

Keemilise ja Bioloogilise Füüsika Instituut

Arengustrateegia

2005 - 2015

Tallinn 2005

KBFI arengustrateegia

MISSIOON	3
VISIOON	3
STRUKTUUR	4
INSTITUUDI UURIMISTEMAATIKA JA RESSURSID	4
INSTITUUDI STRATEEGILISED UURIMISPROGRAMMID	4
1. <i>Elementaarosakeste füüsika</i>	4
2. <i>Tuuma magnetresonants</i>	5
3. <i>Uued spinnmaterjalid ja -olekud</i>	6
4. <i>Ioonjuhtivus ja katalüüs</i>	7
5. <i>Makromolekulaarsed vastasmõjud</i>	8
6. <i>Keskkonnakeemia</i>	9
7. <i>In vitro toksikoloogia ja 3R</i>	10
UUED PROGRAMMID	10
8. <i>Bioenergeetiline mittelineaarne fotoonika</i>	10
RESSURSID	11
1. <i>TMR keskus</i>	12
2. <i>Terahertssagedusala infrapunaspetskoopia</i>	12
3. <i>Mass-spektromeetria ja kromatograafia</i>	13
4. <i>Molekulaargeneetika laboratoorium</i>	14
5. <i>Mikroorganismide biotehnoloogia</i>	15
6. <i>Arvutuskeskus</i>	16
7. <i>Tugistruktuur</i>	16
INSTITUUDI SUHTED TEISTE ORGANISATSIOONIDEGA	18
RAHVUSVAHELISED TEADUSKESKUSED	18
EESTI TEADUSASUTUSED	18
EESTI RIIK	18
KÕRGTEHNOLOOGILISED FIRMAD	19
TÖÖJÕUD	19
PROGRAMMIDE KVANTITATIIVSETE NÄITAJATE KESKMISTATUD AASTAPROGNOOS	21
STRATEEGIA KOOSTAMISE PROTSESS JA MEETODID	23
SWOT ANALÜÜS	24

Missioon

KBFI on kutseline teadusasutus, kus teadlaste põhiliseks ülesandeks on akadeemilise vabaduse põhimõtteid väärtustav uurimistöö.

KBFI teostab alus- ja rakendusuuringuid ning tegeleb arendustegevusega materjaliteaduse, geeni- ja biotehnoloogia, keskkonnatehnoloogia ja informaatika uusimate teadussuundade alal.

KBFI aitab kaasa teadlaste uue põlvkonna ettevalmistamisele vastavalt assotsiatsiooni- ja muudele lepingutele ülikoolide ning teiste akadeemiliste asutustega.

Instituut tutvustab oma tööd regulaarselt teistes uurimis- ja õppeasutustes, erialakirjanduses, teaduskonverentsidel ning avalikus meedias.

Visioon

KBFI on integreeritud ja efektiivne teadusasutus, kus kõik töötajad tunnetavad oma vastutust ja võimalusi Instituudi eesmärkide teostamisel. KBFI reputatsioon põhineb kõrgetasemelisel uurimistööl, innovaatiliste teemade algatamisel ja kompetentsi ning teaduse infrastruktuuri arendamisel nii siseriikliku kui rahvusvahelise koostöö tarbeks. Instituudis teostatud kraadiõpe annab teadustöö juhtimiseks vajaliku kvalifikatsiooni.

Eesmärgid

1. Rahvusvaheliselt tunnustatud tasemel uurimistöö kõigi programmidega. Regionaalse ja Euroopa keskuse staatuse saavutamine vähemalt kahe programmiga.
2. Täita riikliku ekspertkeskuse ülesannet elementaarosakeste füüsika, analüütilise spektroskoopia, kvantkeemilise modelleerimise, funktsionaalsete materjalide ning keskkonnauuringute alal, pakkudes probleemide lahendamise võimalust kas oma ressurssidega või rahvusvahelises koostöös.
3. Regulaarne uute teadusprogrammide avamine ja ülikoolide kaasamine nendesse.
4. Griiditehnoloogia ja raadiospektroskoopia õppelaboratooriumite sisseseadmine.
5. Suurendada eraettevõtlusest ning rahvusvahelistest projektidest saadava finantseeringu osakaalu praeguselt kolmekümnelt viiekümne protsendini.

Struktuur

KBFI struktuuri moodustavad teaduslikud, administratiivsed ja majanduslikud allüksused. Teaduslike allüksuste hulka kuuluvad keemilise füüsika, molekulaargeneetika, bioenergeetika ja bioorgaanilise keemia laboratoorium. Laboratooriumid kannavad materiaalselt vastutust instituudi teadusliku infrastruktuuri eest. KBFI juhtorganiteks on seadusega sätestatud ülesannetega 19 liikmeline teadusnõukogu ja direktor, nõuandva organi rollis on rahvusvaheline nõuandev kogu. Instituudi konkreetne teadustöö on jagatud programmideks.

Instituudi uurimistemaatika ja ressursid.

1. Teadustöö juhendub KBFI seadusega sätestatud temaatikast, hõlmates riiklikke ja EL võtmevaldkondi, ning on reeglina integreeritud rahvusvahelisse ja Eesti sisesesse koöperatsiooni.
2. Teadustöö realiseerub uurimisprogrammide kaudu.
3. KBFI uurimisprogrammid integreerivad eri teadusvaldkondi ja on ka omavahel tihedalt seotud.
4. Reeglina katab iga programm loogilise tunnetuse, matemaatilise kirjeldamise ja tehniliste võimaluste loomise ning kasutamise ahela.
5. Uurimistemaatika loogika hõlmab praktiliselt kogu looduse organiseeruvuse hierarhia, luues eeldused tunnetuslikeks üldistusteks ja andes aluse detailuuringute objekti valikuks.
6. KBFI programmid teostuvad teadusliku infrastruktuuri abil, mis on asutusele eriomaselt kõigi programmide universaalses kasutuses.
7. Võrreldes ülikoolidel baseeruvate teadusasutustega, on KBFI programmid ulatuslikumad nii baas- ja rakendusuuringute kui ka interdistsiplinaarsuse osas.

Instituudi strateegilised uurimisprogrammid

1. Elementaarosakeste füüsika

Kaasaegse elementaarosakeste füüsika põhiküsimusteks on osakeste masside tekke- mehhanismi ja Universumi olekut määrava füüsika (sealhulgas tumeda aine ja energia) välja selgitamine. See füüsikaprogramm sisaldab nii teoreetilist uurimistööd kui ka arvukalt rahvusvahelisi osakestefüüsika ja kosmoloogia eksperimente. Instituudi strateegia elementaarosakeste füüsika vallas on tegutseda komplekselt uute teooriate välja töötamisel ja nende testimisel loodavates eksperimentides. Teoreetilise programmi läbitöötamiseks teevad KBFI teadurid aktiivset koostööd teoreetikutega

maailma eri asutustes. Eksperimentaalse osakestefüüsika vallas on KBFI Euroopa Tuumauuringute Keskuses (CERN) loodava uue põlvkonna kiirendi Large Hadron Collider (LHC) ühe eksperimendi Compact Muon Solenoid (CMS) liige. KBFI koordineerib Eesti teadlaste ja suveüliõpilaste tegevust CERNis. Eksperimentaalse osakestefüüsika spin-offiks on hajusarvutuskontseptsiooni Grid arendamine. KBFI osaleb Gridi arendamises nii Eestis kui Euroopas.

KBFI teostatavate teoreetiliste uuringute suund on fenomenoloogiline ja seotud osakestefüüsika eksperimentaalandmete olemasoluga. Hetkel ja lähitulevikus toimub tormiline areng eksperimentaalse neutriinofüüsika vallas ja kosmoloogias. Seepärast on KBFI töörühma uurimistemaatika seotud neutriinode masside mudelite väljatöötamisega ja nende sidumisega eksperimentaalandmetega. Neutriino massid võivad olla otseselt seotud ka Universumi arenguga vahetult peale suurt pauku. Universumi tekke ja eksistentsi aluste selgitamisel on põhiküsimuseks asümmeetriline materia teke, täpsemini, miks materiat on ligikaudu kümme suurusjärku rohkem kui antimateriat. Seda selgitatakse leptogeneesi abil, mille uuringutes KBFI osaleb. Samuti on KBFI teadlaste prioriteetseks uurimissuunaks Universumi inflatsiooni sidumine osakestefüüsika teooriaga.

KBFI teostatava eksperimentaalse osakestefüüsika eesmärk on leida uut füüsikat, mis täiendaks seniseid teadmisi. Kõige olulisemaks küsimuseks on uute spinnita osakeste, skalaarsete osakeste, leidmine. Need osakesed võivad anda masse sümmeetriate spontaanse rikkumise kaudu (Higgsi mehhanism), samuti on skalaarsed osakesed ainsad, mis võivad tekitada Universumi inflatsiooni või anda panust tumedasse energiasse. KBFI teadlased osalevad LHC CMSi eksperimendi ettevalmistamisel ja tulevikus ka selle töös. Selle töörühma füüsikaprogramm on otseselt seotud KBFI teadlaste teoreetiliste uuringutega. Kaugemas tulevikus on KBFI eksperimentaalse osakestefüüsika töörühmale eluliselt tähtis osaleda lineaarkiirendi eksperimentides.

LHC toodetud andmemahat nõuab uue infotehnoloogilise hajusarvutuskontseptsiooni Grid arendamist. KBFI teadlased panid aluse Eesti Gridi projektile ja osalevad Euroopa gridide projektides. KBFIle on strateegiliselt tähtis olulise arvutusressursi arendamine. Läbi arvutusressursside on osakestefüüsika seotud ka teiste KBFI teadussuundadega, mis samuti lahendavad arvutusmahukaid ülesandeid.

2. Tuuma magnetresonants

Tuuma magnetresonants (TMR) on magnetväljas tuumaspinni energianivoode vahe ülitäpsel mõõtmisel põhinev spektroskoopia. Spektri peenstruktuur sõltub lokaalsetest mõjutustest, mis on tekitatud nii keemilise sideme kui teiste tuumade poolt. Tänu tuuma ergastatud spinnolekute püsivusele on eksperimentaalselt võimalik väga ulatuslikult juhtida spinnide käitumist. TMR teooria annab väga paindlikud võimalused uuritava molekulaarse alamstruktuuri määramiseks ning selle mõõtmist vajavate parameetrite eksperimentaalselt kättesaadavaks tegemiseks.

Programm kasutab TMR unikaalset sobivust kvantmehhaanika ja sellel baseeruva informaatika põhimõtete uurimiseks. Tugeva magnetvälja tõttu eralduvad osaliselt spinn- ja reaalse kolmruumi mõju süsteemi evolutsioonile.

Programmis otsitakse ülevaatlikku ning ratsionaalset kirjeldust erinevate eksperimentaalse kontrolli all olevate mõjude, nagu kõrgsageduslikud magnetväljad

ning aine reorientatsioon, koostoime spinnsüsteemi olekule. Esimese viieaastase perioodi vältel fookuseerub uurimistöö tugevalt interakteeruva spinnsüsteemi kirjeldamisele nn. hüperrotatsiooni tingimustes, kus domineerivaks virtuaalseks vastasmõjukuks on aine mehhaaniline rotatsioon. Töö eesmärgiks on saada detailset informatsiooni vesiniku aatomite keemiliste sidemete ja konfiguratsiooni kohta. Teine alateema keskendub tuumade vastasmõjude anisotroopia ja molekulaarse struktuuri seoste leidmisele. Järgneval perioodil lisandub eksperimentaalsete parameetrite hulka kõrgsageduslike elektriväljade mõju analüüs ja mõõtmine.

Programmi teiseks osaks on TMR kui universaalse analüütilise meetodi kasutamine molekulaarsel tasemel informatsiooni saamisel bioloogias, keemias ja tahke keha füüsikas. Eesmärgiks on valkude liikuvuse ning vastasmõjude mõõtmine, pöörates tähelepanu tunneleerimise- ja kvantefektidele. Keemia fundamentaalküsimuste vallas toimub enantiomeeride, diastereoisomeeride ning teiste keeruliste molekulide struktuurianalüüs ja sünteesi arendamine ning kontroll. Tahke keha füüsika alal on programm tihedalt seotud teise, spinnmaterjalidele pühendatud strateegilise programmiga. Molekulaarbioloogias arendatakse välja membraani- ja transportvalkude struktuuri ja interaktsioonide uurimine. Koostöös haiglatega arendame raku metaboliitide täpsel mõõtmisel põhinevat diagnostikat.

Metodoloogilises plaanis täiustuvad TMR tehnika ja mõõtmisprotokollid, mida kohandatakse konkreetsete probleemide lahendamisel. Programm on oluline analüütiliste võimaluste täiendamisel praktiliselt kõigi teiste KBFI strateegiliste programmide ja instituudivälise koostöö jaoks.

Programmi käigus pidevalt arendatav ülikiire ja mitmeteljeline rotatsioonitehnika parandavad lahutusvõimet vesiniku tuumade süsteemides, luues eeldused hüperrotatsiooni eksperimendiks, ja kvadрупooltuumade puhul. Kvalitatiivselt uued võimalused on tekkimas nende tehnikate kohandamisel madalatele mõõtmistemperatuuridele. Kõrge lahutusvõimega ja tundlikud mõõtmised temperatuuridel 10K - 20K annavad universaalse võimaluse molekulaarsete vastasmõjude detailiseerimiseks ja tehnoloogiliste materjalide arendamiseks.

3. Uued spinnmaterjalid ja -olekud

Spinn on elementaarosakese fundamentaalne omadus, mida saab adekvaatselt kirjeldada ainult kvantmehhaanika reeglite abil. Vaatamata oma kvantiseloomule on spinnil praktiline tähtsus ja oluline tähendus tänapäeva materjaliteaduses. Näiteks kahe spinni vaheline vastasmõju mõjutab keemilise reaktsiooni käiku katalüsaatori pinnal. Suure hulga spinnide koosmõjul tekib püsिमagnet või magnetväljaga muudetav takistus elektrivoolule. On juba näidatud, et põhimõtteliselt on võimalik informatsiooni töödelda ja säilitada spinnseisundeid manipuleerides.

Uute spinnmaterjalide ja -olekute programmi eesmärk on fundamentaalsete füüsikanähtuste uurimine potentsiaalset kõrgtehnoloogilist rakendust omavates materjalides. Käesoleval ajal on nendeks ülijuhid, madalamõõdulised spinn- ja elektronsüsteemid, molekulaarmagnetid, nanotehnoloogial põhinevad elektrone ja spinne sisaldavad struktuurid ning katalüsaatoritena kasutatavad kristallid ja makromolekulid. Viimasel ajal on suurt huvi tekitanud madalatel temperatuuridel ja tugevas magnetväljas spinn-piluga ainetes tekkivad triplonite seisundid. Huvipakkuvad nendest on triplonite lokaliseerimisel tekkivad magneetuvuse

platood ja triplonite Bose-Einsteini kondensaat, aine seisund, mis on tuntud ülijuhtivusest, ülivoolavusest ja laseriga jahutatud aatomsüsteemidest.

Spinnmaterjale uuritakse KBFI-s terahertspektroskoopia (THS) ja tahke keha tuuma magnetresonantsi meetoditega, mis mõlemad täiendavad traditsioonilisi struktuuri uurimise meetodeid, milleks on röntgen- ja neutronhajumine. Uuritavate nähtuste kvantiseloom nõuab tugevate magnetväljade ja madalate temperatuuride kasutamist. Seejuures on tugevatel magnetväljadel kaks ülesannet. Esimene on aine mõjutamine energianivoode nihutamise ja uute olekute esilekutsumise kaudu. Teine on spektroskoopilise lahutuse suurendamine. TMR annab informatsiooni spinnide lähiümbruse ja dünaamika kohta, täiendades teisi meetodeid unikaalse aatomitasemel lahutusvõimega. THS mõõdab otseselt magnetiliste ja võnkeergastuste energiaspektrit ning omab paremat spektraalset lahutust kui neutronhajumine. THS annab teavet laengute dünaamika kohta ja on ainuke meetod ainete sagedusest sõltuva elektrijuhtivuse mõõtmiseks ülalpool 0.1THz. Perspektiivis otsime seoseid nii kõrgtemperatuurse kui tugevaid magnetvälju taluva ülijuhtivusega.

Foononergastuse ja laengukandjate optilise juhtivuse uurimiseks spinnmaterjalides on kavas laiendada spektroskoopiliste mõõtmiste ulatust raadiosageduste (TMR) ja terahertside (kauge infrapuna) alast lühemate lainepikkuste poole optilise Fourier spektrometria abil. Faasisiirete, magnetiliste ergastuste ja ülijuhtivuse uurimiseks on plaanis tugeva ülijuhtmagnetiga füüsikaliste omaduste mõõtmisüsteemi hankimine.

4. Ioonjuhtivus ja katalüüs

Looduse kõige lihtsam aatom, vesinik, on ka selle kõige olulisem osa. Happelisuus ja aluselisuus, keemia põhimõisted, on otseselt seotud vesiniku ionide kontsentratsiooniga. Vesiniku aatom on omapärane võime poolest asetuda polaarselt kahe molekulaarse sideme vahele, mis määrab väga olulisel määral näiteks valkude konformatsiooni ja vastasmõjud. Programm uurib vesiniku ja teiste ionide transporti, sellel baseeruvad biopolümeeride, kütuseelementide ja katalüsaatorite toimemehhanisme ja püüab leida ühiseid jooni prooton- ning ionjuhtivuses anorgaanilises, orgaanilises ja bioloogilises keskkonnas.

Programmi olulise osa moodustavad teoreetilised arvutused, mis viiakse läbi võre dünaamikat arvestades. Dünaamilise reaktsiooni koordinaadi meetodit kasutatakse protsessi simuleerimiseks, aktiveerides valikuliselt üksikuid süsteemi vabadusastmeid. Jälgides võre moode, saab ettekujutuse reaktsiooni dünaamikast. Süsteemi modaalse struktuuri iseloomustamine piki reaktsiooni trajektoori on suure vabadusastmete hulga tõttu väga mahukas arvutuslik ülesanne, mis eeldab ulatuslikult paralleliseeritud käsitlemist.

Arvutuste tulemusi võrreldakse eksperimentidega suure tehnoloogilise tähtsusega materjalidel. Programm uurib vesinikiooni liikuvust katalüütiliste tseoliitide tugevalt happelistes nn. Brønsted'i reaktsioonitsentrites ja tahketel oksiididel põhinevate kütuseelementide komponentides (katalüütilistes elektrootides ja ionjuhtides). Mitmed oksiidid, nagu perovskiidid, on leidnud rakendust samaaegselt nii kõrgtemperatuursete ülijuhtidena kui ka efektiivsete tahkete kütuseelementide katalüsaatoritena. Mõlemad ilmingud baseeruvad hapniku defekti keemial, luues

kõrgelt mobiilseid vakantse ja ionjuhtivust nii meso- ja makropoorsetes, amorfsetes kui ka plastilistes struktuurides.

Katalüütilise tsentri asukohta mikro ja mesopoorsetes (MM) alumosilikaatsetes materjalides määrab ära alumiiniumi aatom, mis asendab räni aatomit ränioksiidi tetraeedritest koosnevas mikropoori seinas. Selliste aktiivsete tsentrite jaotus ja võime seda jaotust mõjutada pakub nii rakendus- kui ka alusteaduslikku väljakutset. Alumiiniumoksiidi tetraeeder on ränioksiidi tetraeedrist natukene suurem ja tema n.ö. "ärapaigutamiseks" peavad teda ümbritsevad ränitetraeedrid oma asetust veidikene muutma. Kui kaugelt selline häiritus ulatub? Kas häirituse ulatus sõltub struktuurist? Kuidas on paigutatud alumiiniumi aatomid? Vastused neile küsimustele annaksid võimaluse alumiiniumi aatomite kontrollitud paigutamiseks mikropoori seintesse, samuti ka erinevaid struktuure moodustada. Erilist huvi pakuvad kiled, mida saab edukalt rakendada erinevate sensorite väljatöötamisel. MM kiledel põhinevad sensorid on projekti üheks rakenduslikuks väljundiks.

5. Makromolekulaarsed vastasmõjud

Kui kõrge energia füüsika üritab mõista maailmaruumi teket kõige fundamentaalsemal tasemel, siis bioorgaaniline keemia tegeleb eluslooduse molekulaarsete aluste väljaselgitamise ning mõistmisega.

Rakuprotsesside toimumine ning regulatsioon tugineb bioaktiivsete molekulide vastastikusele äratundmisele, seostumisele ning koostoimele. Need protsessid on määratud fundamentaalsete vastasmõjudega (interaktsioonidega) rakule eriomases biomolekulidega tihedalt asustatud keskkonnas. Sellest tulenevad baasinteraktsioonide mittetraditsioonilised avaldusvormid, mille mõistmisele bioloogilistes ning biokeemilistes süsteemides on suunatud tähelepanuväärne osa rahvusvahelisest teaduslikust uurimiskoostööst.

Uurimistöö eesmärk on nende vastasmõjude mõistmine ning ennustusjõuline kirjeldamine, ühendades eksperimentaalsed uuringud vastavate protsesside teoreetilise modelleerimisega, mis tugineb struktuursetel andmetel.

Uuritakse proteoomika seisukohalt oluliste molekulaarse äratundmise ning kompleksimoodustumise põhiprintsiipe süsteemides: valk-valk, valk-DNA, valk-rakumembraan, valk-bioaktiivne peptiid, valk-madalmolekulaarne ligand.

Tähtsal kohal neis uuringutes on uute katalüütiliste, geeniregulatsiooni mõjutavate, meditsiinilises diagnostikas kasutatavate ning farmakoloogiliselt aktiivsete ühendite otsimine, eraldamine looduslikest allikatest ning nende igakülgne biokeemiline iseloomustamine.

Oodatavad tulemused on fundamentaalse iseloomuga, sest nad aitavad mõista valkude ja teiste signaalmolekulide molekulaarse äratundmise mehhanisme nii normis kui patoloogias. Uurimuste praktilise tähtsuse tagab uuritavate valkude potentsiaalne roll tänapäeva aktuaalsete terviseprobleemide mõistmisel ja lahendamisel – vähk, neurodegeneratiivsed ja südamel ning veresoonkonna haigused. Biomakromolekulide struktuuri ja funktsiooni vaheliste seaduspärasuste tundmine on vajalik meditsiinis ja

farmakoloogias (teadmistepõhine “knowledge based” uute ravimite ja diagnostikute disainimine) ning on abiks bioaktiivsete ainete sünteesil.

6. Keskkonnakeemia

KBFI tähtsaks avalikuks funktsiooniks on rahvusvaheliselt usaldusväärsed ja poliitiliselt sõltumatud keskkonnauuringud. Eesmärgiks on nii Eestis kui globaalselt uudsetena esile kerkivate toidu- ja keskkonnaprobleemide teaduslik lahtimõtestamine, muutuste ökoloogilise ja terviseriski hindamine, innovatiivsete meetodite rakendamine toidu- ja keskkonnakeemias, rakenduslike analüüsimeetodite usaldusväärtsuse hindamine, loodusressursside uute kasutusvõimaluste leidmine.

Programm jaguneb lokaalses mastaabis kaheks põhiliseks alajaotuseks, neist esimese prioriteediks on atmosfäärse õhu kvaliteet ja seda mõjutavad protsessid ja faktorid: aerosooli osakeste kui tahkete maatriksite iseloom ja koostis ja nendele maatriksitele kinnistunud keemilised saasteained. Siin on eesmärgiks identifitseerida ja klassifitseerida peamised atmosfäärse õhu saasteallikad ning teha teaduslikult põhjendatud ettepanekud õhusaaste vähendamiseks. Teiseks oluliseks uurimissuunaks on põlevkivitööstuse ja energeetika tahkete jäätmete keskkonnaohtlikkuse hindamine ja selle vähendamise võimaluste leidmine. Kõrvuti keskkonnaohutusealaste uuringutega planeeritakse töötada välja meetod ohtlike ainete eraldamiseks põlevkivi töötlemisel tahketest jäätmetest, et leida sobiv ja majanduslikult efektiivne jäätmete kasutamise ja keskkonna puhastamise viis. Eesmärgiks on määrata saasteainete ja hapniku ringlust reguleerivate protsesside suund ja ulatus nii kohalikus (põlevkivitööstus ja energeetika), regionaalses kui ka laiemas kontekstis.

Hapnik on üllatuslikult ainus loodusvara, mille tekke ja tarbimise kohta puuduvad igasugune regulaarne arvestus, aruandlus ja statistika. Vajalik on jätkata üldsuse tähelepanu pööramist hapniku probleemile, alustada süstemaatilisi rahvusvahelisi fundamentaalteaduslike ja rakenduslike õhuhapniku tarbimist ja taastootmist puudutavaid uuringuid ning hapniku tarbimise ajaliste muutuste hindamist. Programmi eesmärkideks on alustada adekvaatsete uurimismeetodite väljatöötamist, sealhulgas kivimite ja muude materjalide hapniku sorbeerimise kineetiliste konstantide määramist ja vaba hapniku tekkimise protsesside uurimist vee raadiolüüsi toimetel.

Eesti alamordoviitsiumi Tremadoci vanusega graptoliitse argilliidi, tuntud ka kui diktüoneemakilt, hulk on tohutu – üle 60 miljardi tonni, mis ületab paljukordselt pruuni põlevkivi (kukersiidi) varud. On teada, et maapõuest maapinnale toodud ja purustatud diktüoneemakilt läheb kokkupuutel õhuhapniku ja veega teatud tingimustel ise põlema, reostades oma laguproduktidega ümbritsevat õhku, pinnast ja vett. Programmi eesmärgiks on diktüoneemakilda jt. põlevkivide keskkonnaohtlikkuse uurimine koos saasteainete (uraan jt. metallid) ringlusest ja isesüttimisest tingitud laguproduktide keemilise analüüsiga, pöörates erilist tähelepanu hapniku ringlusega seotud probleemidele.

7. In vitro toksikoloogia ja 3R

3R strateegia (reduction, replacement, refinement) on kogu maailmas tunnustatud ja EL prioriteetne strateegiline suund loomkatsete osakaalu vähendamisele nii teadusuuringuis kui seadusandlusega sätestatud uuringuis (ravimi-, toidulisandite, kosmeetikatoodete ohutuse hindamine). Täiesti uudse momendina tuleb sisse keskkonna terviseriskide kombineeritud hindamine, mis lisab keemilistele analüüsimeetoditele, tihti mittepiisavalt informatiivsetele, ka bioloogilise hindamise kasutades selleks nii looduslikke kui rekombinantseid modifitseeritud biosensoreid.

Kuna enamiku kemikaalide toksilisus on seotud nende kahjuliku mõjuga rakumembraanidele ja basaalainevahetusprotsessidele, siis on *in vitro* testid (mille hulka klassifitseeruvad ka uuringud bakterite, algloomade ja selgrootutega) piisava ennustusjõuga loomkatsetele eelnevates etappides. QSAR (kvantitatiivsed struktuuri ja aktiivsuse seosed) modelleerimine (molekuli struktuuri programmeeritud toksilisuse lahti mõtestamine *in silico*) on sageli piisavalt ennustav ja aitab samuti kaasa 3R strateegia ellu viimisele. Samas on tööstusliku tootmismahitudeni jõudnud kemikaalid ja materjalid (sh. nanoosakesed ja nanomaterjalid), mis käituvad oma väiksusest tingitud erinevate füüsikaliste omaduste tõttu tavakemikaalidest totaalset erinevalt ega võimalda ennustada nende toksilisust pelgalt *in silico*.

Teema eesmärkideks on uurida raku homöostaasi ja stressi-vastuseid molekulaarsel tasemel, selgitada välja erinevate kemikaalide toksilisuse mehhanisme, toksikantide liikuvust keskkonnas (sorptsioon, desorptsioon, lahustuvus, komplekseerumine jne) ning bioloogilist kättesaadavust (võimet läbida rakumembraani ja siseneda bioloogilisse aineringsse).

Uued programmid.

KBFI strateegia üheks oluliseks komponendiks on uute teemade alustamine. Arvestades reaalseid ressursse, toimub innovatiivsete programmide tekitamine esimese 5 aastase perioodi jooksul reeglina eksisteerivate teemade kvalitatiivsel täiendamisel.

8. Bioenergeetiline mittelineaarne fotoonika

Looduse organiseerumise üheks terviklikuks astmeks on rakk, mille tegevuse fundamentaalseteks ja füüsikaliste meetoditega kirjelduvateks protsessideks on energeetika ja metabolism.

Programmi käigus uuritakse täpsemalt järgmisi rakuenergeetika probleeme:

- 1) Adeniinnukleotiidide kompartmentatsioon;
- 2) Funktsionaalse sidestamise nähtus ning substraatide otsene ülekande ensüümide vahel multiensüümkompleksides (kreatiinkinaasi võrgustik);
- 3) Rakusiseste difusioonitakistuste kvantitatiivne määramine ja kompartmentaliseeritud energiaülekanne südamelihase rakkudes.

Nende kolme põhilise rakuenergeetika fenomeni uurimiseks kasutatakse kaasaegseid spektroskoopilisi meetodeid (konfokaalmikroskoopia, fluorestsents-resonants energiaülekanne (FRET), luminescentsmikroskoopia jne) ja raku- ning molekulaarbioloogia meetodeid. Eksperimentaalsete uuringute tulemuste alusel arendatakse edasi rakkude bioenergeetika kvantitatiivne matemaatiline mudel, mis võimaldab osaleda ka ülemaailmses nn. Füsioomi programmis. Meie rakenduslikuks eesmärgiks on saadud informatsiooni kasutamine südame ja närvisüsteemi haiguste patogeensete mehhanismide uurimiseks.

Raku bioloogia uurimise võtmemeetoditeks on seni olnud geelelektroforees, kromatograafia ning mittekoherentne mikroskoopia. Nihkumine staatiliselt kirjeldamiselt süsteemse mõistmiseni vajab aga kvalitatiivselt uusi vahendeid, mis suudaksid näiteks jälgida üksikute valkude tegevust, samuti kogu genoomi aktiivsuse dünaamikat. Molekulaarbioloogia edasine areng hakkab juba lähitulevikus kriitiliselt sõltuma füüsikaliste meetodite abist valkude interaktsiooni jälgimisel *in vivo*. Uue programmi esimeseks eesmärgiks on samuti RNA ja proteiinide reaajas detekteerimine, eriti aga valkude vastasmõjude suhtes tundliku spektroskoopia meetodite arendamine.

Bioloogiliste süsteemide visualiseerimine raku ja organelli tasandil reaajas *in vivo*, kudesid kahjustamata (rakkude jagunemist takistamata ja mürgitavaid radikaale tekitamata) on võimalik mittelineaarse optika meetodeid, täpsemalt kahe- või kolmefotoonset mikroskoopiat, kasutades. Võrreldes konfokaalse mikroskoopiaga on meetodi eelisteks ka ergastamiseks kasutatava lähedase infrapunase valguse (800 – 1100 nm) väiksem hajumine ja seega suurem sissetungimise sügavus, ning väljaspool fookust asuvate kudede fluorestsentsi puudumine, kuna ühe footoni energiast ei piisa luminescentsi ergastamiseks. Mainitud meetod areneb kaasajal kiiresti, leides kasutamist neurofüsioloogias (neuronite kasvu jälgimisel ja suunamisel), vähidiagnostikas, geenitehnoloogias jne.

Lisaks biopolümeeride loomulikule fluorestsentsile on kavas kasutada ka kvantpunkte, kuna nende elektronseisund ja fluorestsents on väga tundlikud ümbruskonna suhtes. Valkudevahelise interaktsiooni detekteerimist võib veelgi suurendada kvantpunkti spektraalanalüüs magnetväljas.

Ressursid

Finantseerimine.

Teadusstrateegias kavandatud teemade täitmiseks ja infrastruktuuri arendamiseks kasutatakse nii siseriiklikke kui rahvusvahelisi teadus- ja arendustegevuse finantsinstrumente ja projekte. Pidevalt otsitakse uusi teaduse toetamise programme. KBFI taotleb ka riiklikku eelarvet administratiivsete ja infrastruktuuri toetavate vajaduste katteks vastavalt avalik-õigusliku juriidilise asutuse staatusele. Lähima 2-5 aasta investeeringute põhilisteks allikateks on kavandatud riiklikud tippkeskuste ja üldine teadus- ning arendustegevuse infrastruktuuri arendamise programmid.

Teadus- ja arendustegevuse infrastruktuur

KBFI oluline eripära võrreldes teiste Eesti teadusasutustega on universaalse iseloomuga ning üldkasutatava eksperimentaalse teaduse infrastruktuuri toetamine ja arendamine. Infrastruktuur on kasutatav programmide poolt vastavalt vajadusele ning programmide abiga ka pidevalt täienev. Infrastruktuuri areng toimub tihedas tagasisides probleemi ja eksperimenditehnika vahel, pidev täiustamine ning komplekssus tagavad ka rahvusvahelisel tasemel tähtsuse ning kvaliteedi.

1. TMR keskus.

Keskuses on hetkel 4 spektromeetrit 4.7 kuni 14.1 T magnetitega ja mitmekesine valik andureid. Kõige märkimisväärsemad ja unikaalsemad on keemilise füüsika laboratooriumis arendatud ja ehitatud tahkete ainete uurimise mõõtepead, mis tagavad kõrge lahutusvõime uuritava objekti kiire mehhaanilise rotatsiooni abil. Rekordiliste pöörlemissagedustega kuni 70 kHz, sealhulgas kuni 40 kHz krüogeensetel temperatuuridel alla 20K, ollakse selle ala arengu liider maailmas. Unikaalsed on ka 1MHz/s rotatsioonikiiruse muutmist ja objekti mitmekordset, erinevate telgede ümber pöörmist võimaldavad mõõtepead. Viimase opereerimiseks on välja töötatud täielikult automatiseeritud juhtimissüsteem.

Keskuse tehnilised võimalused leiavad tänu unikaalsusele sagedast kasutamist külalisteadlaste poolt. Lisaks paljudele kahepoolsetele uurimisprojektidele osaleb keskus ka kolmes FP6 projektis, I3 "EuroMagNet", STREP "Valkude agregatsiooni ja konformatsiooni uurimine TMR-i abil" ning Euroopa kõrge magnetvälja keskuste võrgustik. Lisaks sellele teeb keskus koostööd ka Ameerika Ühendriikide ning Jaapani magnetlaboratooriumitega.

Tuleviku strateegia hõlmab praeguste TMR spektromeetrite elektroonika uuendusi ja uue, 800 MHz spektromeetriga varustatud vibratsioonivaba laboratooriumi ehitamist. TMR mõõtmisi täiendatakse numbriliste struktuuri ja dünaamika arvutustega. Keskus jätkab tahke keha mõõtepeade tehnoloogia arendamist ja laiendab võimalikke TMR-i rakendusalasid. Eriline rõhuasetus on pandud mõõtmistele madalatel temperatuuridel, mis on olulised katalüütiliste ja prootoni transpordi protsesside uurimisel.

2. Terahertssagedusala infrapunaspetskoopia

Kauge infrapunaspetskoopia katab terahertssageduste ala, ühendades mikrolainete ala spektri infrapunase piirkonnaga. TeslaFIR spektromeeter on automatiseeritud mõõtesüsteem, mis võimaldab tugevates magnetväljades polarisatsioonitundlikku spektrite mõõtmist energiavahemikus 2 cm^{-1} kuni 250 cm^{-1} (0.06 THz kuni 8 THz). Valgusallikaks on elavhõbe-kaarlamp polariseerivas (Martin-Puplett'i tüüpi) interferomeetris SPS-200 (Sciencetech Inc, London, Ontario), detektoriteks on kaks tundlikku 0.3K töötemperatuuriga bolomeetrit. Tegemist on unikaalse seadmega, kus suur tundlikkus väikestel energiatel on kombineeritud tugevate magnetväljade ja madalate temperatuuridega. Objekte saab jahutada temperatuurini 2.0K magnetväljas kuni 12T. Optilist läbilaskvust saab mõõta nii Faraday kui Voigt'i konfiguratsioonis; peegeldusspektrite mõõtmiseks on olemas erimõõtepea. Arvuti kontrollib objektide

vahetust, objekti temperatuuri, objektile langeva valguse polarisatsiooni ja väljatugevust ülijuhtivas magnetis. Lisaks võib objekti jahutamiseks millikelvintemperatuuridele kasutada He^3/He^4 lahustumiskrüostaati.

Terahertsspektroskoopia abil uuritakse kvantfaasisiirdeid, spinnfluktuatsioone ja spinn-spinn vastasmõjusid madalamõõdulistes spinnsüsteemides, näiteks spinnpilu omavates kristallides või geomeetrilise frustratsiooniga ainetes ning molekulaarmagnetites.

Terahertsspektroskoopia laboratoorium KBFI-s on üks väga vähestest kohtadest maailmas, kus on võimalik terahertsi piirkonna spektrite mõõtmine tugevates magnetväljades tundlike 0.3K juures toimivate bolomeetritega. Laboratoorium osaleb Euroopa teaduse ja tehnika alase koostöövõrgu COST projektis P16 “Korreleeritud aines ilmnevad omadused” ja Euroopa Füüsikauhingu programmis “Tugevalt frustreeritud magnetism”. Laboratooriumil on arenenud teaduslik koostöö McMasteri Ülikooliga Kanadas, Max-Plancki tahke keha füüsika instituudiga Stuttgartis, Stuttgarti Ülikooliga, Belli laboratooriumitega, Kyoto Ülikooliga ning kõrgete magnetväljade laboratooriumitega Tallahassee, Dresdenis ja Nijmegenis. Kanada firmaga Sciencetech Inc. on sõlmitud koostöökokkulepe tarkvara arendamiseks nende terahertsi piirkonna Martin-Pupletti tüüpi interferomeetri tarvis.

Tavaliselt üksteisest sõltumatud laengu-, spinni- ja võrevõnkumiste vabadusastmed on keerukates materjalides omavahel seotud. Vabadusastmete seotuse tõttu saab keerukate materjalide omadusi muuta elektri- või magnetväljaga, mis teeb nad tehnoloogiliselt oluliseks. Võrevõnkumised ulatuvad kuni 1000 cm^{-1} ja elektroonsed ergastused veelgi kõrgemate sagedusteni. Olemasolev väga kauge infrapunase piirkonna spektromeeter katab ära magnetiliste ergastuste spektriala, kuid võrevõnkumiste ja elektroonsete ergastuste uuringud on piiratud.

Laboratooriumi sisseseadet on kavas uuendada Fourier spektromeetriga, mille tööpiirkond algab olemasoleva spektromeetri tööpiirkonnast ja ulatub ultravioletini. Nii laias spektripiirkonnas saadud informatsiooni ühildamine tuuma magnetresonantsi poolt saadud teabega aatomite lokaalse ümbruse kohta võimaldab oluliselt paremini ja efektiivsemalt mõista kaasaegsetes keerukates materjalides ilmnevaid kvantnähtusi. Koos tuuma magnetresonantsi rühmaga planeerime ka uue, materjalide füüsikaliste omaduste, mõõtmisüsteemi sisseseadmist, mis võimaldab magnetilise vastuvõtlikkuse ja soojusmahtuvuse mõõtmist kuni 16 Tesla tugevustes magnetväljades erinevatel temperatuuridel ning tuuma magnetresonantsi katseid *muudetavas* magnetväljas.

3. Mass-spektromeetria ja kromatograafia.

Keemilise füüsika laboratooriumis ehitatud lineaarne MALDI TOF spektromeeter võimaldab väga stabiilset ja usaldusväärset detektsiooni erakordse ulatusega piirkonnas 100-1,000,000 lahutusega kuni 2500. Täiustatud 12000list massilahutust on võimalik saavutada teise originaalse, reflektron-tüüpi võreta MALDI TOF spektromeetriga.

Standardvarustuses on PE 200 seeria HP vedelik-kromatograaf koos diodkaskaad spektrofotomeetriga, API 150 EX mass spektromeeter, LDS fluoromonitor III ja Yanagimoto R 203 refraktomeeter koos PCX 5100 kolonni järgse

reaktsioonimooduliga (Pickering Laboratories), eksimeerlaserid ELI 94 ja PSX-100, värvilaser VIL-5. Keskuses on ka originaalse rakusisese MALDI allikaga FTICR mass-spektromeeter CMS-47.

Originaalsete mass-spektromeetrite robustne konstruktsioon hoiab ära raskused ja vead, mis on iseloomulikud keerulistele tööstuslikult saadavatele seadmetele. Seetõttu on keskus kujunenud populaarseks ja operatiivseks biokeemiliste ja keemiliste analüüside tegijaks nii instituudisiseselt kui ka mujal Eestis.

Tuleviku strateegia tuleneb rahvuslike ja rahvusvaheliste koostööprojektide sisust, sealhulgas riikliku tähtsusega rakendusuuringute nõuetest. Konkreetsete rakendused toidu ja keskkonna saasteainete määramisel, biomakromolekulide analüüsil, polüamiidoamiinsete (PAMAM) dendrimeeride sünteesil eeldavad ulatuslikku ja spetsiifilist uurimis- ja arendustööd erinevate ionisatsiooniprotsesside, MALDI plasma, selle dünaamika, analüütide ionisatsioonimehhanismide, ensüümide aluste mõju ja peptiidifragmentide tekke juures.

Mass-spektromeetrilise aparatuuri areng keskendub pehmete ionisatsioonimeetodite uurimisele ja kohandamisele aktuaalsete teadusprobleemide lahendamiseks. Esimesel viiel aastal keskendutakse peamiselt prootoni transpordile biokeemias, katalüüsis ja kütuseelementides.

Kromatograafiliste instrumentide areng keskendub uutele, ülikõrge rõhu all toimivatele, eraldamistehnikatele ja meediale.

Baas-seadmetest on kavas soetada universaalne, atmosfääri rõhult sisendiga, kvadрупoolse massifiltri ning ortogonaalse lennuaja massianalüsaatoriga spektromeeter, ülikõrgel rõhul töötav kromatograaf ja spektrofluoromeeter.

4. Molekulaargeneetika laboratoorium.

Laboratoorium on sisustatud mikrobioloogia, rakubioloogia ja molekulaarbioloogia alaseks uurimistööks, võimaldades koekultuuride, mikroorganismide, laboratoorsete väikeloomade ja taimede kasvatamist. Laboris on loomisel kaasaegse uurimistöö nõuetele vastavad tingimused mikrobioloogia, koekultuuri, taimede ja mikrovetikate kultiveerimiseks. Hiljuti valminud väikeloomade vivaarium on kõige kaasaegsem Eestis, vastates kõigile rahvuslikele ja rahvusvahelistele standarditele. 110 m² loomaruum on varustatud HEPA filtritega ning täpse temperatuuri ja niiskuskontrolliga. Vivaariumi täiendab mikroinjektsioonisüsteem transgeensete loomade ettevalmistamiseks.

Laboratoorne baasaparatuur võimaldab uurida rakke nii raku kui ka rakusisesel tasandil. Laboris on olemas spektrofotomeetrid, luminomeetrid, fluoromeeter, kaalud, tsentrifuugid, pH-meetrid, loksutid, inkubaatorid, mikroskoobid, aparatuur DNA analüüsiks, horisontaalseks ja vertikaalseks elektroforeesiks.

Rahvusvahelises koostöös osalemine toimub läbi Euroopa Liidu raamprogrammide ning Wellcome Trust'i ja Howard Hughes Medical Institute'i uurimisgrantidega. Väga tulemuslikult toimib ka kahepoolne koostöö Karolinska Instituudi ja Helsingi Ülikooli Biotehnoloogia Instituudiga.

Laboratooriumi tulevikustrateegia näeb ette optiliste ja raadiospektroskoopiliste tomograafiameetodite kasutuselevõtu loomade säästlikuks ja efektiivseks jälgimiseks.

5. Mikroorganismide biotehnoloogia

Mikroorganisme rakendatakse tänapäeval laialdaselt nii tööstuses kui teadusuuringutes kui "rakulisi vabrikuid" (ingl. k. *cell factories*), mis on võimelised tootma unikaalseid elusaine molekule väga suurtes kogustes. Traditsiooniliselt on mikroobide biotehnoloogia grupis (BG) arendatud sellist uurimistööd, mis aitaks mõista rakkudes toimuvaid protsesse süsteemiteooria seisukohalt ning võimaldaksid üha täiuslikumalt kirjeldada rakkude kasvu kvantitatiivsel tasemel. Sellise kvantitatiivse süsteemse lähenemise üheks väljundiks on BG-s välja töötatud uued efektiivsed kultiveerimistehnoloogiad (A-stat, μ -stat fed-batch, adaptat jt.) ning matemaatilised mudelid, mis seovad rakusisese metabolismi makroskoopiliste kasvuparameetritega. Lisaks on välja arendatud automatiseeritud arvuti juhtimisel töötavad fermentatsiooni süsteemid, mis on originaalsed nii tarkvara, elektroonika kui ka mehaanika poolest. Selline tehnoloogiate ja meetodite kompleks omakorda on võimaldanud lülituda erinevatesse rahvusvahelistesse koostööprogrammidesse tänu kogemustele stabiilsete isotoopidega märgistatud mikroobse biomassi ja rekombinantsete valkude/peptiidide biosünteesil.

Edaspidistes uurimistöödes on kavas rakusiseste protsesside ja parameetrite (geenide ja valkude/võtmeensüümide regulatsioon ja tase) eksperimentaalne iseloomustamine, kasutades väga erinevaid uurimismeetodeid (2D-elektroforees, TMR, MS, microarray) ning sidumine matemaatilise mudeli ja makroskoopiliste kasvuparameetritega, laiendades uurimisvaldkonda eukariootsetele rakkudele. Selle tulemiks on metodoloogiline-tehnoloogiline kompleks, mis võimaldab määrata biotehnoloogilist huvi pakkuvate rakuliinide põhikarakteristikud, ning tegema *what-if* tüüpi totaalseid protsessi analüüse, kus varieeritavateks suurusteks oleksid nii rakusisesed kui ka makroskoopilised kasvuparameetrid.

Meie eesmärgiks seostada eksperimentaalsel tasemel makroskoopiliselt mõõdetavad kasvuparameetrid rakus toimivate protsessidega (erinevate geenide ja valkude regulatsioon). Selleks on abiks ka BG-s välja töötatud metabolismi ja makroskoopilisi kasvuparameetrid siduv matemaatiline mudel. Ühtsesse võrrandite süsteemi seostuvad sellised parameetrid nagu näiteks üheltpoolt protsessi väljundparameetrid: kasvu kiirus, saagikus, isotoopne märgistus konkreetse valgu erinevates aatomites, kogu protsessi (füsioloogiline) võimalikkus ja maksumus ning teiselt poolt sisendparameetritena (väga kallite isotoopselt märgistatud) substraatide valik ja omavaheline suhe, rakuliini ja plasmidi (partner- ja reportervalkude) valik, etteantud kasvutingimused (temperatuur, pH, pO₂) jm.

Meie uurimismetoodika rakendamise prognoositavaks tulemiks oleks metodoloogia loomine, mis võimaldab efektiivselt ja süsteemselt iseloomustada konkreetset

huvipakkuvat rakuliini ning anda soovitusel kultiveerimise ja biosünteesiga seostuvate probleemide lahendamiseks ja protsessi efektiivsuse tõstmiseks.

Programm seostub bioenergeetika, toksikoloogia ja makromolekulaarsete vastasmõjude uurimisega ning on baasiks TMR poolt uuritavate valkude märgistamisel.

6. Arvutuskeskus

Keskuse peamine eesmärk on tagada kõigile KBFI programmidele kaasaegne arvutusvõimsus, üldkasutatavate pakettide (nt. Gaussian) hooldus ja andmete hoiustamine. Keskus võimaldab LHC CMS andmete analüüsi ja modelleerimist elementaarosakeste füüsika grupi poolt, kujutise töötlemist TMR tomograafias jne. Välisühenduste protokollide aluseks on nn. GRID tehnoloogia, mis lisaks andmete jagamisele annab ka arvutusvõimsuse jagamise. Arvutuskeskus saab olema ka oluliseks testiks arendamaks Grid-põhinevat ärirakendust Eesti firmades (MicroLink, Egeen, Diagnostikakeskus).

Keskuses on praegu sümmeetriline 16 protsessoriline SGI Origin ja 8 duaalse Xeon protsessori klaster, mis on ühendatud Myrinet-2000 abil, väline andmevahetus on toetatud 1 Gb/s võrguühendusega GRID-ühilduva andmeanalüüsi jaoks. Keskus toetab tarkvara pakette Gaussian 03, POLYRATE and MOPAC 2002, mis on täiendatud keemilise füüsika laboratooriumis arendatud reaktsiooni dünaamika mooduliga kvantkeemilisteks arvutusteks.

Tulevikustrateegia näeb ette GRID-võrgustikuga ühilduva universaalse arvutusvõimsuse tekke, mis põhineb ca viiekümnel 64 bitisel protsessoril 10 Tb mäluga, välisühendus on tagatud 2 x 24 port optiliste Gbit sisend-väljunditega.

7. Tugistruktuur.

Tugistruktuur kindlustab vajaliku laboratoorse abi ja hoolduse kõikidele programmidele. See võimaldab klaasi ja keraamika töötlust ning arendustööd elektroonika ja peenmehhaanika alal. Seadmeпарк sisaldab 2,5-5 mikromeetrise täpsusega digitaalseid lihvi- ja freespinke, tsentrifugaal- ja isostaatilisi presse, kõrgetemperatuuriseid (kuni 1600C) ahjusid, roostevaba metalli keevitust, ülipuhtaid kindakappe, dünaamilist mikrotasakaalustamise pinki. Projekteerimis-töödeks kasutatakse AutoCad ja Ashlar Vellum CAD tööjaamu.

Mehhaanika- ja elektroonikatöökoda võimaldab väga suurt täpsust nõudvate originaalsete TMR mõõtepeade konstrueerimist.

Heeliumijaam kindlustab operatiivse, kvaliteetse ja ökonoomse varustatuse vedela ja gaasilise lämmastiku ning heeliumiga, gaasilise heeliumi kogumise, heeliumi veeldamise (CTI 1410, 20L/h) ning puhastamise pikaajaliste eksperimentide läbiviimiseks. TMR mehhaanilise pöörlemisega mõõtepead varustatakse suruõhuga

AtlasCopco õlivaba kompressori abil. Eriti kuiv gaas genereeritakse kõrgerõhuliste lämmastikuaaurustite (AirLiquide, 16 bar) abil.

Struktuuri edasine areng näeb ette automaatjuhtimise kasutuselevõtu ja täpsusklassi tõstmise 1 mikromeetrini mehhaanikatöökojas, keraamika töötlemise võimaluste loomise 1 mm suuruste detailide jaoks, heeliumi kogumise ning veeldamise süsteemi automatiseerimise. Elektroonikas toimub multiresonantsete magnet- ja elektriväljade sageduspiirkonna laienemine kuni 3 gigahertsini.

Instituudi suhted teiste organisatsioonidega

Rahvusvahelised teaduskeskused

KBFI teaduskooperatsiooni prioriteet on pariteetne koostöö parimate rahvusvaheliste keskustega, lähtudes teadustöö rahvusvahelise integratsiooni ja jaotuvuse põhimõttest. Eesmärgiks on kaasaegsete eksperimentaalsete võimaluste ja parimal tasemel ekspertiisi kaasamine ning osalemine nende edasisel arendamisel. Lähtudes oma staatusest arendab KBFI välja koostöövõrgustiku kutseliste teadusorganisatsioonidega, nende hulgas CERN'i, Max Plancki Ühingu, Rutherford Appletoni ja Ameerika Ühendriikide rahvuslike laboratooriumitega ning sõlmib vastava profiiliga strateegilise koostöö lepingud.

Eesti teadusasutused

KBFI infrastruktuur moodustab osa Eesti teadusmaastikust. Professionaalne teadusalane ekspertiis ja pidev arendustöö tagavad tipptasemel tehnika oma valdkonnas. KBFI autonoomne staatus annab selle kasutamiseks optimaalse võimaluse kõigil teistel teadusasutustel. KBFI võimaldab läbi viia kraadiõppurite teadustööd, KBFI seminarid on reaalajas ülekantavad teistele temaatiliselt lähedastele uurimisrühmadele.

Eesti riik

KBFI teeb koostööd Eesti Akrediteerimiskeskusega ja teostab vastavalt vajadusele raadiospektroskoopilisi, kromatograafilisi ja geneetilisi analüüse ministeeriumitele ja ametitele. Eesmärgiks on ühelt poolt tagada vajalik kompetents ja sõltumatus nn. kolmanda osapoolena laborianalüüsi juriidilistes aspektides, teiselt poolt on oluline vältida ressursside dubleerimist ametkondlikes laboratooriumites.

KBFI osaleb aktiivselt Eesti riigile oluliste teaduspõhiste programmide ja ülesannete teostamisel ja ekspertiisil. KBFI baasil tegutseb Analüütilise Spektrometria Tippkeskus. KBFI tegutsevad GMO laboratoorium, transgeensete väkeloomade vivaarium ning kromatograafia taustlaboratoorium on riiklikult atesteeritud, rahvusvaheliselt on tunnustatud ökotoksikoloogiliste uuringute alane ekspertiis .

Kõrgtehnoloogilised firmad.

KBFI teostab kõrgtehnoloogilisi arendusprojekte. Sellega on saavutatud nii tehnoosiire kui ka tagasiside aktuaalsetest ja majanduslikult põhjendatud probleemidest, millele teadlased peaksid otsima lahendusi. Eeldatakse kas ettevõtlushpartneri kõrgemat taset, tehnilisi võimalusi või potentsiaali oma spetsiifilises valdkonnas, samuti arendustegevuse tulemusel tekkiva kogemuse hilisemat kasutamist KBFI uurimistöös.

KBFI toetab intellektuaalomandi (IO) teket, kaitset ja müüki. Lepinguliste tööde puhul sätestatakse IO põhimõtted kooskõlastatult partneritega. IO hoidmise ja realiseerimise prioriteediks on instituudi arengu tagamine ning Eesti majanduse arendamine. KBFI toetab arendusprojektide ja intellektuaalomandi realiseerimist prototüüpide ja katsepartiide tootmise tasemel enne selle litsentseerimist. Sellega välditakse huvide vastuolusid uurimistöös staadiumis seoses teadlaste võimaliku osalemisega spin-off firmades.

Tööjõud

KBFI tööjõupoliitika eesmärgiks on uurimisteamade edukas elluviimine, mis sisaldab erineval tasemel komponente. Poliitika on suunatud nii kompetentsi tagamisele, jätkusuutlikkusele kui ka uute programmide alustamisele. KBFIs töötab 35 vanemteadurit (neist 20 keemilise füüsika laboratooriumis ning 15 bioloogialaboratooriumites), 30 (14/16) teadurit ja 20 (10/10) tehnikut ning inseneri. Reeglina täidetakse kahte ülesannet: osalemine sisulise uurimistöös programmis ja infrastruktuurse ressursi arendamine. Efektive tööjõu oluliseks osaks on teiste uurimisasutuste spetsialistide kaasamine programmidesse.

1. KBFI nõukogu valib programmide juhtivateadurid, kes vastutavad oma programmi teadusliku ja tehnilise taseme, programmide vahelise koostöö ja põhimõtete ning tulemuste siirde, spetsialistide järelkasvu, tulemuste laiema tutvustamise ja tehnoloogiasiidre eest. Programmide juhid on täiskohaga KBFI töötajad. Juhtivateadurid annavad oma tööst perioodiliselt aru. Programmide siseselt toimuvad jooksvalt seminarid. KBFI teadurid osalevad reeglina mitme programmi täitmisel, tagamaks maksimaalset kompetentsi ning võimaluste kasutamist.

2. Programmide täitmine kulgeb reeglina koostöös ülikoolidega ja rahvusvaheliste teaduskeskustega. KBFI suunab töötajaid koostööpartnerite juurde ja loob võimalused partneritele töötamiseks KBFI laboratooriumites.

3. Uute programmide alustamine ja operatiivne toetus. KBFI kasutab institutsionaalseid vahendeid, eelkõige baasfinantseerimist, uute teemade algatamiseks ja jooksvate programmide operatiivseks toetamiseks. KBFI direktor määrab komisjoni baasfinantseeringu taotluste hindamiseks ja vastavate konkursside läbiviimiseks.

4. KBFI töötajate efektiivsuse hindamine on kompleksne, arvestades projekti teaduslikku tähtsust ja originaalsust, publikatsioone, tsiteeritavust, kutsutud konverentsietekandeid, rahvusvahelist ja riigisisest koostööd juhtival tasemel

uurimisrühmadega, jätkusuutlikkust, lepingulise- ja uurimistöo toetusi, intellektuaalomandi teket, kõrgtehnoloogilise ettevõtluse arendamist, panust instituudi infrastruktuuri haldamisse ja arendusse.

6. KBFI püüab vähendada teadlaste administratiivset koormust taotluste kirjutamisel ja aruandlusel, samuti tööaja kadu uurimistöoga mitteseotud probleemide lahendamisel.

Programmide kvantitatiivsete näitajate keskmistatud aastaprognos

	2005						2010						2015					
	tead- lasi	Publikat- sioone lähtudes 2004.a. andmetest	Uurimis- töö maht	Patendi- taotlusi	Patente (tk)	Litsentse (tk)	tead- lasi	Publikat- sioone	Uurimis- töö maht	Patendi- taotlusi	Patente (tk)	Litsentse (tk)	tead- lasi	Publikat- sioone	Uurimis- töö maht	Patendi- taotlusi	Patente (tk)	Litsentse (tk)
1	4	6	2435	0	0	0	6	10	4000	0	0	0	8	10	6000	0	0	0
2	14	11	5023	0.4	0.3	0	16	6	7000	0.3	0.3	0.2	18	8	10000	0.3	0.3	0.2
3	6	4	1574	0	0	0	9	6	4000	0.2	0.2	0	10	7	9000	0.2	0.2	0.2
4	9	3	1928	0	0	0	10	3	3000	0.2	0.2	0	12	5	4000	0.2	0.2	0.2
5	14	5	8114	0	0	0	15	6	6000	0.2	0.2	0.2	17	7	9000	0.4	0.4	0.4
6	7	4	1360	0	0	0	8	5	1800	0	0	0	10	5	2500	0	0	0
7	7	5	1116	0	0	0	8	6	3000	0	0	0	10	7	4500	0.2	0.2	0.2
8	8	7	1508	0	0	0	10	8	4000	0.2	0.2	0.2	12	8	5000	0.4	0.2	0.2
9	69	45	23758	0.4	0.3	0	82	50	32800	1.1	1.1	0.6	97	57	50000	1.7	1.5	1.4

Teadlaste uue põlvkonna ettevalmistamine

1. Igas programmis osalevad pidevalt vähemalt kaks kraadiõppurit või järel doktorit. Taotletakse kokkulepet kraadiõppurite riikliku toetuse ühiseks kasutamiseks koos ülikoolidega. KBFI poolt läbiviidavad seminarid, kursused ja õppetöö tulenevad temaatika vajadustest ja perspektiividest, vormiliselt on eelistatud mitteauditoorne ja kontsentreeritud auditoorne lähenemine. KBFI osaleb bioloogia, biotehnoloogia, keskkonnatoksikoloogia ja rakendusfüüsika õppeprogrammide koostamisel ja läbiviimisel Tallinna Tehnikaülikoolis ning elementaarosakeste füüsika ja analüütilise spektroskoopia õpetamisel Tartu Ülikoolis. Õppetöö läbiviijateks on vastaval alal tulemuslikult tegutsevad spetsialistid, temaatika laiendamiseks kaasatakse külalislektoreid. KBFI võtab tööle ja annab võimaluse teha kraadiõppe uurimistööd reeglina aineolümpiaadidel häid kohti saavutanud üliõpilastele.
2. Vastavalt KBFI profiilile seab instituut sisse õppeklassid. Strateegia esimeses etapis (5a) seatakse sisse raadiospektroskoopia ja GRIDi tehnoloogia klassid. In vitro toksikoloogia grupis on välja töötamisel õppeklassid (hands-on-training) mikrobiotestide ja biosensor-analüüsides õpetamiseks nii eesti kui rahvusvahelisel tasemel (sh. on aplitseeritud EL Research Training Networks programmidele).

Strateegia koostamise protsess ja meetodid

1. Käivitusnõupidamine - määratleti organisatsiooni tegevuskontseptsioon, visioon, missioon ja põhiülesanded.
2. Protsessi tööetapid - määratleti otsustamist vajavad küsimused koos ajagraafikute ja vastutavate isikutega. Määratleti arendusprojektid ja nende juhtide visioonid oma tegevusvaldkonna lõikes. Projekti juhtide ülesandeks sai kirja panna oma projekti eesmärgid ja uuritavad valdkonnad ning tegevused püstitatud eesmärkide saavutamiseks.
3. Tutvustamine kogu organisatsioonile - tagasiside kogumine esialgse strateegiakava kohta. Täienduste tegemine eesmärkidesse ja projektidesse. Asutuse juhi ja projektide eest vastutavate isikute pidev koostöö ja paranduste tegemine strateegiadokumendi.
4. Valmis strateegiadokumendi tutvustamine - lõplikus strateegiadokumendis arvestati parandusettepanekuid ja täiendusi projektidele. Lõplik variant saadeti laiali kõigile asjaosalistele.

TA strateegia elluviimise, tulemuste kontrolli ja kaasajastamise mehhanismid

Strateegias nimetatud programmilisi eesmärke aitavad ellu viia projektid, lepingud ja grantid. Tulemuste kontroll toimub eelkõige läbi vastavate finantsinstitutsioonide

poolt sätestatud aruandluse, mida teevad projektijuhid. Toimub ka asutusesisene evalveerimine ja perioodilised seminarid.

Strateegia eest vastutavateks isikuteks on instituudi direktor koos programmijuhtidega, kes vastutavad strateegia kaasajastamise ja infovahetuse eest.

Strateegia vaadatakse läbi üks kord aastas ja sellesse viiakse sisse muudatusi vastavalt antud hetke situatsioonile ja visioonile. Programmijuhid teevad kokkuvõtte projektide panusest programmi täitmisele. Vaadatakse üle möödunud aasta jooksul tehtud uurimistööd ning töös olevad projektid ja võrreldakse neid tegevusplaaniga.

SWOT analüüs

❖ Tugevused

- Teadustööle orienteeritud struktuur ja põhimõtted
- Aktuaalsete probleemide uurimine
- Mitmekülgsed teadmised ja oskused, mis ühendavad nii alus- kui rakendusuringud kui ka erinevad teadusalad
- Olemasolev teaduse infrastruktuur
- Koostöö maailma juhtivate uurimislaboritega
- Väljakujunenud ja rahvusvaheliselt tunnustatud tööühm

❖ Nõrkused

- Eksperimentaalse uurimistöö aluseks olev aparatuur ei ole piisav ja kaasaegne
- Puudub kindel rahastamine (rahastamine toimub konkreetsete uurimislepingute ja projektide läbi või nendega proportsionaalselt, reeglina ei taga üks leping katet kogu tööde mahu osas)
- Grantide taotluse ja aruandlusega seotud suur töömaht
- Ülekattuvate finantseeringute teke seoses vajadustega kompenseerida võimalikke tagasilükkamisi ja puudulikku toetust

❖ Võimalused

- Riiklikud finantsinstrumendid ja projektid (sihtfinantseerimine, Eesti Teadusfond, Baasfinantseerimine, Tippkeskus, Doktorikool, TAK,

infrastruktuuri arendamise programmid, SPINNO, CERN koordineerimisprogramm)

- Rahvusvahelised finantsinstrumendid ja projektid (Euroopa Komisjoni Raamprogrammid, Wellcome Trust, Howard Hughes Medical Institute, bilateraalsed projektid juhtivate teadusasutustega ja kõrgtehnoloogiliste firmadega)
- Koostöö ülikoolidega. Uute teadusprogrammide avamine ja nende tutvustamine ning arendamine ülikoolides, vajaliku haridusega teadlaste ettevalmistamine.

❖ Ohud

- Võimalikud poliitilised piirangud geneetiliste modifikatsioonide, tüvirakkude, ja katseloomade kasutamise osas.
- Riikliku teadus- ja arendustegevuse eelarve reaalne vähenemine.
- Projektide kvaliteedi hindamise subjektiivsus ekspertide poolt.
- Ajakadu korduvate projektitaotluste esitamisel.
- Teadlase töö väga kõrge riskiaste, kindla ja püsiva sissetuleku garantii puudumine.
- Vanemteadurite lahkumine ülikooli professori ametikohale seoses sotsiaalkindlustuse ja "tenure track" eelistega.
- Hoone haldamise kulude tõus.