

KBFI strateegilised uurimisprogrammid

KBFI strateegilised uurimisprogrammid on KBFI arengukava lahutamatu osa.

Sisukord

Keskkonnatoksikoloogia ja nano-ohutus.....	2
Füüsikaline keemia ja keemiline bioloogia.....	3
Fundamentaalne ja rakenduslik bioenergeetika.....	3
Keemia ja spektroskoopia	5
Supramolekulaarne keemia	6
Füüsika, materjaliteadus ja energiatehnoloogiad.....	6
Uued spinnmaterjalid ja ülijuhid.....	6
Endoheedrilsed aatomid ja molekulid fullereenides	7
Struktuuri, dünaamika ja aine omaduste uurimine laias magnetväljade ja temperatuuride vahemikus.....	7
Kahefootonse neeldumise (2PA) täppisspektroskoopia	8
Energiatehnoloogiad	9
Eksperimentaalne kõrge energia füüsika ja teoreetiline füüsika.....	9
Eksperimentaalne kõrge energia füüsika	9
Teoreetiline füüsika, astrofüüsika ja kosmoloogia.....	11

Keskkonnatoksikoloogia ja nano-ohutus

Keskkonnaohtlike ainete seotud uuringud – inimtegevuse tagajärjel keskkonda sattuvate mürkainete 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 oma valdkonna teadustööde kõrge tsiteeritavuse kui ka Euroopa Liidu FP6, FP7 ja H2020 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 hinnata kõigi aastas üle 1 tonni toodetavate keemiliste ühendite ohutust. Kuna neid ühendeid on hinnanguliselt üle 100 000 ja uuringute kohustus on tootjal, on see on Euroopa (sh Eesti) keemiatööstusele suureks kuluallikaks.

Tööstuslike tootmismahitudeni on jõudnud ka sünteetilised nanoosakesed (osakesed, mille vähemalt üks mõõde on alla 100 nm), mida toodetakse erinevates koostistes, kujudes ning suurustes. Võrreldes tavaliste materjalidega ilmnevad nanosuurusel ainetel uued omadused, mis võivad tuua läbimurdeid paljudes tehnoloogiates, alates energeetikast ja lõpetades meditsiiniga. Samas on alust arvata, et nanoosakeste uudsete omadustega võivad kaasned ka soovimatud tagajärjed, sh ohud keskkonnale ja inimesele. Seetõttu on äärmiselt oluline KBFI nanoturvalisuse uuringuid võimaldav infrastruktuur ja teadlaste kompetents nende uuringute tegemiseks. Teisalt saab nano-põhiste materjalide võimalikke toksilisi omadusi ka eesmärgipäraselt ära kasutada - nt. uute antimikroobsete materjalide (pinnakatete ja tekstiilide) loomiseks, mis on oluline mikroobsete ja viroloogiliste haiguspuhangute ohjamiseks ning ravimresistentsete mikroobide tekke pidurdamiseks.

Kokkuvõtvalt, KBFI Keskkonnatoksikoloogia laboris on Eesti jaoks ainulaadne kompetents ja võimekus hinnata kemikaalide (sh. nanomaterjalide ja mikroplasti) ja keskkonnaproovide (heitveed, tahked jäätmed, saastunud mullad või setted) toksilisust. Laboris kasutatakse valikut bioteste eritüübiliste organismidega (kirpvähilised, algloomad, vetikad, bakterid jt). Enamik kasutatavatest testidest on OECD ja/või ISO poolt heaks kiidetud. Laboritöös järgitakse GLP (head laboritavad) juhiseid, millega tagatakse uurimistulemuste kvaliteet ja usaldusvärsus.

Keskkonnatoksikoloogia strateegilise programmi oluliseks suunaks on ka uute kõrge läbilaskevõimega testsüsteemide väljatöötamine, et efektiivselt hinnata kemikaalide ning nanomaterjalide bioloogilisi mõjusid. Tähelepanu pööratakse peamiselt *in vitro* testidele, mis võimaldavad hinnata kemikaalide ja nanoosakeste kahjulikke mõjusid ja toksilisuse

mehhanisme. Kuna kemikaalide toksilisus on reeglina seotud nende kahjuliku mõjuga rakumembraanidele ja põhiainevahetusprotsessidele, on just *in vitro* testid (sh. uuringud bakterite, algloomade ja selgrootutega) piisava ennustajõuga. Seega on KBFIs lisaks eelnevalt välja arendatud keskkonnakeemilistele uuringutele ka Eestile unikaalne ekspertiis keskkonnatoksikoloogias. Seda on rakendatud ja rakendatakse põlevkivitööstuse ja energeetika saastevoogude, sh tahkete jäätmete keskkonnaohtlikkuse hindamisel ja jätkusuutlike taaskasutusvõimaluste leidmisel. Näiteks viisid KBFi teadlaste algatatud teadusuuringud Eesti põlevkivitööstuse ühe olulise saastevoogu – värsket poolkoksi - klassifitseerimiseni ohtlikuks jäätmeks 2003. a, millega kaasnes ladustuskorra muutmine vastavalt Euroopa Liidus sätestatud korrale. Teematikat jätkatakse põlevkivisaastuse likvideerimise efektiivsuse uurimise kontekstis (Purtse jõe puhastamine jääkreostusest) ja põlevkivituha erinevate kasutuste (granuleeritud väetisekomponendid, teekattematerjalid) keskkonnasõbralikkuse hindamisel. Uue uurimisteemana on lisandunud haruldaste muldmetallide keskkonnamõjude uuring, mis on oluline nende elementide järjest suurema kasutusega tipp tehnoloogilistes seadmetes ja Eestis toimuva NPM Silmet AS (üks Euroopa suurimatest haruldaste muldmetallide tootmisettevõtetest) tegevusega.

Füüsikaline keemia ja keemiline bioloogia

Fundamentaalne ja rakenduslik bioenergeetika

Viimastel aastatel on bioenergeetika ehk organismide energia-ainevahetuse teemalised uurimused muutunud üha olulisemaks nii bioloogias, meditsiinis kui ka keskkonnakaitses. Need annavad informatsiooni süsteemi kui terviku funktsionaalsete parameetrite, seega ka rakumuutuste põhjuste kohta.

Teadus oskab tänapäeval hästi kirjeldada raku struktuure, komponente ja signaaliülekanne radasid. Samas ei ole me veel võimelised mõistma ja kvantitatiivselt kirjeldama nii üksikut raku tervikuna kui ka organismi kui tervikut, sealhulgas ka paljude haiguste täpseid tekkemehhanisme. Seda lõhet üritavad ületada süsteemibioloogia paradigmat lähtuvad uuringud, mis on ka Keemilise bioloogia labori põhitegevuseks. Süsteemibioloogia lähtekoht on, et terviksüsteemides tekivad erinevate komponentide vastasmõju tulemusel uued omadused, mida ei ole võimalik kindlaks teha neid komponente eraldi uurides. Seega tuleks süsteemi vaadelda terviklikult ja, kui võimalik, ühendades bioloogia, biofüüsika ning meditsiini valdkondi. KBFi kui interdistsiplinaarne teadusasutus on suurepärane keskkond sellisteks mitmeid teadusharusid hõlmavateks uuringuteks.

Keemilise bioloogia laboris uuritakse kõrgeltorganiseeritud ja –koordineeritud süsteeme, milleks on energiaülekanne võrgustikud lihase- ja kasvajakudedes ning muutusi bioenergeetilises ainevahetuses haiguste tekkel.

Skeleti- ja südamelihased on suure energiavajadusega koed, seega kui vananemisel või patoloogiate korral tekivad häired energiaga varustatuses, põhjustab see inimeste elukvaliteedi tõsiselt langust. Näiteks mitokondriaalsed haigused, müopaatid ja paljud südamehaigused on seotud muutustega rakkude bioenergeetikas. Nende häirete

alusmehhanismid on seotud rakuenergeetika ümberprogrammeerimisega, muutustega substraatide eelistustes ja metallide ainevahetuse regulatsioonis. Keemilise bioloogia laboris kasutatav kõrghlahutav respiromeetria kombineerituna teiste fluksoomika meetoditega võimaldab kindlaks määrata täpsed muutuste punktid energia tootmise ja ülekande radadel, millest lähtudes on võimalik toetada haiguste diagnoosimist ning anda soovitusi raviks või sümptomaatilisteks ravimiteks.

Programmi teiseks suunaks on funktsionaalsete muutuste väljaselgitamine mitokondrites erinevate vähipaikmete korral. Esmasteks uurimisobjektideks on kogu maailmas väga levinud rinna- ja soolevähk. Oleme näidanud, et nihked raku bioenergeetika regulatsioonis on üheks esimeseks signaaliks rakupatoloogia tekkel, seega võimaldab nende kiire ja täpne määramine diagnoosida vähi juba varases staadiumis.

On näidatud, et vähirakud kujundavad oma energiametabolismi ümber, et säilitada oma kõrget proliferatiivset aktiivsust ka ebasoodsates tingimustes. Samas pole tänaseni süstemaatiliselt uuritud bioenergeetilise metabolismi reprogrammeerimist pahaloomulistes kasvajates rühmitades patsiente vastavalt kasvaja agressiivsusele. Programmi peamine eesmärk on kinnitada, kas väga agressiivsete vähkide korral on mitokondris toimuv oksüdatiivne fosforüülimine see peamine „mootor“, mis aitab kaasa kasvaja pahaloomulisusele, nagu viitavad meie varasemad uuringud. Samuti ei ole täpselt kindlaks tehtud, kuidas energiaülekande radade reorganiseerumine vähirakkudes toimub ning mis reguleerib glükolüüsi ja oksüdatiivse fosforüülimise vahelist tasakaalu neis kasvajates. Antud uuringute abil on võimalik dekodeerida bioenergeetiliste faktorite võrgustik, mis kontrollib nii käärsoole kui ka rinnavähi agressiivsust ja seeläbi paremini mõista kasvajate arengut ja metastaaside moodustumise algpõhjusteid. Programm aitab luua uusi teadmisi, mida saab rakendada praktilises vähiravis ja -prognostikas.

Käesoleva programmi kolmas eesmärk on süsteembiooloogiast lähtuvate uuringute jaoks sobivate mudel-rakukultuuride (kasvajad, lihased, neuronid) väljatöötamine, mida saaks kasutada bioenergeetilise ainevahetuse mehhanismide täpsemaks väljaselgitamiseks, samuti uudsete ning spetsiifilisemate ravivõimaluste uurimiseks.

Uue teemana on Keemilise bioloogia laboris plaanitud tegeleda neurodegeneratiivsete haigustega sest ka paljude seda tüüpi haiguste juured peituvad teisenenud energiametabolismis.

Lõppkokkuvõttes annab antud programm teoreetilise aluse lihaskude patoloogiate, paljude neurodegeneratiivsete haiguste ning vähi bioenergeetiliste tekkemehhanismide mõistmiseks.

Keemilise bioloogia labor ühendab kõrgetasemelisi teadlasi, kes omavad mitmekesisest tausta keemia, füüsika, biokeemia ja süsteembiooloogia alal. Grupp ühendab multidistsiplinaarseid teadmisi ja kaasaegseid meetodikaid energiametabolismiga seotud teadusuuringutes, ning

selle eesmärk on integreerida ja laiendada teadmisi energia metabolismi põhiaspektide kohta rakkudes.

Keemia ja spektroskoopia

Keemia- ja spektroskoopiatehnikate areng käib paratamatult käsikäes - keemia on teadus molekulidest ja molekulide vahelistest interaktsioonidest, spektroskoopia hõlmab füüsikalise-keemilisi analüüsitehnikaid molekulide ja nende interaktsioonide uurimiseks. KBFI on aastakümneid olnud ühe mitmekülgseima spektroskoopiatehnika - tuumamagnetresonants-spektroskoopia (TMR) - arendamise ja rakendamise eesrinnas. Tänapäeval on instituudi TMR labor mitmekülgseima sisseseadega TMR labor Baltikumis. KBFI tegeletakse nii lahuste (vedelike) kui ka tahkiste TMR uuringutega, viiakse läbi molekulide struktuuri uuringuid, ainete ja molekulide segude uuringuid. KBFI-s on kompetents tahkiste TMR detektorite arendamises. Tänapäeval tegeletakse instituudis ühe TMR tehnika suurima pudelikaela, tundlikkuse probleemi, lahendamiseks läbi tuumse hüperpolarisatsiooni rakendamise. KBFI oli üks esimesi laboreid maailmas, kes rakendas tuumset hüperpolarisatsiooni bioloogilistele segudele, suutes seeläbi mõõta molekule mida muidu ei oleks võimalik detekteerida.

Tahkise TMR-võimekus on oluline uurimistehnika materjali- ja tahkisefüüsikas ning omab ka potentsiaali toetada koostööd neile valdkondadele keskenduvate ettevõtetega. Selle eesmärgi saavutamiseks tehtavad sammud ning prioriteedid seatakse paika kümnendi alguses. Lahuste TMR spektroskoopia on oluline enamikele keemia ja biokeemia teadusharudele ning toetab koostööd keemia- ja toiduainetööstusega.

TMR labori väljakutse järgmiseks aastakümneks on oma rahvusvahelise nähtavuse säilitamine, personali pealekasvu tagamine ning uute rakenduste suunas arenemine. Oluline on tagada Eestis ja Baltikumis ainulaadse tahkiste TMR-analüüsi võimekuse edasine areng, kuna tegu on kõrge koostööpotentsiaaliga ning paljudele tehnika- ja loodusteaduste valdkondadele olulise tehnoloogiaga, milles on KBFI tugev kompetents. On oluline säilitada ja edasi arendada Instituudi TMR-laborit kui silmapaistvat kompetentsikeskust ja TMR alast kontaktpunkti ettevõtetele ja teadlastele. Selleks peame olema valmis pakkuma operatiivset ja professionaalset analüüsiteenust. Eesmärgi saavutamiseks on KBFI aktiivseks partneriks Eesti magnetlabori analüütilise keemia riikliku teadusinfrastruktuuri kujundamisel.

Uute arengusuundadena TMR alal näeme potentsiaali maailmas järjest laiemat kandepinda leidvate oomikameetodite laiemas rakendamises. Oomikaks nimetatakse suure arvu biomolekulide samaaegset detekteerimist ning tekkiva andmemassiivi töötlemist ja analüüsi eesmärgiga hinnata organismide tervist ja koostist. TMR on metaboolika (metaboliitide määramisele keskenduv oomika haru) uuringutes üks efektiivsemad tööriistu. KBFI labor arendab vastavalt TMR tehnikat ja rakendusi, töötamaks välja uusi protokolle metaboolika uuringuteks, biomarkerite avastamiseks ja diagnostikaks, toiduohutuse tagamiseks, kütuste kvaliteedi seireks ning muudeks rakendusteks, kus analüüsitakse keerulisi lahuseid ja segusid. Nende eesmärkide saavutamiseks tehakse tihedat koostööd (metabol)oomika alaseid uuringuid vajavate partneritega, sh terviseuuringute, toiduohutuse, looduskaitse, statistika ja andmeanalüüsi jne aladel.

Supramolekulaarne keemia

Supramolekulaarses keemias on põimunud orgaaniline süntees, röntgendifraktomeetria ja tuumamagnetresonants-spektroskoopia. Sünteesi käigus luuakse ühendid, mis võimaldavad nõrkade interaktsioonide kaudu tekitada komplekse teiste molekulidega, vajamata selleks kovalentseid sidemeid. Röntgendifraktomeetria võimaldab nende komplekside struktuure uurida tahkes faasis ja tuumamagnetresonants-spektroskoopia lahuses. KBFi supramolekulaarse keemia suuna peamised uurimisobjektid on makrotsükliidid ehk tsüklilised molekulid, mille õõnsusesse mahuvad teised molekulid. Makrotsükliidid saab kasutada näiteks sensoritena, kus makrotsükli värv või muud omadused muutuvad, kui makrotsükkel komplekseerub mõne teise molekuli või iooniga. Samuti on võimalik rakendada makrotsükliidid ravimite kandjatena inimorganismis, kuhu näiteks vees lahustumatu ravim vees lahustuva makrotsükli sees manustatakse. KBFIs uuritakse peamiselt aromaatsetest monomeeridest koosnevaid makrotsükliidid ning plaanis on sünteesida uusi ja tõhustatud omadustega makrotsükliidid, et teha katseid nende kasutatavuse kohta praktilistes rakendustes.

Füüsika, materjaliteadus ja energiatehnoloogiad

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 uued teoreetilised meetodid.

Uued spinnmaterjalid ja ülijuhid

Spinn on elementaariosakese fundamentaalne omadus, mida saab adekvaatselt kirjeldada ainult kvantmehaanika reeglite abil. Vaatamata oma kvantiseloomule on spinnil praktiline tähtsus ja oluline tähendus. Tuumamagnetresonants (TMR) kasutab tuuma spinni aine lokaalse struktuuri ja dünaamika määramiseks. Suure hulga elektronspinnide koosmõjul tekib püsिमagnet või magnetväljaga muudetav takistus elektrivoolule. Veelgi enam, multiferroidsetes materjalides saab elektriväljaga mõjutada spinne, mis võib olla aluseks väikese Joule'i soojatekkega kirjutamisoperatsioonidele magnetmäludes või THz-seadmetele, mis kasutavad magnetielektrilist vastasmõju spinni ja polarisatsioonilainete vahel.

Spinni abil paarduvad takistuseta levivad laengupaarid kõrgetemperatuursetes ülijuhtivates ainetes. Uudsete kvantfaaside ning kvantfaasiüleminekute uurimise edasiviivaks jõuks on olnud ülijuhtivus ja magnetism tugevalt korreleeritud elektronidega materjalides ning magnonite (spinnlainete) Bose-Einsteini kondensaat.

Ülijuhtivus tekib, kui poolarvulise spinniga elektronid moodustavad täisarvulise spinniga paare, mille lõhkumiseks vajalik energia on suurem nullist. Seda ülijuhi ergastuste spektris olevat pilu saab uurida teraherts-spektroskoopiaga. Ajasümmeetriat rikkuvate ebatavaliste ülijuhtide pinnalt peegeldumisel THz kiirguse polarisatsioonitasand pöördub, mis avab võimaluse ülijuhtide kirjeldamiseks loodud mudelid eristada ülijuhtivat faasi kirjeldava korra parameetri sümmeetria põhjal terahertsspektroskoopia piirkonnas.

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.

Endoheedrised aatomid ja molekulid fullereenides

Fullereeni C₆₀ imepärane omadus on 4 Ångströmi suurune tühemik tema sees. See on piisavalt suur, et sinna mahuksid aatomid ja väikesed molekulid, moodustamata keemilist sidet fullereeni süsinikega. Sellist molekulaarset kompleksi tähistatakse A@C₆₀, mis tähendab, et fullereeni kera sees on üks aatom või molekul A, näiteks He aatom või vee molekul. Need molekulaarsed kompleksid võimaldavad uurida üksiku A liikumist väga madalatel temperatuuridel nii, nagu see oleks gaasi faasis. Molekuli võnkumiste, pöörlemise ja translatoorse liikumise, mis on kvantiseeritud kera sees, kohta saab teavet THz ja infrapuna-spektroskoopiaga. Töö käib suunal, et kasutada selliseid kapseldatud kvantrootoreid kombineerituna orto-para konversiooni ja optilise pumpamisega magnetresonants-tomograafias ja teistes tuumamagnetresonantsil põhinevates analüüsimeetodites kiirema ja täpsema tulemuse saavutamiseks.

Struktuuri, dünaamika ja aine 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 keeruliste molekulide enantiomeeride ja diastereoisomeeride struktuuri analüüs 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 ekstreemsetel temperatuuridel, mis ulatuvad spinnmaterjalides kvantnähtuste

esiletoomiseks vajalikest krüotemperatuuridest kuni kõrgete temperatuurideni, mille juures töötavad energetikamaterjalid.

Kahefootonse neeldumise (2PA) täppisspektroskoopia

Optiliste mittelineaarsete nähtuste valda kuuluv kahefootoniline neeldumine (two-photon absorption, 2PA) on aluseks tervele reale rakendustele nii rakubioloogias, meditsiinis, materjaliteaduses ning hiljuti ka kvantoptikal põhinevates uudsetes infotehnoloogiates. Praktika seisukohast kasulikud 2PA omadused tulenevad eelkõige mittelineaarse ergastusprotsessi kvantmehhaanilise tõenäosuse eripäradest, mis eristavad seda tavalisest s.t. lineaarsest ehk ühefootonilise neeldumise (1PA) protsessist. Ühelt poolt väljendub nimetatud eripära neeldumise tugevuse ruutsõltuvuses saabuvate footonite vootihedusest ning teiselt poolt võimaldab ergastamiseks kasutada lähi-infrapuna lainepikkuseid, mis on tähtsaks eeliseks bioloogiliste objektide mikroskoopias s.h. koe- ja rakustruktuuride uuringutes. KBFI teostab 2PA nähtuse eksperimentaalset ja teoreetilist uurimust pidades silmas mitut omavahel tihedalt seotud strateegilist ehk pikaajalist eesmärki. Meie lähtepunktiks on fakt, et 2PA rakenduste tõhusus sõltub mitte ainult valgusallika ehk laseri kiire omadustest, vaid vähemalt võrdsel määral kui mitte isegi enamgi molekulaarsete neelajate ehk fluorofooride struktuurist ja spektroskoopilistest parameetritest. Siinkohal tuleb märkida, et kuigi 2PA on juba aastaid olnud kasutusel, s.h. kommertsiaalselt toodetud fluorestsents-mikroskoopides, on võimalused fluorofooride 2PA molekulaarse ristlõike spektri jt. 2PA-ga seotud aine omaduse eksperimentaalseks määramiseks senini olnud üsnagi piiratud tingituna eelkõige vastava metodoloogia puudulikkusest. KBFI mittelineaarse spektroskoopia tööühma üheks ülesandeks ongi seda laadi täppismõõtmiste ja -meetodite arendamine, perspektiivis eesmärgiga viia need see võrreldavate tasemele laialt levinud 1PA fotomeetria ja –metroloogiaga. Muuhulgas oleme seadnud eesmärgiks saada Euroopa Liidus tunnustatud 2PA täppismõõtmiste keskuseks, kusjuures oluliseks edu komponendiks on siin vastava optilise metroloogia alase ekspertiisi kaasamine.

Lisaks teadaolevate tehnoloogiate tõhustamiseks, võimaldavad ülalnimetatud 2PA täppismõõtmised teostada uusi ja unikaalseid teaduslikke eksperimente. KBFI mittelineaarse spektroskoopia tööühma teiseks keskseks huviobjektiks on seega 2PA alusel kromofooride püsiva elektrilise dipoolmomendi määramine, mis on omakorda tihedalt seotud aine sisese lokaalse elektriväljaga. Viimane on aga teatavasti üks määravaid faktoreid paljude komplekssete funktsionaalsete materjalide sh. biopolümeeride jm. elusaine unikaalsete omaduste kujundamisel. On alust väita, et vaatamata suurtele edusammudele ainete atomaarse- ja molekulaarse struktuuri määramisel, puudub seni võimalus aine sisest elektrostaatikat vahetult detekteerida. KBFI planeeritud alusuuringute eesmärgiks on kaasata parimat eksperimentaalset ja arvutuslikku metodoloogiat, et leida juurdepääs lokaalsetele elektrostaatilistele vastasmõjudele kvantitatiivseks määramiseks nanomeetri skaalas, sh. bioloogilistes molekulaarsetes struktuurides nagu valgud, membraanid jm. Edu korral võimaldaks see lõppkokkuvõttes meil paremini mõista elu enese toimimise füüsikalisi printsiipe.

Kolmandaks oleme võtnud eesmärgiks välja arendada mittelineaarse kvantoptika eksperimentaalne baas, kus mõõdetaks vastasmõju valgust neelava aine ja footonite põimolekute vahel. Kuna nimetatud on meie jaoks uudne suund, siis loodame saavutada edu kasutades meie senist eelist nn. tavalise 2PA metodoloogias ja spektroskoopias. Footonite põimolekul on rida huvitavaid suure potentsiaaliga rakendusi infotehnoloogias, ning meie pikaajaline eesmärk on arendada vastavate spetsialiseeritud optiliste fluorofooride spektroskoopiat jm. Kaasnevate mittelineaarsetele materjalidele suunatud alusuuringuid.

Energiatehnoloogiad

Kliimasoojenemise ja süsinikuheite vähendamiseks on vaja arendada nii vesiniku-energeetikat, kui aatomielektrijaamu.

Vesinikuenergeetikas on kesksel kohal kütuselemendid, millega saab keemilist energiat suure kasuteguriga elektriks muuta. Kõrgtemperatuursete tahke oksiidi kütuselementide arendamisega kommertsiaalseks tooteks jätkub pikaajaline koostöö tootmis- ja arendusettevõttega Elcogen.

Säästliku energeetika edendamisel otsitakse lahendusi liitiumakude taaskasutusse võtmiseks, eraldades akudest grafiiti ning uurides saadud nanomaterjalide katalüütilist aktiivsust.

Arvestades vajadusega arendada Eestis tuumaenergeetika-alast kompetentsi arendab KBFI kõrge energia füüsika laboris reaktorifüüsika ja tuumaohutuse alast uurimistööd. Tuumaohutus on võtmetähtsusega võimaliku Eesti tuumaenergeetika programmi väljatöötamisel kui ka Eesti ees seisvate ökoloogiliste väljakutsete lahendamisel.

Ekspérimentaalne 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.

Ekspérimentaalne kõrge energia füüsika

Ekspérimentaalse osakestefüüsika vallas on KBFI Euroopa Tuumauringute Keskuses (CERN) uue põlvkonna kiirendi Large Hadron Collider (LHC) ühe eksperimendi Compact Muon Solenoid (CMS) liige. KBFI koordineerib Eesti teadlaste ja suveüliõpilaste tegevust CERNis. Ekspérimentaalse osakestefüüsika spin-offiks on hajusarvutuskontseptsiooni Grid arendamine nii Eestis kui Euroopas. KBFI on Eesti Tier-2 arvutuskeskus CERNi andmete töötlemiseks ning antud arvutuskeskus on CMS eksperimendi kasutada olevaist üks Euroopa suurimaid.

KBFI teadlaste sisuline teadustegevus eksperimantaalse kõrge energia füüsika vallas jaguneb kolme temaatika alla. Nendeks on CMSi detektori poolt kogutud andmete analüüs ja uue

füüsika otsimine nendest andmetest, CMSi detektori käigus hoidmine ja detektori arendus ja andmeanalüüsiks ning teadusarvutusteks vajaliku infotehnoloogia arendamine.

Ekspirimendi andmete analüüsi osas on tööühma kogemused viimase 15 aasta jooksul olnud Higgsi bosoni ja top kvargi uurimisel. Rühma suund hetkel ja tulevikus ongi selle kompetentsi maksimaalne kasutamine ehk Higgsi bosoni ja top kvargi omavaheliste vastasmõjude uurimine. Seda tehakse CMS eksperimendi andmete analüüsis osaledes mitmetes erinevates tööühmades nii kahe top kvargi ja Higgsi bosoni koostekke kanali uurimiseks leptonilistes kanalites kui ka ka Higgsi bosoni eneseinteraktsioonide uurimisel kahe Higgsi bosoni tekkeprotsessis.

Antud uurimus on hetkel Standardmudeli ühtede olulisemate mõõtmiste teostamine kuna Higgsi bosoni ja top kvargiga on seotud mitmed mudeli olulised mõõtmised ja ennustused. Selle sektori parem tundmine annab meile ka muudes mudeli parameetrites rohkem kindlust. Kuna Higgs ja top kvark on kaks raskeimat osakest, siis nende parameetrite täppismõõtmisel on ka suur mõju võimalike uue füüsika protsesside leidmiseks.

Kõrge energia füüsika valdkonna arenguks on oluline, et lisaks teooriale ja teooria kontrollimisele juba teostatavates eksperimentides panustaksime ka eksperimentaalse aparatuuri täiendamisse ja arendusse. Senini on Eestis vastav valdkond piirdunud vaid peamiselt tarbijaks olemisega ning uute eksperimentide või nende komponentide väljatöötamise pole panustatud. Viimastel aastatel oleme aga selles valdkonnas edasi liikunud ja nüüd osaleme CMS eksperimendi Level 1 triggeri väljaarendamises. Antud valdkond on enim seotud just meie uurimisteedega kuna leptonilistes kanalites Higgsi otsimisel on äärmiselt oluline just tau leptoniga sündmuste leidmise kvaliteet. Seda aga mõjutab otseselt tauga seotud L1 triggeri süsteemi võimekus. LHC järgmise tööfaasi jaoks ongi väljatöötamisel uus L1 trigger, kus tänu riistvara arengule leiame, et on võimalik kasutada suuremas mahus komplekssemaid algoritme ning seeläbi parandada oluliselt huvipakkuvate signaalisündmuste mahakirjutamist ning teha seda sõltumata oluliselt halvenevast mürakeskkonnast LHC järgmise kõrgema intensiivsusega töötsükli ajal 2026+.

Antud töö on omakorda mitmel tasandil. Esmalt on huviobjektiks reaalne elektroonika arendus, mis on vajalik, et komplekssemaid algoritme jooksutada säilitades endiselt sündmuste filtreerimisvõime $\sim 40\text{MHz} \rightarrow 100\text{kHz}$. Teine pool on nende samade algoritmide arendamine, kuna on arvestatav vahe, kas teostada sündmuste rekonstrueerimist arvutusfarmides ilma ajapiiranguta või teostatakse seda online režiimis, kus aeg on kriitiline ressurss. Tulenevalt uue suuna välja arendamisest on antud valdkonnas meil ka tugev koostöö TalTech elektroonikutega, kelle aastatepikkune kogemus FPGA riistvara ja algoritmide arendamises tuleb kasuks eksperimentaalse osakestefüüsika vastava valdkonna loomisel.

Tulenevalt CMS eksperimendi kompleksisusest ning andmete keerukusest ei ole otstarbekas sellise mastaabiga eksperimendi andmete analüüsimine ühes andmekeskuses. HEP tööühm on seega panustanud hajusarvutuse (nii Grid kui hiljem ka pilvearvutuse) arendusse nii Eestis

kui maailmas. Ka tulevikku vaadates on temaatika endiselt aktuaalne ning toetava elemendina kõrge energia osakestefüüsika analüüsiks tuleb pidevalt hoida silma peal ka viimase generatsiooni andmekaevanduse, masinõppe kui hajusarvutuse tehnoloogiatel ning neisse ka panustada. Järjest rohkem leiab kasutust erinevate masinõppe tehnoloogiate kasutamine uutes kontekstides kui ka trend GPU baasil arvutuste kiirendamiseks.

Teoreetiline füüsika, astrofüüsika ja kosmoloogia

Teoreetiliste uuringute suund on fenomenoloogiline. KBFI uurimisteemad on seotud nii osakestefüüsika katseandmete interpreteerimisega kui ka arengutega kosmoloogias ja astrofüüsikas. Omaette teoreetiliste teemadena on KBFI arendamisel statistilise füüsika ja gravitatsiooni uurimissuunad.

Teoreetilises osakestefüüsikas tegelevad KBFI teadlased LHC kiirendi tulemuste interpreteerimisega uue füüsika kontekstis, samuti madala energia eksperimentide tulemuste analüüsiga. KBFI teadlased töötavad välja uusi teooriaid Higgsi bosoni omaduste analüüsiks ja universumi tumeaine olemasolu seletamiseks osakestefüüsika abil. Hetkel ja lähitulevikus toimub tormiline areng astrofüüsikas ja kosmoloogias, mis on seotud universumi tumeaine ja tumeenergia olemasoluga ja vajadusega neid seletada, aga ka gravitatsioonilainete ja kümne päikese massiga mustade aukude olemasolu avastamisega. Hetkel on nii tumeaine kui ka tumeenergia olemus teadusele teadmata. Tänu gravitatsioonilainete avastamisele on tekkinud uus uurimissuund, mitmekanaliline astronoomia, mille eesmärgiks on saada uusi teadmisi just universumi süvastruktuuri kohta ja mille arendamisse panustavad ka KBFI teadlased. Kosmoloogia uurimissuund KBFI on seotud tumeaine omaduste uurimisega just osakestefüüsikat ja mitmekanalilise astronoomia tulemustest lähtuvalt, aga ka erinevate tumeaine kandidaatide käitumise simuleerimisega arvutiprogrammide abil. Prioriteetseks uurimissuunaks on ka Universumi inflatsiooni sidumine osakestefüüsika teooriaga. Tänu gravitatsioonilainete mõõtmisele on saanud võimalikuks uute gravitatsiooniteooriate testimine kosmoloogias. Need võivad ilmneda mustade aukude või gravitatsioonilainete omaduste muutumises võrreldes Einsteini teooriaga, aga ka gravitatsioonilise tumeaine olemasolus. KBFI teadlased on uurinud nii ürgsete mustade aukude tumeainet kui ka massiivsete gravitonide tumeainet. Kõik need teemad kokku, teoreetiline osakestefüüsika, astrofüüsika ja kosmoloogia ning gravitatsioon moodustavad ühtse terviku, millele KBFI teadlased lähenevad võimalikult mitmekülgsete nurkade alt. Selleks tegevuseks on KBFI tippkeskus "Tume universum," mis teeb selles vallas koostööd Tartu Ülikooli Füüsika Instituudi ja Tartu Observatooriumi teadlastega.

Statistilise füüsikaga seoses tegelevad KBFI teadlased erinevate füüsika probleemide ja kompleksüsteemide uurimisega. Muu hulgas uuritakse erinevaid difusiooniprotsesse (nii normaalne kui ka anomaalne difusioon, klassikaline ja kvant-Browni liikumine) ning nende olulisust ja mõju erinevate kompleksüsteemide käitumisele. Difusiooniprotsessid on olulised nii rakkude funktsioneerimisel, kondenseeritud aine teoorias, astrofüüsikas aga ka sotsioloogias, majanduses, ökoloogias, keelte dünaamika jaoks, ning mujal. Enamasti tuleb arvesse võtta teisigi protsesse nagu näiteks omavaheline interaktsioon, mis võib avalduda

erinevate jõudude kaudu, aga ka vahetusprotsessidena (KBFI teadlaste poolt uuritakse näiteks kineetilise heaolu vahetuse mudeleid, mis modelleerivad teatud majandussüsteeme, ent on analoogsed gaaside kineetilise energia modelleerimisele), konkurentsina (keelte dünaamika ja ökoloogilised süsteemid) või millegi muuna. Viimastel aastatel on mõistetud ka alamsüsteemide või indiviidide heterogeensuse olulisust süsteemi kui terviku käitumisele ning seda uuritakse ka KBFI teadlaste poolt; muu hulgas on välja pakutud mehhanism astmefunktsiooni tekkimiseks heterogeensetes süsteemides. Viimase aja uueks uurimissuunaks on Bayesi statistika kasutamine semiootilistes ja keeleteadusega seotud nimetamismängudes, mis on huvipakkuvad nii inimeste õppeprotsesside modelleerimiseks ja mõistmiseks, aga ka tehisintellekti rakendustega seoses.