

## **Instituudi strateegilised uurimisprogrammid 2013-2020**

KBFI strateegilised uurimisprogrammid on otseselt seotud nii seitsmenda raamprogrammi (FP7 2006-2013) kui uue raamprogrammi **Horisont 2020** (2014-2020) eesmärkide ja prioriteetsete suundadega ning on kooskõlas instituudi rahvusvahelise nõuandva kogu (SAB) poolt 2012.a juulis antud soovitusetega. Lisaks osaleb Instituut ka EL nanoohutuse võrgustikus.

Eesti teadustaristu pikaajalist (10-20 aasta perspektiiviga) strateegilist arendamist planeerib Eesti teaduse infrastruktuuri teekaart (2010). KBFI koordineerib juhtiva partnerina (koos TÜ ja TTÜga) Eesti Magnetlabori (EML) arendamist ja Eesti osalust Euroopa Tuumauuringute Keskuses (CERN), on põhipartneriks (koos TTÜga) TÜ juhitud Eesti Teadusarvutuse Infrastruktuuris (ETAIS) ning Euroopa neutronkiirguse allikas (ESS).

### **1. Eksperimentaalne kõrge energia füüsika ja teoreetiline füüsika**

Kaasaegse füüsika põhiküsimusteks on osakeste masside tekkemehhanismi ja Universumi olekut määrava füüsika (sealhulgas tumeda aine ja energia) väljaselgitamine. Programm sisaldab nii teoreetilist uurimistööd kui ka arvukalt rahvusvahelisi osakestefüüsika ja kosmoloogia eksperimente. Instituudi strateegia elementarosakeste füüsika vallas on tegutseda komplekselt uute teooriate väljatöötamisel ja nende testimisel loodavates eksperimentides.

#### **1.1 Eksperimentaalne kõrge energia füüsika**

Eksperimentaalse osakestefüüsika vallas on KBFI Euroopa Tuumauuringute Keskuses (CERN) 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 nii Eestis kui Euroopas. KBFI-s on Eesti Tier-2 arvutuskeskus CERN-i andmete töötlemiseks ning antud arvutuskeskus on CMS eksperimendi kasutada olevaist üks Euroopa suurimaid.

#### **1.2 Teoreetiline osakestefüüsika**

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 mateeria teke, täpsemini miks materiat on ligikaudu kümme suurusjärku rohkem kui antimateriat. Seda selgitatakse leptogeneesi abil, mille uuringutes KBFI osaleb. Prioriteetseks suunaks on ka Universumi inflatsiooni sidumine osakestefüüsika teooriaga.

### **2. Kondenseeritud faaside füüsika ja materjaliteadus**

Moodne kondenseeritud faaside füüsika ja materjaliteadus keskendub uudsete elektriliste, magnetiliste, optiliste ja termiliste omadustega ainetele. Nende ühendite funktsionaalsus on sageli väga raskesti ennustatav kas tugevate elektronkorrelatsioonide (magnetism, ferroelektrilisus, laengukorrastatus jms) või väga keeruka struktuuri (intermetallide ja oksiidide suured ühikrakud ja komposiidid) või - üha sagedamini - nende mõlema tõttu. Strateegiline programm pakub välja kolm lähenemist edendamaks arusaamist keerukast kvantmateriasist ja selle võimalikust disainist - parem ainete süntees ja kontroll, arenenud eksperimentaalsed tehnikad (spektroskoopiad) ja uudsed teoreetilised meetodid.

[Type text]

## 2.1 Uued spinnmaterjalid

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. Tuumamagnetresonants (TMR) kasutab tuuma spinni aine lokaalse struktuuri ja dünaamika määramiseks. Suure hulga elektronspinnide koosmõjul tekib püsomagnet või magnetväljaga muudetav takistus elektri-voolule. Veelgi enam, multiferroidsetes materjalides saab elektriväljaga mõjutada spinne, mis võib olla aluseks väikese Joule'i soojatekkega kirjutamisoperatsioonidele magnetmäludes või THz-seadmetele, mis kasutavad magnetelektrilist vastasmõju spinni ja polarisatsioonilainete vahel. Spinni abil paarduvad takistuseta levivad laengupaarid kõrgtemperatuursetes ülijuhtivates ainetes. Uudsete kvantfaaside ning kvantfaasiüleminekute uurimise edasiviivaks jõuks on olnud ülijuhtivus ja magnetism tugevalt korreleeritud elektronidega materjalides ning magnonite (spinnlainete) Bose-Einsteini kondensaat. Tugevalt korreleeritud elektronidega ainete alamrühmas, raskete fermionidega metallides, avaldub tavatu ülijuhtivus, uudne magnetism ning senitundmatu varjatud kord.

Uute spinnmaterjalide programmi eesmärk on fundamentaalsete füüsikanähtuste uurimine potentsiaalset kõrgtehnoloogilist rakendust omavates materjalides. Spinnmaterjale uuritakse tahke keha TMR, teraherts-spektroskoopia ja Raman-spektroskoopia meetoditega, mis annavad lisateavet struktuuri ja struktuuri-funktsiooni vahelise seose kohta. Uuritavate nähtuste kvantiseloom nõuab tugevate magnetväljade ja madalate temperatuuride kasutamist.

## 2.2 Struktuuri, dünaamika ja omaduste uurimine laias magnetväljade ja temperatuuride vahemikus

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. Lai magnetväljade ja temperatuuride vahemik lubab ühelt poolt tõsta TMR tundlikkust, teisalt mõjutada aine olekuid ja funktsionaalsust.

Programmi osaks on TMR kui universaalse **analüütilise meetodi** kasutamine molekulaarsel tasemel informatsiooni saamisel **bioloogias, keemias ja tahkiste füüsikas**. Keemia fundamentaalküsimuste vallas toimub enantiomeeride, diastereoisomeeride ning teiste keeruliste molekulide struktuuranalüüs ja sünteesi arendamine ning kontroll. Molekulaarbioloogias arendatakse välja uusi meetodeid ja lähenemisi membraani- ja transportvalkude struktuuri ja interaktsioonide uurimiseks (vt bioenergeetika programm). Koostöös haiglatega loome raku metaboliitide täpsel mõõtmisel põhinevat diagnostikat.

Tahke keha füüsika alal on programm tihedalt seotud nii uute spinnmaterjalide kui ka energeetikamaterjalide programmiga. Selleks arendatakse ülikiireid pöörlemistehnikaid ekstreemalsetel temperatuuridel, mis ulatuvad spinnmaterjalides kvantnähtuste esiletoomiseks vajalikest krüotemperatuuridest kuni kõrgete temperatuurideni, mille juures töötavad energeetikamaterjalid.

## 2.3. Energeetikamaterjalid

Energeetikaga seotud materjaliuuringud on väga olulised elektrienergia tootmiseks ja salvestamiseks järgmise põlvkonna kütuseelementides, Li-ioonakumulaatorites ja superkondensaatorites. Programmi raames toimub uurimistöö kõigis neis suundades eelkõige kasutades TMR meetodeid kõrgetel, kuni 1200 °K, ja madalatel, kuni 10 °K, temperatuuridel, milleks Instituudil on unikaalsed võimekused ja kompetents. Programm on tihedalt seotud tahke oksiidi kütuselementide arendamisega kommertsiaalseks tooteks koos tootmis- ja arendus-ettevõttega „Elcogen“.

[Type text]

### 3. Makromolekulaarsed struktuuri ja funktsiooni vahelised seosed ning vastasmõjud

#### 3.1 Molekulaarne süsteemne bioenergeetika

Molekulaarse süsteemse bioenergeetika alaseks eesmärgiks on uurida rakusiseid struktuurseid interaktsioone tervete ja patoloogiliste rakkude energiametabolismi regulatsioonis. Süsteemibioloogia paradigma eeldab keeruliste biosüsteemide käitumise kirjeldamist mitmesuguste suhteliselt iseseisvate allsüsteemide struktuuri ja funktsiooni ning nende vaheliste seoste kirjeldamise kaudu. Südamelihase rakkude bioenergeetika puhul hõlmab see raku hingamisahela, sisemembraani ATP-süntasoomi kuuluvate ATP-süntaasi ja adenosiin-nukleotiid-translokaasi ja fosforitransporteri, mitokondriaalset kreatiinkinaasi, välismembraani poriinkanali mille kaudu toimub metaboliitide vahetus rakus ning seda kanalit moduleerivaid valguliste faktorite, neist seni teadaolevalt tubuliini heterodimeeri ning teiste võimalike valguliste komponentide koostoimimise kineetika kirjeldamist.

Rakusiseste struktuursete interaktsioonide ning energiametabolismi väljakujunemine postnataalses arengus on ideaalne objekt uurimaks kõrgeltorganiseeritud intratsellulaarseid struktuure, kus raku bioenergeetiline süsteem varieerub vastavalt struktuurile. Kuna muutused raku bioenergeetikas on üheks esimeseks märgiks raku patoloogilisest seisundist on oluliseks uurimissuunaks ka vähirakkude bioenergeetika.

Programm annab teoreetilise aluse tervete lihasrakkude bioenergeetika, isheemia, südamepuudulikkuse, müokardi infarkti, paljude neurodegeneratiivsete haiguste ning vähi bioenergeetiliste tekkemehhanismide ning isheemia-reperfusiooni kahjustuste mõistmiseks.

#### 3.2 Biomolekulide interaktsioonid

Rakuprotsesside toimumine ning regulatsioon tugineb bioaktiivsete molekulide vastastikusele äratundmisele, seostumisele ning koostoimele – fundamentaalsetele vastasmõjudele (interaktsioonidele) rakule eriomases biomolekulidega tihedalt asustatud keskkonnas.

Uurimistöö eesmärk on nende vastasmõjude mõistmine ning ennustusjõuline kirjeldamine, ühendades eksperimentaalsed uuringud vastavate protsesside teoreetilise modelleerimisega, mis tugineb struktuursetel andmetel süsteemides: valk-valk, valk-DNA, valk-rakumembraan, valk-bioaktiivne peptiid, valk-madalmolekulaarne ligand.

Uuringute keskmes 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, aidates mõista valkude ja teiste signaal-molekulide molekulaarse äratundmise mehhanisme nii normis kui patoloogias. Programmi praktilise tähtsuse tagab uuritavate valkude potentsiaalne roll tänapäeva aktuaalsete terviseprobleemide mõistmisel ja lahendamisel – vähk, neurodegeneratiivsed ja südame ning veresoonekonna haigused. Biomakromolekulide struktuuri ja funktsiooni vaheliste seaduspärasuste tundmine rakendub meditsiinis ja farmakoloogias (teadmispõhine “knowledge based” ravimite ja diagnostikute disainimine) ning bioaktiivsete ainete sünteesil.

#### 3.3 Kahefootoniline neeldumine (2PA) biomolekulides

Kahe-footoniline fluorestsentsmikroskoopia on muutumas bioloogilise teaduse standardmeetodiks pakkudes nii suuremat ruumilist lahutust kui ka sügavamale kudedesse tungimist. Need kasulikud küljed tulenevad kahe-footonilise neeldumise (2PA) erilistest füüsikalistest

[Type text]

omadustest (ergastustõenäosuse ruutsõltuvus saabuvate footonite vootihedusest) lubades nähtava fluorestsentsi ergastamiseks kasutada lähi-infrapuna lainepikkuseid.

2PA omab ainulaadset füüsikalist omadust andmaks uudset instrumenti biopolümeeride struktuuri ja funktsiooni avamiseks. Nimelt 2PA protsessi tõenäosus sõltub ka kromofoori püsiva elektrilise dipoolmomendi väärtusest, mis omakorda varieerub lokaalse elektrivälja funktsioonina. Hiljuti näidati, et bioloogiliste kromofooride (nagu fluorestsentsed proteiinid) 2PA ristlõike kvantitatiivset mõõtmist saab kasutada vastava elektrilise dipoolmomendi väärtuse täpseks määramiseks, andes seega ka näiteks 3nm läbimõõduga tündervalgu sisemuses leiduva lokaalse elektrivälja tugevuse ja suuna. Seda tüüpi uudne füüsikaline mõõtmine on unikaalselt väärtuslik võimaldades juurdepääsu lokaalsetele elektrostaatilistele vastasmõjudele nii biopolümeeride sees kui vahel nanomeetri skaalas.

Programmi strateegia on kahene. **Esimene** eesmärk on jätkata lokaalsete elektriväljade tajumise füüsikaliste põhimõtete arendamist 2PA spektroskoopia ja mikroskoopiaga. Selleks uurime laia valiku biomolekulaarsete proovide 2PA omadusi, et luua ja iseloomustada uut tüüpi molekulaarseid multi-fotoonseid optilisi andureid, mis oleksid spetsiaalselt välja töötatud lokaalse elektrivälja tuvastamiseks ja mõõtmiseks. 2PA andmete täpsuse ja usaldusväärsuse parandamine, mõõtmiskiiruse suurendamine, lainepikkuste vahemiku optimeerimine, integreerimine olemasolevate mikroskoobi-süsteemidega jne on näited lahendust vajavatest kriitilistest tehnilistest küsimustest. **Teine** ja kaugem eesmärk on algatada T&A tasandil töö spetsiaalse riist- ja tarkvara loomiseks, mis kombinatsioonis spetsialiseeritud 2PA optimeeritud molekulaarsete sondidega oleks kasutatav laiemas molekulaarbioloogiliste uuringute alas.

Programmi **üldine** eesmärk on arendada uusi katsemeetodeid ja füüsikalisi tööriistu, mis võimaldaksid meil mõista, kuidas biopolümeerid täidavad oma kõige hämmastavamaid keerulisi ülesandeid, ja võib-olla, kuidas inimese loodud tehnoloogia võiks neid funktsioone jäljendada või isegi parandada. Kõik see lõppkokkuvõttes võimaldab meil paremini mõista elu enese toimimise füüsikalisi printsiipe.

#### 4. Keskkonnatoksikoloogia ja sidusuuringud

Keskkonnaohtlike ainete seotud uuringud - inimtegevuse tagajärjel keskkonda sattuvate mürgainete kahjulikud mõjud ökosüsteemidele, sh. inimesele - on ala, mis hõlmab bioloogiat, füüsikat, keemiat, materjaliteadust ja tervishoidu. Seega on KBFI interdistsiplinaarse asutusena väga sobiv antud temaatika edukaks arendamiseks ning keskkonnauuringud on jätkuvalt KBFI üks keskseid strateegiaid.

KBFI keskkonnatoksikoloogilised uuringud ning eriti 2004.a. alanud metallioksiidide **nanoosakeste** keskkonnaohtude uuringud on kogu maailmas teedrajavad ning on oma tähtsust tõestanud nii nimetatud valdkonna teadustööde kõrge tsiteeritavuse kui ka Euroopa Liidu FP6 ja FP7 projektides osalemise edukusega.

Keskkonnatoksikoloogia programmi strateegiline **eesmärk** on keskkonnas leiduvate või sinna sattuda võivate (tööstus)kemikaalide ohtlikkuse väljaselgitamine, vastates järgmistele küsimustele: kas on mürgine, kellele ja kui mürgine, miks mürgine ning kuidas seda mürgisust pädevalt ja kuluefektiivselt hinnata. Vastavalt Euroopa Liidu kemikaaliseadusandlusele REACH tuleb aastaks 2018 läbi viia kõikide, aastas üle 1 tonni toodetavate keemiliste ühendite (hinnanguliselt üle 100 000), toksikoloogiline iseloomustamine. See on Euroopa (sh Eesti) keemiatööstusele suureks kuluallikaks, kuna uuringute kohustus on tootjal.

Tööstuslike tootmismahitudeni on jõudnud ka sünteetilised nanoosakesed (osakesed, mille vähemalt üks mõõde ei ületa 100 nm), mida toodetakse erinevates koostistes, kujudes ning suurustes. Võrreldes tavaliste materjalidega ilmnevad ainel nanosuurusel uued omadused,

[Type text]

mille ärakasutamine võib tuua läbimurdeid paljudes tehnoloogiates alates energeetikast ja lõpetades meditsiiniga. Samas on alust arvata, et nanoosakeste uued omadused võivad kaasa tuua ka soovimatuid tagajärgi, sh ohtu keskkonnale ja inimesele.

Keskkonnatoksikoloogia strateegilise programmi üheks suunaks ongi **testsüsteemide** väljatöötamine, mille abil oleks efektiivselt võimalik hinnata kemikaalide ning nano-materjale bioloogilisi mõjusid. Tähelepanu pööratakse peamiselt *in vitro* testidele, mis võimaldavad hinnata kemikaalide ja nanoosakeste kahjulikke mõjusid ja toksilisuse mehhanisme ning panustatakse kiirete ja suure läbilaskevõimega testide väljatöötamisele. Kuna kemikaalide toksilisus on reeglina seotud nende kahjuliku mõjuga rakumembraanidele ja põhiainevahetusprotsessidele, siis on *in vitro* testid (s.h uuringud bakterite, algloomade ja selgrootutega) piisava ennustusjõuga. Kvantitatiivsed struktuur-aktiivsussõltuvused (ing. k. QSAR) on laialdaselt kasutusel kemikaalide toksilisuse ennustamisel, ent nanoosakeste puhul on modelleerimine veel algusjärgus, kuna need on oma omadustelt kordi keerukamad kui nn tava-kemikaalid.

Mürgisuse avaldumise eelduseks on toksilise aine ja organismi kokkupuude. Oluline toksilisuse parameeter on ka aine bioaadavus (võime läbida rakumembraani ja siseneda bioloogilisse aineringsse). KBFI-s uuritakse saasteainete levikut ja liikuvust keskkonnas (sorptsioon, desorptsioon, lahustuvus, komplekseerumine jne.). Praeguseks on KBFIis lisaks varem välja arendatud keskkonnakeemilistele uuringutele lisandunud Eesti kontekstis uniikaalne ekspertiis keskkonnatoksikoloogia alal, mida on rakendatud ja rakendatakse **põlevkivitööstuse ja energeetika** saastevoogude, sh tahkete jäätmete keskkonnaohtlikkuse hindamisel ja jätkusuutlike taaskasutusvõimaluste leidmisel. Nii näiteks viisid KBFI teadlaste algatatud teadusuuringud Eesti põlevkivitööstuse ühe olulise saastevoogu - värske poolkoksi – klassifitseerimiseni ohtlikuks jäätmeks 2003.a., millega kaasnes ladustuskorra muutmine vastavalt Euroopa Liidus sätestatud korrale. Programmis on kavas välja töötada meetod ohtlike ainete eraldamiseks põlevkivitööstuse tahketest jäätmetest ja uurida jäätmete suuremahulise taaskasutuse viise. Iseseisva töösuuna moodustab diktüoneemakilda jt. põlevkivide keskkonnaohtlikkuse uurimine koos saasteainete (uraan jt. metallid) ringlusest ja isesüttimisest tingitud laguproduktide keemilise analüüsiga, pöörates erilist tähelepanu hapniku ringlusega seotud probleemidele.