

2017. a kokkuvõte

## **Teaduse tippkeskuste toetamine teaduse rahvusvahelise konkurentsivõime ning tippkvaliteedi tugevdamiseks**

---

Toetuse andmise üldeesmärgiks on Eesti teadus- ja arendusasutuste rahvusvaheliselt kõrge kvaliteediga teadus- ja arendustegevuse toetamine ja jätkusuutlikkuse tagamine ning sellega eelduste loomine Eesti teaduse koostöö- ja konkurentsivõime tugevdamiseks Euroopa teadusruumis.

### **Tegevuste alluviimine**

2017. aastal jätkas tegevust 9 tippkeskust.

Järgnevalt on toodud tippkeskuste 2017.a tegevuste kokkuvõtted

#### **1) TK131 Globaalmuutuste ökoloogia looduslikes ja põllumajanduskooslustes (EcolChange)**

Tippkeskuses jätkus väga intensiivne ja edukas teadustöö. Tegevuskavas püstitatud eesmärgid said täidetud ja teaduspublikatsioonide arv ületatud.

Empiirilised ja teoreetilised teadusuuringud hõlmasid bioloogiliste koosluste ja ökosüsteemide liigilise ja funktsionaalse mitmekesisuse uuringuid globaalmuutuste peamistel gradientidel, pidades silmas nii kliimamuutuste kui ka intensiivistuva maakasutuse mõju. Lisaks uuriti kliimamuutuste mõju ka retrospektiivselt (igikeltsast eraldatud DNA info); erineva inimõju tingimustes olevate märgalade lämmastiku ja süsiniku aineringlust (kasvuhoonegaaside CO<sub>2</sub>, CH<sub>4</sub> ja N<sub>2</sub>O voogusid, sh 29 piirkonna turbasoodes kõigil mandritel, Eesti 24s sooökosüsteemis). Uuriti lenduvate taimsete stressisignaali emissiooni biotiliste ja abiootiliste stresside toimel keskendudes kvantitatiivsetele seostele stressiintensiivsuse ja stressivastuse vahel.

Tippkeskuse teadustöö jätkus edukalt just rühmade vahelise teaduskoostöö vallas, mida initsieeris teadurite mõttekoda. Arutluse all oli kaks suuremat teemat, teadusalast ühistegevust: 1) Toitainete fikseerimine ja mükoriisa globaalsed analüüsid; 2) Märgalade globaalne andmestik, mida saame koos edasi arendada. Pandi paika ühiste tööde ajakava..

#### **2) TK133 Tume universum**

2017. a. jätkus tippkeskuse töö kõigis tippkeskuse teadussuundades. Töös osalevad teoreetilise füüsika ja eksperimentaalse osakestefüüsika töörühmad KBFist, KBFi teadusarvutuskeskus, gravitatsiooni töörühm TÜst ning kosmoloogia töörühm Tartu Observatooriumist. Uuriti tumeaine mudeleid ja töötati LHC kiirendi andmetega. CERNi koostöö raames korraldati teadustööd CMS eksperimendis ja viidi läbi koolitusi CERNis füüsika suvetudengitele ja füüsikaõpetajatele.

Jätkati uuringuid ja teaduskoostööd skalaar-tensori gravitatsiooniteooria valdkonnas. Uuriti inflatsiooni mudeleid ja teooria kooskõlastust päikesesüsteemi vaatlustega ning uuriti kuidas nähtava ja mittenähtava materia mõju valguselevimisele ja gravitatsiooniläätseefekti bimeetriselise gravitatsiooniteoorias.

Tippkeskuse uurimisteamadega liitus uusi inimesi ja laiendati tegevust ka gravitatsiooni uurimise kolmes uues teadussuunas

Tippkeskuse teemadel korraldati kaks rahvusvahelist konverentsi. Tartu-Tuorla kosmoloogiaseminar, mille osalejate hulgas olid astrofüüsika ja fundamentaalfüüsika tippteadlased peamiselt Eestist ja Soomest, aga ka mitmetest kaugematest valdkonna tippkeskustest. Ning Tartus korraldati teaduskonverents "Geometric Foundations of Gravity", mille eesmärk oli kokku tuua maailma tippteadlasi üldrelatiivsusteooria laienduste, gravitatsiooniteooria aluste ja kosmoloogia erialal.

#### **3) TK134 Kontrollitud korrastatus kvant- ja nanomaterjalides**

**Terahertsspektroskoopia ja madala energiaga ergastuste** uurimisel jätkusid alustatud katsed multiferroidsete monokristallidega ja koostöö teoreetikutega. **Tuumamagnetresonantspektroskoopias (TMR)** määrati uute taastuval toormel baseeruvate diastereomeersete makrotsükliiliste nanokonteinerite omadusi.

**Mittelineaarne optiline spektroskoopia ja kvantkeemilise arvutused** Näidati, et katsetega mõõdetud kehefootoni neeldumist on võimalik kvantkeemiliste DFT meetodil tehtud arvutustega kvantitatiivselt ennustada, kuid selleks on vaja konkreetne arvutusmeetod väga hoolikalt valida. Tulemuse uudsus seisnebki selles, et varem pole sellised arvutused loodetud täpsust kunagi saavutanud.

**PPMS ja aatomijõumikroskoopia** Uuriti sünteesitud nanoosakesi ja mõõdeti sadestatud kilede omadusi.

**Aatomkihtsadestamine** Aatomkihtsadestamise rühmas jätkus sadestusprotsessi optimeerimine võrdleva parametriseerimise meetodil (temperatuur ja muud protsessi parameetrid), et saada uutest ainetest koosnevaid kilesid. Uuriti valmistatud objektide magneetuvust ja mõõdeti spektreid erinevatel tingimustel.

**Nanoosakeste süntees, uurimine ning nanoökotoksikoloogia** KBFI's sünteesiti (L. Seinberg) uued rauaoksiidi nanoosakesed, mis on oma eelkäijatest 4 korda väiksemad. Lisaks täiendati seniseid sünteesitud nanomaterjali ka uudsete katematerjalide väljatöötamisega, mis võimaldab laiendada nende rakendusi biomeditsiini valdkonnas. Edaspidi on kavas hiirkatsed koostöös TÜ teadlastega.

#### **4) TK141 Uudsed materjalid ja kõrgtehnoloogilised seadmed energia salvestamise ja muundamise süsteemidele**

TK uurimisgrupid on täitnud tegevuskavas seatud eesmärgid aastateks 2016-2017. Kaitstud on hulgaliselt doktoritöid, arendatud rahvusvahelist koostööd juhtivate uurimisgruppide ja keskustega üle maailma, aga ka koostööd TK gruppide vahel.

Lühidalt kokkuvõttes on kahe aasta olulisemad tulemused järgmised: (1) On arendatud välja uudsed tehnoloogilised lähenemised odavate ja keskkonnasõbralike materjalide ning neil baseeruvate (opto, nano)elektroonika struktuuride valmistamiseks, mis on jõudnud ka patentideni. Uurimis- ning arendustöö tulemused on avaldatud/avaldamisel ja patenteeritud/patenteerimisel.

Projekti raames on antud suunal aruandeaastatel avaldatud 40 1.1. kategooria publikatsiooni, saadud 7 patenti ning kaitstud 8 doktoritööd. (2) Sünteesiti uudsed superhapped ja alused, mis on rakendatavad katalüsaatoritena homogeenses katalüüsis ning ka elektrokeemilistes vooluallikates. Testiti põhjalikult saadud ühendite omadusi. (3) Sünteesiti optimeeritud poorsusega (eripind, pooride ruumala) uudsed süsinikmaterjalid ning kasutati neid Na-ioon-patareide ja vesinikku absorbeerivate õhukesekihiliste NaAlH<sub>4</sub>/C jt komposiitmaterjalide kandjatena. Uuriti metallide ja poorse süsiniku ning ioonse vedeliku vahelise piirpinna ehitust in situ FTIR ja in situ AFM/STM, Raman ja operando sünkrotronkiirgusallikast initsieeritud XPS meetoditega. Tehti kindlaks potentsiaalid, millest alates algavad intensiivsed faradiprotsessid. Sünteesiti erinevate Pt-metallidega aktiveeritud elektrodimaterjalid PEM kütuseelementide tarbeks ja võrreldi saadud tulemusi väärismetallidel põhinevate PEMide andmetega. Näidati, et mõned Fe-N-C või Co-N-C tsentreid sisaldavad materjalid on kõrge katalüütilise aktiivsusega ning seda isegi 500 kuni 1000 töötunni jooksul. (4) Viidi läbi ülikiire IBL kiirguse süstemaatilised uuringud erinevates ühendite klassides (Lu<sub>0.8</sub>Y<sub>0.2</sub>SiO<sub>5</sub>: Ce, HfO<sub>2</sub>, PbF<sub>2</sub>, CeF<sub>3</sub>, Na<sub>2</sub>Mo<sub>2</sub>O<sub>7</sub>, CaMoO<sub>4</sub>, KI, CsI) ning näidati, et CsI korral on IBL saagis 33 ph/MeV. See on kõrgeim seni uuritud materjalide hulgas ning omab perspektiivi PET tomograafias. Samuti arendati edasi kiirete protsesside uurimiseks vajalikku impulss-katoodluminesentsi seadet ning saadi rekordiline ajaline lahutus alla 50 ps (5) Sünteesiti keraamilised niklit mittedisaldavad anoodid tahkeoksiidsete kütuseelementide tarbeks ja testiti nende omadusi operando XPS ja Kõrgtemperatuurse XRD meetoditega. Jätkati väikese nurga all hajuva neutronkiirguse meetodite arendamist operando elektrokeemiliste protsesside mehhanismide uurimiseks.

#### **5) TK142 Genoomika ja Siirdemeditsiini tippkeskus**

Genoomika ja Siirdemeditsiini tippkeskus on jätkanud püstitatud laiemate eesmärkide täitmist, milleks on avastada seoseid inimese genoomivariantide ja haiguste tekkemehhanismide vahel. Tippkeskuse teadlasrühmade koostöö on tihenunud ning alustatud on mitmete ühisprojektidega, sh skisofreenia ning autoimmuunhaigused, kus bioinformaatiliste analüüside abil prioritseeritud bioloogiliste kandidaadite mõju fenotüübile modelleeritakse nii rakulistes kui ka hiiremudelipõhistes testsüsteemides.

2017 aastal läbiviidud tegevuste fookus oli kahel suunal: 1) TÜ Eesti Geenivaramu (TÜ EGV) kohordi geneetiline kirjeldamine selle kogu ulatuses (N:52,000 geenidoonorit) ning 2) DNA järjestusvariatsioonide mõju hindamine fenotüübile nii molekulaarsel tasemel kui ka haigestumisriskidele.

Projekt on käivitunud väga edukalt. Kõik projekti tegevuskavas 2017 aastaks püstitatud sisulised eesmärgid on täidetud, samuti on tehtud ettevalmistused 2018 aastaks projekti tegevuskavas planeeritud tegevusteks.

Aastal 2017 jätkus tippkeskuse seminaride korraldamine, mida pidasid erinevate tippkeskuse uurimisrühmade juhid ja täiendavalt korraldati kaks kutsutud välislektoriga (Prof. Ruth Loos, Dr. Li Tian) seminari.

## 6) TK143 Molekulaarse Rakutehnoloogia Tippkeskus

### • Molekulaarse modelleerimise uurimisrühm

Teadustegevuse põhitulemusteks olid:

Struktuurselt mitmekesised ja unikaalsed HIV-1 mitte-nukleosiidse ja nukleosiidsete pöördtranskriptaasi inhibiitorite andmeseeriad võimaldasid esmakordselt arendada kvantitatiivsete struktuur-aktiivsus sõltuvuste (QSAR) mudelid Ki väärtustele

Malaaria jaoks uudsete juhtühendite leidmiseks koostati eksperimendiandmete ulatusliku kureerimise, filtreerimise ning ühendamise tulemusena kolmkümmend modelleeritavat andmeseeriat.

Analüüsi laiapõhjaliselt avatult kättesaadavate QSAR teenusete, integreeritud modelleerimis keskkondi, ja andmehoidlaid Internetis.

Arvutuslikult ennustatud närvikasvufaktori artemini retseptori GFRa3 agonistid näitasid neuropaatilise valu loomkatsetes olulist terapeutilist efekti.

- **Antibiootikumide ja molekulaarse mikrobioloogia uurimisrühm** Uurimisrühmas tegeleti aktiivselt bakterite stressivastusega fokusseerudes signaalmolekuli (p)ppGpp poolt vahendatud protsessidele. **Süsteemibioloogia ja sünteetilise bioloogia uurimisrühm** Selgitati fosforüleerimiskaskaadide rolle pärmi rakutsükli regulatsioonis. Saadud andmete põhjal konstrueeriti uudsete omadustega pärmitüvesid, milles saab efektiivsemalt toota mitmeid vajalikke biomolekule.
- **Taimsete signaalide uurimisrühm** Taimsete signaalide uurimisrühmas jätkusid uuringud kus selgitati taimede veekasutuse efektiivsust mõjutavate mehhanismide uurimist.
- **Viiruste ja imetajarakkude uurimisrühm** Üheks peamiseks töösuunaks oli viiruse infektsiooni mõjutavate ühendite kavandamine ja iseloomustamine.
- **Keemilise sünteesi uurimisrühm** Selgitati oligopeptiidide kasutusvõimalusi katalüsaatoritena orgaanilises sünteesis.
- **Molekulaarse biotehnoloogia uurimisrühm** Töötati välja membraanaktiivseid peptide, mis võimaldavad ravimeid rakku viia.

## 7) TK145 Eesti-uuringute Tippkeskus

teisel tööaastal oli uurimistegevuse peasiht erinevate ühiskondlikult esilolevate uurimisprobleemide valdkondadeüleline analüüs, integreerides kirjandus- ja keeleteaduse, arvutuslingvistika, folkloristika, filosoofia ja muusikateaduse. Taotluses kavandatud idee järgi toimus põhiline uurimistegevus 12 valdkondadeüleles töörühmas.

Esmaoluline oli süsteemiteooriate rakendamine kultuuri uurimisele, komplekssete süsteemnähtuste (keskkondade) ja emergentsuse (esildumise) kirjeldus ning mõistestiku arendamine. Määrav on olnud sümbiotismi ja arenduspraktikate formuleerimine ja ühiste vaatepunktide kujundamine erinevatel humanitaaraladel. Sümboolsete representatsioonide lihtsustav tõlgendus- ja avaldusviis on desorienteeriv ja lähialade uurijate vahel antagonismi põhjustav.

Esmased väljundid on äratanud juba üldist tähelepanu. Uued sümbiootilised uurimistulemused ühendavad nt kõne- ja muusika ja keeleuurijate meetodid. Eri valdkondade huviobjektid olid nt kuulujutu ja vandenõuteooriate poliitiline diskursus, keelelise konteksti mõju kommunikatsioonile, emotsioonid ja suhted narratiivides, sh lahkavamustes, ning vaimuseisundite rahvapsühholoogilise käsituse väljavaated. EUTK on võimaldanud otsest ja edukat rahvusvahelist koostööd (ühisprojektid ja uurimisteed ja nende väljundid, väljaannete ühistoimetamine) välispartnerite ja assotsieerunud liikmetega. Neid kaasati tööruhmade töösse ja isegi mõne juhtimisse.

Kokku korraldati 26 konverentsi, 20 seminari, 23 paneeli teadusfoorumitel, 2 doktorikooli, kaitsti 11 doktoritööd.

## **8) TK146 Teadmistepõhise ehituse tippkeskus**

Tippkeskus otsib lahendusi nullenergiahoonete ehitamiseks, hoonetes toimuva energiatarbimise ja -tootmise kokkusobitamiseks tsentraalse energiatootmisega ning ressursitõhususe parandamiseks nii energiatõhususe kui puidu kasutuse lisamise abil. Tippkeskuse teemad lähtuvad praeguste liginullenergiahoonetega seotud suurtest tehnilistest ja majanduslikest väljakutsetest, mille lahendamiseks on vaja teaduslikke uuringuid, uute lahenduste leidmist ning nende katsetamist nii laboratoorses tingimustes kui pilootprojektides, et pikemas perspektiivis oleks võimalik jõuda nullenergiahooneteni.

Tippkeskuse kahe aasta töö tulemusena on avaldatud üle 100 teadusartikli, kaitstud 8 doktorikraadi ning korraldatud 9 teavitussüritust.

## **9) TK148 IT Tippkeskus EXCITE**

Tippkeskus EXCITE ühendab 16 Eesti uurimisgruppide, et uurida ning töötada välja meetodid turvaliste ja töökindlate IT süsteemide ja teenuste arendamiseks. EXCITE tegutseb maatrikstegevuse põhimõttel, kus formeeritakse ühised teadusteemad seni eraldi tegutsenud teadusgruppide vahel ning ka juhendatakse ühiselt doktorante ja järeldoktooreid. 2017 aastal rahastati EXCITE eelarvest 17 ühisjuhendatavat doktoranti ja ühisjuhendatavat järeldoktorit <https://www.excite.it.ee/team>. Maatrikspõhimõttel toimuv ühisjuhendamine on edukalt käivitunud ning toimib. Selle tõestuseks on ka esimesed PI-de ühispublikatsioonid. Ühispublikatsioonide osakaal peaks planeeritult järgmisel aastal veel tõusma, sest teadustöö planeerimise ja publitsereerimise tsükkel on enamasti rohkem kui üks aasta.

Käivitunud on eri uurimisgruppide vaheline otsesuhtlus, mis on pidev ja tulemuslik. Seega täidab EXCITE oma peamist eesmärki - konsolideerida praegu väga killustunud eesti IT teadusmaastikku.

Toetust saavad projektid panustavad meetme „Eesti T&A rahvusvahelise konkurentsivõime suurendamine ja osalemine üle-euroopalistes teadusalgatustes” tegevuse „Teaduse tippkeskuste toetamine teaduse rahvusvahelise konkurentsivõime ning tippkvaliteedi tugevdamiseks” väljundnäitaja „Tippkeskuse teadlaste poolt kalendriaastal avaldatud publikatsioonide arv” sihttaseme saavutamisse.

### **Väljundnäitajate saavutamine**

Üheksast tippkeskusest täitis kaheksa enda poolt seatud 2017.a väljundnäitaja taseme (Tabel 1).

Tabel 1 Tippkeskuse teadlaste poolt avaldatud publikatsioonid

Tippkeskus	Toetuse saaja	Sihhtmäär 2017	Saavutustase 2017	Täitmine
TK131 (EcolChange)	Eesti Maaülikool	62	87	140%
TK133 (Dark Universe)	Keemilise ja Bioloogilise Füüsika Instituut	134	254	190%
TK134 (EQUiTANT)	Keemilise ja Bioloogilise Füüsika Instituut	23	37	161%
TK141 (HiTechDevices)	Tartu Ülikool	120	131	109%
TK142 (GenTransMed)	Tartu Ülikool	48	135	281%
TK143 (CEMCE)	Tartu Ülikool	50	57	114%
TK145 (CEES)	Eesti Kirjandusmuuseum	60	126	210%
TK146 (ZEBE)	Tallinna Tehnikaülikool	30	70	233%
TK148 (EXCITE)	Tallinna Tehnikaülikool	52	20	38%
Kokku		579	917	158%

TK 148 on selgitanud erinevust väljundnäitajate alatäitmise kohta:

Iseloomulikult IT erialadele ei kajastu paljud publikatsioonid WoSis, sest IT aladel publitseeritakse palju eelretsenseeritavaid konverentsartikleid. Nende kvaliteet on sageli sama või isegi kõrgem ja nad läbivad täpselt samamoodi eelretsenseerimise. Seetõttu on tippkeskuse seda näitajat mitte päris õige võrrelda näiteks loodusteaduste või meditsiinivaldkonna näitajatega. aastal 2017 publitseerisid EXCITE töögrupid 20 WoS artiklit, mis on 1.3 artiklit iga töögrupi kohta. Peale selle on ilmunud veel 8 ajakirjaartiklit, mis on indekseeritud SCOPUse järgi, kuid WoSis ei kajastu. EXCITE konsortsium on 2017 aastal samuti avaldanud 39 konverentsipublikatsiooni, kõik eelretsenseeritud, ja paljud sama või kõrgema kvaliteediga kui ajakirjapublikatsioonid. See teeb keskest läbi 4.25 publikatsiooni iga EXCITE töögrupi kohta. Nende arvude põhjal võib järeldada, et 2017. aastal saavutatud näitaja on aga heal tasemel, tippkeskuse teadlased publitseerivad pidevalt ja piisaval arvul kvaliteetseid publikatsioone.

### Eelarve kasutamine

2017. aastal esitati 44 maksetaotlust (MT) toetuse saamiseks summas 4,9 miljonit eurot, välja maksti aasta lõpuks 40 MT-d, abikõlblikud kulud 4,4 miljonit eurot, toetus 4,2 miljonit eurot.

Tabelis 2 on toodud projektide võetud kohustused ja tehtud abikõlblike kulude väljamaksed 2016-2017.

Tabel 2. Projektide võetud kohustused ja väljamaksed 2016-2017 (abikõlblikud kulud)

Projekti nimi	Võetud kohustused, euro	Välja makstud, euro	% võetud kohustustest
Globaalmuutuste ökoloogia looduslikes ja põllumajanduskooslustes, TK131	4 436 585	960 195	22%
Genoomika ja Siirdemeditsiini Tippkeskus, TK142	5 072 144	850 550	17%
Eesti-uuringute Tippkeskus, TK145	4 818 898	744 017	15%
Molekulaarse Rakutehnoloogia Tippkeskus, TK143	4 811 048	695 501	14%
Teadmistepõhise ehituse tippkeskus, TK146	4 361 314	629 800	14%
Kontrollitud korrastatus kvant- ja nanomaterjalides, TK134	3 850 666	542 981	14%
Uudsed materjalid ja kõrgtehnoloogilised seadmed energia salvestamise ja muundamise süsteemidele, TK141	4 738 306	545 806	12%
Tume universum, TK133	4 014 712	334 864	8%
IT Tippkeskus EXCITE, TK148	5 072 228	276 797	5%
<b>Grand Total</b>	<b>41 175 902</b>	<b>5 580 512</b>	<b>14%</b>