

Esildis Ago Samosoni esitamiseks Eesti Teaduste Akadeemia liikme kandidaadiks keemia valdkonnas

Teaduslik profiil

Esitame Ago Samosoni Eesti Teaduste Akadeemia liikme kandidaadiks keemia valdkonnas. Samoson on rahvusvaheliselt tunnustatud keemilise füüsika ja tahke keha tuumamagnetresonantsi (NMR) spektroskoopia teadlane, kelle avastused, uurimismeetodid ja tehnoloogilised lahendused on oluliselt avardanud võimalusi ainete struktuuri ja molekulaarse dünaamika uurimiseks kogu maailmas.

Tema teadustöö ühendab fundamentaalsete seaduspärasuste mõistmise, eksperimentaalsete meetodite loomise ning nende rakendamise keemias, materjaliteaduses ja bioloogias. Samosoni panuse eriline väärtus seisneb võimes viia teoreetilised ideed praktiliselt toimivate mõõtemetodite ja -seadmeteni, mis võimaldavad lahendada varem raskesti käsitletavaid teaduslikke küsimusi.

Ago Samoson on suurepärane näide tippteadlasest, kes suudab fundamentaaluuringud edukalt siduda unikaalse insenertehnilise innovatsiooni, ettevõtlikkuse ja globaalse tehnosiirdega.

2. Olulisemad teadussaavutused ja uued uurimismeetodid

Räni-29 ja alumiinium-27 spektroskoopia: seosed spektri ja keemilise struktuuri vahel

Samosoni varaste oluliste saavutuste hulka kuulub panus räni-29 NMR-spektroskoopia väljaarendamisse silikaatide struktuuri uurimiseks. Koostöös akadeemik Endel Lippmaa, Märt Mägi ning saksa teadlaste Engelhardti ja Grimmeriga aitas ta selgitada seoseid räni aatomite keemilise ümbruse ja NMR-spektrite vahel, kandes põhiosa eksperimentaalsest tööst.

Hiljem leidis ta spektri ja struktuuri vahelisi seaduspärasusi ka alumiinium-27 puhul. Need uuringud laiendasid võimalusi silikaatide, tseoliitide ja teiste anorgaaniliste materjalide ehituse mõistmiseks ning aitasid kujundada tahke keha NMR-spektroskoopiat oluliseks keemilise struktuurianalüüsi meetodiks.

DOR-meetod: läbimurre kvadрупooltuumade spektroskoopias

Üks Samosoni silmapaistvamaid saavutusi on topeltpöörlemise ehk DOR-meetodi väljatöötamine. Alumiinium-27 ja teiste kvadрупooltuumade NMR-spektroskoopiat raskendab tuumade vastastikmõju elektrivälja gradiendiga, mis laiendab spektrijooni ja varjab keemiliselt olulist teavet.

Samosoni lahenduses pöörleb proov korraga ümber kahe kindla nurga all paikneva telje. See võimaldab keskmistada spektrijooni laiendavaid vastastikmõjusid ning parandada spektrite lahutusvõimet. Meetodi aluseks oli maagilise nurga all pöörlemise teoreetilise käsitlemise laiendamine kõrgemat järku vastastikmõjudele.

Teoreetilise idee teostamine nõudis kahe üksteise sees pöörleva rootori keeruka süsteemi loomist. Selles oli oluline osa koostööl Tiit Anupõlluga. Nii sündis fundamentaalsest teadusideest praktiline uurimismeetod, mis avardas kvadрупooltuumade kõrglahutusega spektroskoopia võimalusi.

DOR meetodile (Double Orientation Rotation) on võetud **tehnoloogia patent** UC Berkley's ning see on kujunenud kujunes sealse ülikoolisüsteemi ajaloo üheks **edukaimaks ja tulusaimaks litsentsimüügiks** mitte-biomeditsiini valdkonnas, muutudes Brukeri spektrometrite kaudu reaalseks **tööstusstandardiks**.

Ülikiire MAS-tehnoloogia: uued võimalused vesinikutuumade uurimiseks tahkistes

Teine Samosoni keskne saavutus on ülikiire maagilise nurga all proovipöörlemise ehk MAS-tehnoloogia arendamine. Eriti oluline on selle mõju vesinik-1 ehk prootoni NMR-spektroskoopiale tahketes ainetes. Vesinikutuumade tugevad vastastikmõjud põhjustavad laiu spektrijooni, mis raskendavad molekulaarse struktuuri uurimist. Proovi ülikiire pöörlemine vähendab neid mõjusid ja võimaldab eristada senisest märksa peenemaid struktuurseid detaile.

Samoson ühendas rootorite läbimõõdu vähendamise tsirkooniumdioksiidi heade mehaaniliste omaduste kasutamisega. Selle tulemusena saavutas ta aastatel 1999–2004 pöörlemissagedused 50–70 kHz, 2012. aastal 100 kHz ning 2021. aastal 200 kHz. Tema laboris jätkunud arendustöö on viinud pöörlemissageduseni **320 kHz**, mis on **tänane maailmarekord**. Võrreldes tema teadustee alguses kasutatud 2–3 kHz-ga näitab see pikaajalist võimekust ületada mõõdetehnoloogia seniseid piire. See ülikiire maagilise nurga all pöörlemise tehnoloogia on viinud ¹H tahkise-NMR-i lahutusvõime täiesti uuele tasemele, avades keemikutele, struktuuribioloogidele ja materjaliteadlastele seni kättesaamatud võimalused keerukate molekulide, polümeeride ja kõrgtehnoloogiliste materjalide atomaarse struktuuri uurimiseks reaalajas.

Ülikiire MAS võimaldab tahketes proovides paremini eristada vesinikutuumade keemilisi nihkeid ja J-sidestusi ning rakendada tõhusaid magnetiseerumise ülekande ja väikese võimsusega lahtisidestamise meetodeid. Väiksemad rootorid vähendavad ka vajalikku proovikogust kümnetelt milligrammidelt alla poole milligrammini. See on eriti oluline bioloogiliste ja teiste raskesti valmistatavate proovide uurimisel.

Korrastamata materjalide uurimine: tselluloosi struktuuri eristamine

Samosoni avastuste hulka kuulub korreleeritud keemiliste nihete dispersiooni tuvastamine ning selle rakendamine tselluloosi amorfse ja kristalse osa eristamisel. Selle tulemuseni aitas jõuda Eesti Teaduste Akadeemia toetatud koostöö Taiwaniga.

Uuring tõstab esile NMR-spektroskoopia väärtuse korrastamata materjalide uurimisel: meetod võimaldab saada teavet ka struktuuride kohta, millel puudub korrapärane kristalliline ehitus.

3. Teaduspreemiad ja rahvusvaheline tunnustus

Günther Laukieni preemia 2026

Samosoni rahvusvahelise tunnustuse oluline tähis on 2026. aasta Günther Laukieni preemia, mille ta pälvis koos CNRS-i teadlase Guido Pintacudaga. Preemiaga tunnustati nende teedrajavat panust ülikiire MAS-NMR-spektroskoopia arendamisse ja rakendamisse. Seda tunnustust loetakse globaalselt NMR-valdkonna kõige tähtsaimaks ja autoriteetsemaks tunnustuseks.

See tunnustus tõstab esile Samosoni töö teaduslikku originaalsust ning selle võimet avada uusi rakendusi keemias, struktuuribioloogias ja materjaliteaduses. Auhind kinnitab tema pikaajalise meetodi- ja tehnoloogiaarenduse rahvusvahelist mõju.

Eesti riigi teaduspreemiad

1997. aastal pälvis Samoson **riigi teaduspreemia** täppisteaduste alal kvadрупooltuumade kahemõõtmelise kõrglahutusega tuumaresonantsspektromeetria arendamise eest pulbrilistes ja amorfsetes tahkistes.

2006. aastal anti tema juhitud kollektiivile **riigi teaduspreemia** innovaatilise tooteni viinud väljapaistva teadus- ja arendustöö eest teemal „Ülikiire proovirootatsiooni tehnika arendamine“. Koos Samosoniga kuulusid laureaate hulka Tiit Tuherm, Jaan Past, Andres Reinhold ja Tiit Anupõld. Preemia tunnustas fundamentaalteadusest lähtunud arendustöö jõudmist praktilise tehnoloogilise lahenduseni.

Muud olulised tunnustused

Kvadрупooltuumade spektroskoopia arendamisega seostub Samosoni 1989. aastal pälvitud mainekas **R&D 100** tunnustus, mida peetakse tehnoloogiamaailma Oskariks. Seda antakse kõige silmapaistvamatele innovatsioonidele, mistõttu see on Eesti teadusloos unikaalne saavutus. 2010. aastal valiti ta erakordse panuse ja teadustöö mõju eest oma valdkonnas **Rahvusvahelise Magnetresonantsi Ühingu tunnustatud liikmeks (ISMAR Fellow)**. Samal aastal pidas ta ka auloengu **Rocky Mountain Conference**’il. Talle on omistatud mainekas **Robert Vaughan Memorial Lecture auhind**, mida antakse silmapaistvaimatele tahkise-NMR teadlastele ja mis tähistab kõrgeimat rahvusvahelist eksperthinnangut tema teadusloomele.

Ago Samosoni panust Eesti teadusesse on tunnustatud **Valgetähe III klassi teenetemärgiga** 2001. aastal.

4. Teadustulemuste rakendused ja koostöö tööstusega

MAS-tehnoloogia jõudmine rahvusvahelisse kasutusse

Samosoni teadustöö on viinud fundamentaalsetest ideedest rahvusvaheliselt kasutatavate tehnoloogiliste lahendusteni. Tema karjäär hõlmab tööd teadusinstrumentide tootja Bruker juures ning tema arendatud ülikiire proovipöörlemise tehnoloogia põhimõtted on jõudnud laialdaselt kasutusse, sealhulgas kommertsinstrumentidesse.

Ka Brukeri tänapäevased seadmed kasutavad väikese läbimõõduga rootoreid, mis võimaldavad ülikiiret MAS-i. Samosoni panus on aidanud kujundada selle tehnoloogia tahke keha NMR-spektroskoopia oluliseks uurimisvahendiks.

Rakendused keemias, materjaliteaduses ja biomeditsiinis

Rahvusvahelises koostöös on Samosoni meetodeid rakendatud väikeste molekulide, polümeeride, anorgaaniliste materjalide ja bioloogiliste süsteemide uurimiseks. Need võimaldavad saada teadmisi nii ainete struktuurist kui ka dünaamikast ning toetavad muu hulgas membraanvalkude ja teiste biomeditsiiniliselt oluliste süsteemide uurimist.

NMR-tehnoloogia arendamisel kujunenud pädevusele tuginedes on ta laiendanud oma teadustööd diagnostilise metaboolika ja fluoriidioonakude valdkonda. Need uurimissuunad seovad tema senise kogemuse uute küsimustega terviseuuringutes ja energiasalvestuses.

Jätkuv teadus- ja arendustegevus

Samoson juhib aastatel 2023–2027 Eesti Teadusagentuuri rahastatud projekti „Vesiniku NMR tahkises ja komplementaarsed rakendused“.

Tema jätkuvat juhtivat rolli kinnitab ka 2026. aastal ilmunud artikkel „Benchtop High-MAS NMR for Paramagnetic Materials“, milles ta on viimane ja üks korrespondeerivatest autoritest. Töö käsitleb kompaktsel püsimagneetil põhineva NMR-seadme arendamist ning avab võimalusi mõõtetehnoloogia laiemaks kasutamiseks.

5. Haridus, teadlaskarjäär ja panus teaduskogukonda

Haridus ja töökogemus

Ago Samoson lõpetas 1978. aastal Tartu Riikliku Ülikooli füüsika erialal ning kaitses 1984. aastal akadeemik Endel Lippmaa juhendamisel väitekirja kvadрупooltuumade kõrglahutusega NMR-spektroskoopiast. Ta on töötanud Teaduste Akadeemia Küberneetika Instituudis ning Keemilise ja Bioloogilise Füüsika Instituudis, sealhulgas viimase direktorina. Tema rahvusvaheline töökogemus hõlmab California Ülikooli Berkeley, Uppsala Ülikooli, Warwicki Ülikooli ja ettevõtet Bruker. Praegu on ta Tallinna Tehnikaülikooli juhtivteadur ja spinnidisaini (*spin-design*) labori juhataja.

Spinnidisaini labori ehitamist alustas Ago Samoson 2010. aastal. Labor on unikaalne süvatehnoloogiline keskus, mida rahastati Samosoni intellektuaalomandi tulust ja rahvusvaheliste finantseeringutega. Tema meeskond pakub riistvaralisi ja metodoloogilisi

lahendusi, mis edestavad või võistlevad võrdselt selliste hiidudega nagu Bruker Corporation (aastakäive ~3,4 miljardit USD) ja JEOL Ltd. (aastakäive ~1,2 miljardit USD). Fakt, et globaalsed tippülikoolid eelistavad spetsiifiliste ja ülikeeruliste NMR-sondide tellimisel just Tallinna Tehnikaülikooli spinndisaini laborit, **näitab Eesti teadusinseneeria absoluutset maailmataset.**

Teaduskoostöö ja ühiskondlik tegevus

Samoson on panustanud teaduskoostöö edendamisse. Tema labori algatatud Balti NMR-konverents toetab piirkonna teadlaste suhtlust, teadmiste vahetamist ja uute koostöösidemetekujunemist. Samuti osaleb ta avalikus mõttevahetuses, käsitledes oma kirjutistes teaduse rahastamist, kõrghariduse korraldust, energeetikat ning teadusliku pädevuse rakendamist Eesti arengus.

Ago Samoson tuntud oma julgete, argumenteeritud ja sirgjoonelistekoisukohtade poolest Eesti teaduskorralduse, kõrghariduse kvaliteedi ja innovatsioonipoliitika teemadel. Tema akadeemiline sõltumatus, terav kriitiline mõtlemine ja reaalne kogemus teaduse ja ettevõtluse sidumisel ühtivad täielikult teaduste akadeemia põhiväärtustekaj missiooniga.

6. Ago Samosoni teadustöö kuuluvus keemiavaldkonda

Teaduslik sisu ja uurimisküsimused

Samosoni kandidatuur keemia valdkonnas põhineb tema teadustöö sisulisel panusel füüsikalisse keemiasse, keemilisse füüsikasse kaj keemilisse spektroskoopiasse. Tema uuringute keskmes on seosed ainete struktuuri kaj NMR-spektrite vahel ning meetodid aatomite keemilise ümbruse, molekulaarse struktuuri kaj dünaamika määramiseks.

Seda näitavad räni-29 kaj alumiinium-27 spektroskoopia rakendused silikaatide kaj tseoliitide uurimisel, keemiliste nihete kaj nende anisotroopia käsitlemine ning vesinik-1 spektroskoopia võimaluste laiendamine tahketes ainetes. Meetodite kasutamine anorgaaniliste ühendite, väikeste molekulide, polümeeride kaj bioloogiliste materjalide analüüsis kinnitab nende otsest tähendust keemiateadustele.

Interdistsiplinaarne meetodiarendus keemia teenistuses

Samosoni töö tugev füüsikaline kaj insenertehniline komponent toetab keemiliste uurimisküsimustekalahendamist. Rootorite kaj mõõteseadmetekarendamise teaduslik eesmärk on olnud keemiliselt olulise teabe parem eristamine ning uute aineklasside kaj struktuuride uurimine.

Tema füüsikaharidus ning NMR-i füüsikaliste alustek põhjalik tundmine annavad sellele interdistsiplinaarsele teadustööle tugeva aluse. Tema panus ühendab füüsikaliste seaduspärasustek mõistmise keemilise struktuurianalüüsi kaj praktiliste rakendustekga.

7. Sobivus Eesti Teaduste Akadeemia liikmeks valimiseks

Ago Samosoni originaalsed teadustulemused, rahvusvaheliselt tunnustatud meetodiarendus ja maailmas kasutatavad tehnoloogilised lahendused moodustavad kaaluka terviku. Tema tegevus on tugevdanud Eesti teaduse rahvusvahelist positsiooni ning näidanud, kuidas Eestis loodud fundamentaalsed teadmised võivad kujundada terve uurimisvaldkonna võimalusi.

Tema teaduslik loovus, pikaajaline rahvusvaheline mõju, tunnustatud saavutused ning jätkuv panus uute uurimismeetodite ja rakenduste loomisse annavad tugeva aluse Ago Samosoni valimiseks Eesti Teaduste Akadeemia liikmeks keemia valdkonnas.

Akadeemik Mart Saarma

(allkirjastatud digitaalselt)

Akadeemik Andres Metspalu

(allkirjastatud digitaalselt)