. Det bör upprättas någon form av databas med specialister på olika metoder och personal på stålrören kan ha en central roll i att förmedla kontakter.

10. Koppling till ESS

Det finns all anledning att skapa starka kopplingar mellan Max IV och ESS (European Spallation Source, en neutronkälla som byggs i Lund där Sverige tillsammans med Danmark är huvudman). Dock ligger driftsättandet av ESS fortfarande långt i framtiden men det kan finnas all anledning att redan nu initiera diskussioner runt hur en samverkan kan se ut mellan SR/FEL och neutronområdena. Röntgen- och neutronspridning är komplementära metoder och tillsammans bidrar de till en djupare förståelse för det studerade materialet. Röntgenspridning sker mot elektronmolnen vilket gör att ett stort tvärsnitt erhålls i prover med höga atomtal. När det gäller neutroner är tvärsnittet helt annorlunda och speciellt väteatomer ger högt tvärsnitt. Dessutom finns det i neutronspridning en unik känslighet för elektronspinn. Tyvärr ställs det helt olika krav på prover för att genomföra spridningsexperiment med neutroner jämfört med röntgen, delvis på grund av det låga neutronflödet och svårigheter att fokusera strålen. Det gör att mm- till cm-stora prover är nödvändiga vid neutronexperiment medan vid röntgenexperiment räcker det med μm -storlek. Där det finns överlapp med överkomliga prover och frågeställningar finns det dock all anledning att stimulera till synergi mellan ESS och Max IV. Dock är det viktigt att välja rätt tidpunkt för att inleda sådana diskussioner då det är lång tid kvar innan ESS driftsätts och forskare vanligen planerar sina experiment med en tidshorisont på 1-2 år.

Rekommendation: Vid en tidpunkt då starten av ESS finns i en nära tidshorisont kan det vara önskvärt att Vetenskapsrådet initierar speciella program för att koppla ihop studier med röntgen- och neutrontekniker. En möjlighet är att det ordnas en workshop som efterföljs med en utlysning av finansiering t.ex. via Röntgen-Ångström Cluster programmet.

11. Rekommendation runt finansiering av SR/FEL anläggningar

Vi sammanfattar här våra slutsatser i form av en rekommendation för hur RFI inom Vetenskapsrådet kan prioritera framtida finansiering av SR/FEL-anläggningar:

- Det är viktigt att driftbudgeten för Max IV-laboratoriet säkerställs. Vetenskapsrådet har gjort ett ansvarfullt åtagande att vara huvudfinansiär och det är väsentligt att engagemanget fortsätter på minst nuvarande nivå. Dock rekommenderar vi att Vetenskapsrådet villkorar finansieringen med att laboratoriet levererar stråltid till det svenska forskarsamhället som motsvarar investeringen och driftbudgeten i ett internationellt perspektiv. En ny inventering av hur svenska forskare använder Max IV är nödvändig inom cirka 2-3 år, när de flesta strålrören har varit i drift under något år. Den bör även undersöka om laboratoriet har erbjudit attraktiva förutsättningar för svenska forskargrupper att förlägga sin SR-verksamhet vid Max IV.
- Om Max IV kan erbjuda effektiv stråltid vid Biomax för standardiserade experiment inom strukturbologi och om en del oelastiska spridningsexperiment inom hårdröntgenområdet kan genomföras vid Balder kan finansieringen till ESRF minskas allt eftersom svenska forskare flyttar sin verksamhet från ESRF till Max IV. Dock behövs det fortfarande ett visst deltagande eftersom tomografi och vissa experiment i bio-området kommer att behöva genomföras vid ESRF efter uppgraderingen. En eventuell minskning av finansieringen till ESRF bör styras av en löpande uppföljning av det svenska söktrycket på stråltid vid ESRF, så att inte de verksamheter som behöver genomföras där lider skada.
- Finansieringen av P21 vid Petra III är mycket viktig för svensk materialforskning och bör vara finansierad på nuvarande nivå. Precis som för Max IV behöver den utvärderas om cirka 2-3 år och det bör säkerställas att den nyttjas effektivt av det svenska forskarsamhället.
- Eftersom Sverige är framträdande inom FEL-området är svenskt deltagande i EU-XFEL mycket viktigt. Finansieringen rekommenderas att fortgå enligt avtal med EU-XFEL. Det är också viktigt att Sverige deltar i framtida expansion av EU-XFEL där det finns planer på ytterligare 2 undulatorkällor och i det långa perspektivet mer avancerade uppgraderingar av acceleratoren.

12. BILAGOR

Bilaga 1: Frågor till Universitetsledningarna i samband med kartläggningen av synkrotron- och frielektronlaserlandskapet utifrån den svenska forskningens behov

I ett första skede har vi som avsikt att samla information ifrån forskarsamhället där ni universitetsledningar kan ge ett mycket viktigt bidrag. Vi skulle uppskatta om ni kortfattat besvarar följande frågor **senast 29 mars**. Önskvärt är dock att så snart möjligt få svar på **punkt 1** helst **före 8 mars** för att snabbt komma igång med intervjuer.

1. Namnge några speciellt utvalda PI's och större grupperingar som är regelbundna användare av röntgenanläggningar, såväl nationella som internationella. Ange också övergripande namn på deras respektive forskningsområde. Högst 2-5 grupperingar. Vi har för avsikt att inhämta närmare information om intresse, användning och framtida utveckling hos några forskargrupper.
2. Hur ser beslutade satsningar/strategiska planering ut inom ert eget universitet inom det här området? Det kan handla om akademiska tjänster, teknisk personal, instrumenteringssatsningar, riktat doktorandstöd etc. Finns områden som expanderar hos er eller där kompetens med anknytning till röntgenområdet förloras?
3. Satsningar i diskussionsstadiet? Vi uppskattar om ni vill delge satsningar som endast är i diskussionsstadiet vilka kan hanteras konfidentiellt i kommittén och ej belysas i rapporten om så önskas.

Bilaga 2: Frågor till intervjuade forskare

- 1) Vad är ert forskningsområde?
- 2) Vilka röntgentekniker använder ni främst?
- 3) Vilken av följande kategorier tillhör er röntgenbaserade forskning:
 - a) använder röntgentekniker ibland när vi har specifika behov av analysmetoder;
 - b) använder röntgentekniker mycket ofta men då ganska standardiserade metoder men där tillgången av stråltid är viktig;
 - c) driver forskning runt röntgenväxelverkan med atomer, molekyler och material och/eller utvecklar röntgentekniker;
 - d) använder röntgentekniker regelbundet där experimentuppställningen måste specialanpassas.
4. Hur ser er fördelning av planerade stråltidsansökningar mellan olika synkrotronljusanläggningar (SR) ut i framtiden när Max IV är fullt igång körd med alla strålrör; kommer ni att söka stråltid vid andra anläggningar och i så fall varför? Om ni kan få all nödvändig stråltid vid Max IV skulle ni då behöva söka tid vid andra anläggningar?
5. Använder ni eller planerar ni använda frielektronlaser (FEL) baserade källor? Vilka klasser av experiment? Hur har tillgången till stråltid sett ut för er del om ni har sökt? Om ni ännu inte använt FEL hur intressant är det i framtiden? Ifall ni är intresserad kan EU XFEL bli betydelsefullt? Är det intressant med en FEL vid Max IV?
6. Ser ni att det finns framtida intressanta områden inom SR/FEL utvecklingen som kan bli betydelsefulla för er forskning?
Finns det metoder, strålrör eller instrument som inte finns tillgängligt vid Max IV eller XFEL som är mycket intressanta för framtiden.
Skulle det vara användbart med en inventering i form av workshops och skrivna dokument runt ett specifikt ämnesområde om hur olika röntgentekniker kan användas för att komma åt unika frågeställningar.
Ser ni att svensk kompetensutveckling inom SR/FEL området skall hanteras av Max IV eller distribueras till de olika universiteten eller kombination av bägge?
7. Har ni tillgång till kompetens för datahantering och analys? Har ni eller önskar ni samarbeten med modellerare/teoretiker? Är det i form av spektrum- eller spridningsberäkningar eller annat?
8. Använder ni ESRF? Hur påverkas ni av det planerade avbrottet vid ESRF för dess uppgradering. Finns det behov att duplicera kapacitet som finns vid ESRF också på Max IV samt kan i så fall en gradvis överflyttning ske till Max IV?

9. Planerar ni att använda P21, högenergidifraktionsstrålröret vid Petra III?
Har ni blivit informerad om detta strålrör? Använder ni den speciella formen av svensk prioritet för att söka stråltid på Petra III?
10. Andra frågor att ställa för specifika ämnesområden.
11. Annan information som är intressant.

Bilaga 3: Frågor till intervjuad personal på MAX IV

1. Vilket strålrör representerar ni och vilka tekniker finns tillgängliga?
2. Hur ser du att uppbyggnaden av strålröret har fungerat? Är ni igång med att leverera till svenska användare? Om inte vad är anledningen till fördröjningen?
3. Hur mycket har svenska forskare varit involverade i uppbyggnaden? Har de eller kommer de att medverka i testexperiment? Ser ni i framtiden att svenska grupper kommer att fortsätta att medverka i utveckling av instrumentering? Skulle det vara fördelaktigt om svenska grupper är starkt involverade i strålröret i framtiden? Om ja, hur kan man uppnå det på bästa sätt?
4. Hur ser fördelningen av stråltidsansökningar ut vid strålröret mellan svenska användare och internationella? Finns det ett stort intresse hos internationella användare för ert strålrör?
5. Ser ni att det finns relaterade röntgentekniker inom ert område som idag saknas vid Max IV? Hur ser forskningsfronten ut vid andra anläggningar?
6. Finns det tillräckligt med personal vid strålröret för att ni på ett effektivt sätt kan leverera experiment tid till svenska användare? Hur ser personal fördelningen ut? Efter att uppbyggnaden är klar finns det finansiering för vidareutveckling av strålröret? Vilken budget finns tillgänglig?
7. Hur ser ni på växelverkan med de svenska universiteten? Skulle det vara intressant att ordna workshops tillsammans med universiteten som sker vid olika lärosäten eller Max IV för att inventera ett forskningsområde och hur röntgentekniker kan besvara viktiga frågeställningar? Hur kan man bäst nå ut till potentiella nya svenska användare?
8. Annan information av intresse.

Bilaga 4: Terms of Reference för ”Utredning av synkrotron- och frielektronlaserlandskapet utifrån den svenska forskningsens behov”

Finansieringen av synkrotroner (SR) och frielektronlasrar (FEL) för produktion av röntgenljus upptar en stor del av RFI:s tillgängliga budget (minimum 370 MSEK/år i drift fr.o.m. 2019). Den idag i särklass största satsningen inom området utgörs av driftsstödet till Max IV (280 MSEK/år från RFI + 30 MSEK/år från VRs styrelse), där Vetenskapsrådet är huvudfinansiär. Även andra anläggningar inom området, såsom ESRF och European XFEL, förväntas generera väsentliga kostnadsökningar för RFI framöver om inga begränsningar (”capping”) införs. Syftet med utredningen är att kartlägga den svenska forskningens behov inom SR/FEL-området och utreda hur det ev. bättre skulle kunna tillgodoses än med den finansieringsmodell som RFI idag använder sig av.

Utredningen kommer att ledas av en skrivargrupp på 4 personer och fortlöper under 2018; en första preliminär, muntlig avrapportering bör ske vid RFI:s möte den 23-24 maj 2018. Skriftlig slutrapport bör presenteras på RFI:s möte den 5:e december 2018. Skrivargruppen får kontinuerligt det stöd från VRs kansli som krävs för att fullfölja uppdraget.

Frågor som skall belysas:

- Vilka forskningsbehov finns i Sverige som behöver röntgenstrålning från synkrotron- och frielektronkällor?
 - o Vilka av dessa behov täcks upp av instrumenten vid de anläggningar som RFI idag finansierar? Är impact av den svenska forskning som kommer ut från respektive anläggning i paritet med investeringarna som görs?
 - o Vilka, om några, teknik-/instrumenteringsområden saknas/är svaga relativt behoven?
 - o Hur stort är användandet av andra källor än de RFI finansierar och hur viktigt är detta användande för den svenska forskningen? Satsar RFI på ”rätt” källor i sin finansiering?
 - o Görs det idag relevanta satsningar för att öka kunskapen i Sverige om metoderna som används vid SR/FEL-faciliteter så att nya användargrupperingar kan komma in? Vad behöver göras för att ytterligare öka medvetenheten för dessa resurser?
- Vilka områden inom SR/FEL-fältet är under stark förändring?
 - o Hur förändras frontlinjen för tekniker/instrumentering och vilka konsekvenser får detta?
 - o Hur förändras det svenska användarlandskapet, t.ex. som en följd av demografiska förändringar (pensioneringar, omförflyttningar etc.) eller andra strukturella förändringar? Är nya områden på fram-marsch medan andra är på tillbakagång?
- Hur bör RFI/VR agera för att satsningen på Max IV skall ge maximal avkastning för forskning som bedrivs i Sverige?

- Vad görs idag utomlands som i framtiden bör göras på Max IV (inom den idag finansierade strålrörsuppställningen)?
 - Kräver ett svenskt tillgodogörande av Max IV en specifik inriktning vad gäller framtida instrumentering av anläggning?
 - Vad kan/kommer kunna göras vid Max IV som vore unikt men som idag inte satsas tillräckligt på? Om dessa områden satsas på, kan då svenska användare tillgodogöra sig dessa på ett tillfredställande sätt?
- Hur skall svenska användarsamhället inom SR/FEL-området bäst koordineras/stimuleras så att RFI:s/Vetenskapsrådets satsningar ger maximal forskningsavkastning?
 - Är det praktiskt möjligt, och i så fall önskvärt, att på ett mer aktivt sätt samordna de svenska SR/FEL-användarna med neutronspridningsanvändarna (i ljuset av ESS)?
 - Bör Max IV ges ett speciellt ansvar för att långsiktigt bygga svensk kompetens inom SR/FEL-området.
 - Hur kan kunskapsöverföringen till svenska användare från den utländska expertisen aktiv vid Max IV stimuleras?

Vid beaktande av ovanstående frågor bör hänsyn tas ur flera perspektiv:

- Ett stort svenskt framtida användande av Max IV är önskvärt.
- Hur kommer ev. föreslagna förändringar av RFI:s finansieringsstrategi inom SR/FEL-området påverka den akademiska forskningen?
- Hur kommer samma förslag påverka den industriella användningen av dessa källor, främst av Max IV?
- Hur bör RFI/Vetenskapsrådet och Max IV förhålla sig till ESRF:s shut-down från slutet av 2018 fram till september 2020? (Detta är särskilt skyndsamt och skrivargruppen bör därför särskilt ta upp denna aspekt i sin rapportering till RFI i maj 2018.)

Vetenskapsrådet gör idag stora investeringar, i både uppbyggnad och drift av synkrotron- och frielektronlaserfaciliteter. De anläggningar som direktfinansieras är Max IV (Lund), ESRF (Grenoble, Frankrike), Petra III och European XFEL (båda i Hamburg, Tyskland). Den i särklass största satsningen görs mot det nationella Max IV-laboratoriet vid Lunds universitet.

Denna rapport är resultatet av en utredning som kartlägger den svenska forskningens behov av synkrotron- och frielektronlaserkällor för produktion av högkvalitativt röntgenljus, och undersöker om dagens finansieringsstrategier inom området är ändamålsenliga. Fyra nationella experter har genomfört utredningen och ger en tydlig översikt av området idag samt en rad konkreta råd och rekommendationer till RFI/ Vetenskapsrådet och andra aktörer inom fältet.

Vetenskapsrådet
Västra Järnvägsgatan 3
Box 1035, 101 38 Stockholm
Tel 08-546 44 000
vetenskapsradet@vr.se
vetenskapsrådet.se

Vetenskapsrådet har en ledande roll för att utveckla svensk forskning av högsta vetenskapliga kvalitet och bidrar därmed till samhällets utveckling. Utöver finansiering av forskning är myndigheten rådgivare till regeringen i forskningsrelaterade frågor och deltar aktivt i debatten för att skapa förståelse för den långsiktiga nyttan av forskningen.