

MATEMAATIKA-LOODUSTEADUSKONNA KEEMIAINSTITUUDI TEADUS- JA ARENDUSTEGEVUSE AASTAARUANNE 2010

1. Instituudi struktuur

Keemiainstituut, Department of Chemistry, Mihkel Kaljurand

- Analüütilise keemia õppetool, Chair of Analytical Chemistry, Mihkel Kaljurand
- Anorgaanilise keemia õppetool, Chair of Inorganic Chemistry, Toomas Tamm
- Bioorgaanilise keemia õppetool, Chair of Bioorganic Chemistry, Nigulas Samel
- Biotehnoloogia õppetool, Chair of Biotechnology, Raivo Vilu
- Molekulaartehnoloogia õppetool, Chair of Molecular Technology, Mati Karelson
- Orgaanilise keemia õppetool, Chair of Organic Chemistry, Margus Lopp
- Keemilise analüüsi teadus- ja katselaboratoorium, Laboratory of Chemical Analysis

2. Instituudi T&A iseloomustus (täidab str.üksus)

2.1 Õppetoolide või muude alamstruktuuriüksuste T&A kirjeldus ja tähtsamad tulemused
(sh õppetoolide või muude alamstruktuuriüksuste *kuni 5 olulisemat publikatsiooni, tähtsamad T&A finantseerimise allikad ning soovi korral T&A-ga seotud tunnustused, ülevaade teaduskorralduslikust tegevusest ülevaade teadlasmobiilsusest ning hinnang teadustulemustele*)

Analüütilise keemia õppetool

TAT kirjeldus:

Põhisuunad:

- kompuuteriseeritud analüütilised lahutusmeetodid,
- instrumentaalanalüüsi meetodite täiustamine,
- analüüsi kombineeritud meetodid,
- bioprotsesside kapillaarelektroforeetiline seire,
- ülekritilise CO₂ uusi rakendusi

Olulisemad publikatsioonid:

Ilmus monograafia:

Koel, M.; Kaljurand, M. (2010). Green Analytical Chemistry. Royal Society of Chemistry

Tähtsamad TAT finantseerimise allikad:

M.Kaljurand: T023 (0140023s08) Analüütilised lahutusmeetodid biomeditsiinis keskkonnakeemias. 2008–2013.

SF0140023s08AP – M.Kaljurand – Väikesemahulise teaduse infrastruktuuri kaasajastamine teadusteema SF0140023s08 raames. 2010-2011

BF148 – M.Kaljurand – Massispektromeetri Q-Star Elite hoolduskulude osaline kompenseerimine. 01.10.2010-01.08.2011.

TAP6-3 (EU structural funds) – M.Koel – Loodusteaduste Maja infrastruktuuri edasiarendus. 2010-2011

G7303 – M. Koel – Poorsete nanomaterjalide modifitseerimine 2008 – 2010

G7818 – M.Kaljurand – Fraktsioonide kogumine kapillaarelektroforeesis. 2009–2011

ETF8289 – M. Borissova – Alkүүлimidasoolium soolade kasutamine massispektromeetria liitsüsteemides. 2010-2012.

Lep8126 – M.Kaljurand – Mitte-empiriilised (ab initio) kvantkeemilised arvutused tihendusfunktsionaali meetodil. 2008-2010

Anorgaanilise keemia õppetool

TAT kirjeldus:

Põhisuunad:

- Metallorgaaniliste ühendite struktuuri, tasakaalude ja katalüütiliste omaduste kvantmehaaniline modelleerimine.
- Orgaaniliste reaktsioonimehhanismide modelleerimine
- Konformatsioonianalüüsi meetodite arendamine ja rakendused
- Analüütiliste meetodite väljatöötamine keerukate orgaaniliste segude uurimiseks

Olulisemad publikatsioonid:

Uudsemaa, M.; Kanger, T.; Lopp, M.; Tamm, T. (2010). pK_a calculation for monoprotonated bipiperidine, bismorpholine and their derivatives in H₂O and MeCN. *Chemical Physics Letters*, 485(1-3), 83 - 86.

Tähtsamad TAT finantseerimise allikad:

G8255 – T.Tamm – Asümmeetriline induktsioon konformatsiooniliselt paindlikes süsteemides. 2010-2013

G7135 – M. Uudsemaa – Asümmeetrilise organokatalüüsi reaktsiooniteede modelleerimine. 2007–2010.

Bioorgaanilise keemia õppetool

TAT kirjeldus:

Põhisuunad:

- rasvhappe dioksügenaaside struktuur-funktsioon uuringud
- uute bioaktiivsete oksülipiinide otsing ja omaduste uurimine,
- biokatalüütilised meetodid orgaanilises sünteesis
- lipoproteiinide metabolism

Tähtsamad tulemused:

Vanemteadur A. Lõökene osales koostööprojekti, milles selgitati välja molekulaarsed mehhanismid, mis on aluseks silmapõletikku põhjustava adenoviiruse 37 seostumisel rakkudele. Kasutades tuumamagnetresonantsi, pinna plasmonite resonantsi, röntgenstruktuuranalüüsi ning molekulaarset modelleerimist näidati, et selle adenoviiruse kattevalk Ad37 knob seostub spetsiifiliselt rakkude pindadel esineva hargneva ahelaga sialhapetest koosneva glükaaniga. See uurimus võib saada aluseks uut tüüpi sahhariididel põhineva viirusvastaste ravimite väljatöötamisel.

Olulisemad publikatsioonid:

Nilsson EC, Storm RJ, Bauer J, Johansson SM, Lookene A, Ångström J, Hedenström M, Eriksson TL, Frängsmyr L, Rinaldi S, Willison HJ, Pedrosa Domellöf F, Stehle T, Arnberg N. The GD1a glycan is a cellular receptor for adenoviruses causing epidemic keratoconjunctivitis. *Nat Med*. 2011 Jan;17(1):105-9. Epub 2010 Dec 12

Tähtsamad TAT finantseerimise allikad:

SF0140010s08 – N. Samel – Bioaktiivsed lipiidid metabolism, signaaliülekanne ja regulatsioon. 2008-2013.

SF0140133s08 – O. Parve – Biokatalüütiline stereokeemiline süntees. 2008-2013.

ETF6911 – N. Samel - Tsüklooksügenaaside katalüüsi ja inhibeerimise iseärasused. 2007-2010.
ETF7941 – K. Varvas – Prostaglandiinide süntees punavetikates. 2009-2012.
ETF8276 – I. Järving – 11R-lipoksügenaasi katalüütiliste omaduste modifitseerimine. 2010-2013.
ETF8300 - A. Lõokene – Angipoietiini sarnaste valkude 3 ja 4 molekulaarsed toimemehhanismid lipoproteiinide metabolismis. 2010-2013.

Biotehnoloogia õppetool

TAT kirjeldus:

Põhisuunad:

- keskkonna biotehnoloogia,
- rakkude ainevahetuse modelleerimine (metaboolika),
- säästvad tehnoloogiad,
- (Eesti) keskkonnaseisundi jätkusuutlikkuse hindamine;

Tähtsamad tulemused:

Kasutades süsteemibioloogia meetodeid uuriti *E. coli* ja *L. lactis* metabolismi iseärasusi. Formuleeriti uudne atsetaadi ülevoolumehhanism *E. coli* rakkudes. Näidati, et *L. lactis*'e ainevahetus muutub efektiivsemaks rakkude kasvukiiruse suurenedes. Saadud tulemused võimaldavad optimeerida rekombinantseid molekule tootvate rakkude disainimist.

Olulisemad publikatsioonid:

Nahku, R.; Valgepea, K.; Lahtvee, P.-J.; Erm, S.; Abner, K.; Adamberg, K.; Vilu, R. (2010). Specific growth rate dependent transcriptome profiling of *Escherichia coli* K12 MG1655 in accelerostat cultures. *Journal of Biotechnology*, 145(1), 60 - 65.

Valgepea, K.; Adamberg, K.; Nahku, R.; Lahtvee, P.-J.; Arike, L.; Vilu, R. (2010). Systems biology approach reveals that overflow metabolism of acetate in *Escherichia coli* is triggered by carbon catabolite repression of acetyl-CoA synthetase. *BMC Systems Biology*, 4:166 (01.12.2010).

Gavrilova, Olga; Vilu, Raivo; Vallner, Leo (2010). A life cycle environmental inventory of oil shale produced and consumed in Estonia. *Resources, Conservation & Recycling*, 55, 232-245

Tähtsamad TAT finantseerimise allikad:

R.Vilu: T190 (0140090s08); Toidu süsteemibioloogia ja füüsika. 2008–2013.

G7636 – T-M. Laht – Juustu mikrostruktuuri mõju biokeemilistele ja mikrobioloogilistele protsessidele juustu valmistamise ajal. 2008 – 2011.

EU28912 – R.Vilu – Kolmemõõtmelise front-face fluorents-spektromeetria rakendamine. 2009-2011.

AR10130 – R.Vilu – Anaeroobsel kääritamisel põhinevate biogaasi energiatehnoloogiate biokeemiliste protsesside optimeerimine ning monitooringu ja juhtimismeetodite arendamine. 2010-2015.

Molekulaartehnoloogia õppetool

TAT kirjeldus:

Teadustöö põhisuunad:

- molekulaar- ja nanotehnoloogiad,
- heterotsüklilised ühendid,
- haruldased muldmetallid ja ühendid,
- kvantkeemia.

2010. aastal jätkus õppetoolis keemiliste ühendite ja elusorganismide ning ümbritseva keskkonna vaheliste vastasmõjude detailsete mehhanismide süvitsi uurimine, kasutades selleks arvutikeemia ja keemilise

informaatika meetodeid. Uurimistöõ hõlmas uute arvutuslike meetodite ja vastava tarkvara väljaarendamist ning väljatöötatud meetodite ja tarkvara valideerimist ja rakendamist erinevate füüsiko-keemiliste mudelsüsteemide ja bioloogiliste süsteemide omaduste kirjeldamise kaudu ning uute meetodite rakendamist biomeditsiinilist ja keskkonnaturbelist huvi pakkuvate omaduste ennustamiseks. Meetodite väljaarendamise suunal arendati edasi originaalset tehishärvivõrkude ning põhikomponentide analüüsi kombinatsiooni, mis võimaldab leida suure ennustusvõimega mudeleid väikeste peptiidide, sh. rakuseina läbistavate peptiidide omaduste kirjeldamiseks. Rakenduslikul suunal kontsentreeruti arvutusmodelite arendamisele mitmesuguste keskkonnaturbega seotud omaduste jaoks (polükloreeritud dibenso-pdioksiinide ja dibensofuraanide fotolüüsi poolestusajad; orgaaniliste ühendite toksilisus heitvetes). Koostöös välispartneritega arendati välja arvutigriididel põhinev süsteem vähivastaste ravimite disaini kiirendamiseks. Uued arvutusmodelid arendati välja ka asendatud fullereenide viirusvastase aktiivsuse ennustamiseks. Ajakirjas *Chemical Reviews* avaldati suuremahuline (77 lk.) ülevaade keemiliste ja füüsikaliste omaduste struktuur-omadus sõltuvuste alal. Alates 2008. aastast osaleb õppetool „Keemilise bioloogia“ teaduse tippkeskuses.

Tähtsamad tulemused:

2010 aastal professor Mati Karelsoni jt osalusel loodud leiutistele õiguskaitse taotlemiseks esitati seitse patenditaotlust, sh kaks Kanada, kaks Mehhiko ja kaks Euroopa ja üks USA patenditaotlus. Kahele leiutisele anti välja USA patent.

Olulisemad publikatsioonid:

Katritzky, A.; Kuanar, M.; Slavov, S.; Hall, C.; Karelson, M.; Kahn, I.; Dobchev, D. (2010). Quantitative Correlations of Physical and Chemical Properties with Chemical Structure; Utility for Prediction. *Chemical Reviews*, 110(1), 5714-5789.

Tähtsamad TAT finantseerimise allikad:

M.Karelson: T031 (0140031s09); Uued arvutusmeetodid keerukate biomolekulide süsteemide kirjeldamiseks. 2009 – 2014.

V348 (EL 6. RP projekt) – M.Karelson – Hajusarvutustel põhinev tarkvarasüsteem kiireks vähivastaste ühendite disainiks. 2007-2010.

Orgaanilise keemia õppetool

TAT kirjeldus:

Põhisuunad

- enantiomeerselt puhaste ühendite süntees,
- bioaktiivsete ühendite süntees,
- asümmeetriline katalüüs,
- asümmeetriline oksüdatsioon,
- asümmeetriline organokatalüüs

Tähtsamad tulemused:

A. *Organokatalüsaatorid Prof. T.Kanger.*

Uuriti uute võimalike farmakofooride saamisvõimalusi tsükliiliste amiinide vahendatud asümmeetrilistes reaktsioonides.

- Leiti uus diastereoselektiivne multikomponentne kaskaadreaktsioon mis viib 3-asabitsüklo[3.2.0]heptaani derivaatideni
- Sünteesiti uued diasendatud bimorfoliini derivaadid.
- Leiti, et bipiperidiin on efektiivne ligand Cu(II)-katalüüsitud enantioselektiivse Henry reaktsiooni jaoks.
- Leiti, et morfoliin-3-karboksüülhappe sool on efektiivne ligand Michael'i liitumisreaktsioonis.

B. *Asümmeetriline oksüdatsioon. Prof. M.Lopp.*

Tehti kindlaks 1,2-diketonides asümmeetrilise oksüdatsiooni mehhanism, kasutades märgitud hapnikuaatomeid.

Kasutades 1,2-diketonide asümmeetrilise oksüdatsiooni kaskaadreaktsiooni sünteesiti rida uusi nukleosiidid analooge biotestimiseks.

Atsüklilised nukleosiidi analoogid:

- Näitasime, et atsüklilised nukleosiidi analoogid, millel on tertsiaarne OH-rühm võivad mõjutada HBV ja HIV viiruseid (tertsiaarne OH-rühm võib käituda sarnaselt furanitsükli hapnikule)
- Sünteesitud atsüklilised nukleosiidi analoogid omasid üldiselt madalat või keskmist antiviiiruslikku aktiivsust.

Tsüklilised nukleosiidi analoogid:

- Valmistasime 20 uut ühendit biokatseteks
- Leidsime, et teatud element-modifitseeritud nukleosiidi analoogid (miitotoksilised) omavad tugevat anti-HIV aktiivsust.

Olulisemad publikatsioonid:

1. Kriis, K.; Ausmees, K.; Pehk, T.; Lopp, M.; Kanger, T. A Novel diastereoselective Multicomponent Cascade Reaction. *Organic Letters*, **2010**, 12(10), 2230 - 2233.
2. Marju Laars, Henri Raska, Margus Lopp, Tõnis Kanger. Cyclic amino acid salts as catalysts for the asymmetric Michael reaction. *Tetrahedron: Asymmetry*, **2010**, 21, 562–565.
3. Artur Noole, Kristin Lippur, Andrus Metsala, Margus Lopp, Tõnis Kanger. Enantioselective Henry Reaction Catalyzed by CuII Salt and Bipiperidine. *J. Org. Chem.* **2010**, 75, 1313–1316.
4. Kristin Lippur; Cindy Elmers; Tiit Kailas; Aleksander-Mati Müürisepp; Tõnis Pehk; Tõnis Kanger; Margus Lopp. Synthesis of 5,5'-Disubstituted Bimorpholines. *Synth. Comm.*, **2010**, 40, 266–281.
5. Aav, R.; Lippur, K.; Lopp, M.; Werner, F. (2010). (1S,2S,6S,9S)-6-Methyl-5-oxobicyclo-[4.4.0]decane-2,9-diyl diacetate. *Acta Crystallographica Section E: Structure Reports Online*, 66, o2584.
6. Paju, A.; Pääri, M.; Selyutina, A.; Zusinaite, E.; Merits, A.; Pehk, T.; Siirde, K.; Müürisepp, A.M.; Kailas, T.; Lopp, M. Synthesis of novel acyclic nucleoside analogues with anti-retroviral activity. *Nucleosides Nucleotides & Nucleic Acids*, **2010**, 29(9), 707 - 720.

Tähtsamad TAT finantseerimise allikad:

M.Lopp: T725 (0142725s06); Uued asümmeetrilise sünteesi strateegiad ja meetodid. 2006–2011.

G7114 – M.Lopp – Asendatud 1,2-diketonide asümmeetrilised reaktsioonid ja nende rakendused bioaktiivste ühendite sünteesil. 2007–2013.

G8289 – T.Kanger –Efektiivsus organokatalüüsis . 2010–2013.

VA433 – T.Kanger – Design of heterogeneous metal catalysts supported on apatite.2009-2014

TAR8103 (AS Archimedes) – M. Lopp – Keemilise bioloogia tippkeskus. 2009-2015.

Muud olulist:

TTÜ 2009. aasta parimaks õppejõuks matemaatika- ja loodusteaduskonnas valiti professor Margus Lopp

Alates 01.09.2010 valiti matemaatika-loodusteaduskonna dekaaniks prof Tõnis Kanger.

Prof. Andrei Malkov Loughborough Ülikoolist (UK), külastas laboratooriumi ja pidas loengu seminaris.

2.2 Instituudi teadus- ja arendustegevuse teemade ja projektide arvandmed

Haridus- ja Teadusministeerium:

sihtfinantseeritavad teemad 6

baasfinantseerimise toetusfondist rahastatud projektid (sh TTÜ tippkeskused) 4

riiklikud programmid
teiste ministriumide poolt rahastatavad riiklikud programmid
uuriija-professori rahastamine
SA Eesti Teadusfond:
 grandid 11
 ühisgrandid välisriigiga
 järel doktorite grandid (SA ETF ja Mobilitas) 1
 tippteadlase grandid (Mobilitas)
Ettevõtluse Arendamise Sihtasutus:
 eeluuringud
 arendustoetused
SA Archimedesega sõlmitud lepingud:
 Infrastruktuur (nn „mini-infra“, „asutuse infra“, „biogaas“) 3
 Eesti tippkeskused 1
 muud T&A lepingud
SA Keskkonnainvesteeringute Keskusega sõlmitud lepingud 1
siseriiklikud lepingud 6
EL Raamprogrammi projektid 2
välisriiklikud lepingud 4

2.3 Instituudi töötajate poolt avaldatud sihtfinantseeritava teadusteema taotlemisel arvestatavad eelretsenseeritavad teaduspublikatsioonid (ETIS klassifikaatori alusel 1.1, 1.2, 1.3, 2.1, 2.2, 3.1, 3.2, 3.3, 4.1 ja 5.1)

1.1

Arike, L.; Adamberg, K.; Nahku, R.; Borissova, M.; Vilu, R. (2010). Identification and relative quantification of proteins in Escherichia coli proteome by “up-front” CID. European journal of mass spectrometry, xx - xx. [ilmumas]

Aav, R.; Lippur, K.; Lopp, M.; Werner, F. (2010). (1S,2S,6S,9S)-6-Methyl-5-oxobicyclo-[4.4.0]decane-2,9-diyl diacetate. Acta Crystallographica Section E: Structure Reports Online, 66, o2584

Makarõtševa, N.; Lepane, V.; Alliksaar, T.; Heinsalu, A. (2010). A 10,000 year record of sediment pore water dissolved organic matter characteristics from Lake Peipsi as revealed by HPSEC . Chemistry and Ecology, 26(4), 13 - 24.

Tulp, I.; Dobchev, D. A.; Katritzky, A. R.; Acree, W. Jr.; Maran, U. (2010). A General Treatment of Solubility 4. Description and Analysis of a PCA Model for Ostwald Solubility Coefficients. Journal of Chemical Information and Modeling, 50(7), 1275 - 1283.

Gavrilova, Olga; Vilu, Raivo; Vallner, Leo (2010). A life cycle environmental impact assessment of oil shale produced and consumed in Estonia. Resources, Conservation & Recycling, 55, 232 - 245.

Kriis, K.; Ausmees, K.; Pehk, T.; Lopp, M.; Kanger, T. (2010). A Novel Diastereoselective Multicomponent Cascade Reaction. Organic Letters, 12(10), 2230 - 2233.

Zekker, I.; Rikmann, E.; Tenno, T.; Menert, A.; Lemmiksoo, V.; Tenno, T. (2010). Achievement of a high nitritation efficiency on high surfaced biofilm carriers with free ammonia and temperature variations. Journal of Environmental Sciences, xx - xx. [ilmumas]

- Makarõtsõeva, N.; Seiman, A.; Vaher, M.; Kaljurand, M. (2010). Analysis of the degradation products of chemical warfare agents using a portable capillary electrophoresis instrument with various sample injection devices. *Procedia Chemistry*, 2(S1), 20 - 25.
- Raal, Ain; Kanut, Margarita; Orav, Anne (2010). Annual variation of yield and composition of the essential oil of common juniper (*Juniperus communis* L.) branches from Estonia. *Baltic Forestry*, 16(1), 50 - 56.
- Knjazeva, T.; Kaljurand, M. (2010). Capillary electrophoresis frontal analysis for the study of flavonoid interactions with human serum albumin . *Analytical and Bioanalytical Chemistry*, 397(6), 2211 - 2219.
- Orav, A.; Kailas, T.; Mõõrisepp, M. (2010). Chemical investigation of the essential oil from berries and needles of common juniper (*Juniperus communis* L.) growing wild in Estonia. *Natural Product Research*, 24(19), 1789 - 1799.
- Orav, A.; Sepp, J.; Kailas, T.; Mõõrisepp, M.; Arak, E.; Raal, A. (2010). Composition of essential oil of aerial parts of *Chamomilla suaveolens* from Estonia. *Natural Product Communications*, 5(1), 133 - 136.
- Orav, A.; Raal, A.; Arak, E. (2010). Content and composition of the essential oil of *Chamomilla recutita* (L.) Rauschert from some European countries. *Natural Product Research*, 24(1), 48 - 55.
- Katritzky, Alan R.; Slavov, Svetoslav H.; Stoyanova-Slavova, Iva B.; Karelson, Mati (2010). Correlation of the Photolysis Half-Lives of Polychlorinated Dibenzo-p-dioxins and Dibenzofurans with Molecular Structure. *Journal of Physical Chemistry A*, 114(7), 2684 - 2688.
- Seiman, A.; Makarõtsõeva, N.; Vaher, M.; Kaljurand, M. (2010). Detection of nerve agent degradation products in different soil fractions using capillary electrophoresis with contactless conductivity detection. *Chemistry and Ecology*, 26(S2), 145 - 155.
- Schmitz, A.; Thormann, W.; Moessner, L.; Theurillat, R.; Helmja, K.; Mevissen, M. (2010). Enantioselective CE analysis of hepatic ketamine metabolism in different species in vitro. *Electrophoresis*, 31(SI), 1506 - 1516.
- Noole, A.; Lippur, K.; Metsala, A.; Lopp, M.; Kanger, T.. (2010). Enantioselective Henry Reaction Catalyzed by CuII Salt and Bipiperidine. *Journal of Organic Chemistry*, 75(4), 1313 - 1316.
- Katritzky, A.R.; Kasemets, K.; Slavov, S.; Radzvilovits, M.; Tõmm, K.; Karelson, M. (2010). Estimating the toxicities of organic chemicals in activated sludge process . *Water Research*, 44(8), 2451 - 2460.
- Karelson, M.; Dobchev, D.; Karelson, G.; Tamm, T.; Tõmm, K.; Nikonov, A.; Mutso, M.; Merits, A. (2010). Fragment based Development and Comparison of HCV Protease Inhibitors for Treatment of Hepatitis C. *Journal of Medicinal Chemistry*, 1 [ilmumas]
- Lepane, V.; Tõnno, I.; Alliksaar, T. (2010). HPLC approach for revealing age-related changes of aquatic dissolved organic matter in sediment core. *Procedia Chemistry*, 2(S1), 101 - 108.
- Übner, M.; Kaljurand, M.; Lopp, M. (2010). Humic substances as a background electrolyte in

capillary electrophoresis. *Chemistry and Ecology*, 26(4), 157 - 165.

Orav, A.; Viitak, A.; Vaher, M. (2010). Identification of bioactive compounds in the leaves and stems of *Aegopodium podagraria* by various analytical techniques. *Procedia Chemistry*, 2(S1), 152 - 160.

Gavrilova, O.; Jonas, M.; Erb, K.; Haberl, H. (2010). International trade and Austria's livestock system: Direct and hidden carbon emission flows associated with production and consumption of products. *Ecological Economics*, 69(4), 920 - 929.

Koplimaa, M.; Menert, A.; Blonskaja, V.; Kurisoo, T.; Zub, S.; Saareleht, M.; Vaarmets, E.; Menert, T. (2010). Liquid and gas chromatographic studies of the anaerobic degradation of baker's yeast wastewater. *Procedia Chemistry*, 2(S1), 120 - 129.

Stulova, I.; Adamberg, S.; Krisciunaite, T.; Kampura, M.; Blank, L.; Laht, T.-M. (2010). Microbiological quality of raw milk produced in Estonia. *Letters in Applied Microbiology*, 51(6), 683 - 690.

Borissova, M.; Mahlapuu, R.; Vaher, M. (2010). Monitoring the redox cycle of low-molecular peptides using a modified target plate in MALDI MS. *Talanta*, 83, 274 - 280.

Lepane, V.; Morriset, M.; Viitak, A.; Laane, M.; Alliksaar, T. (2010). Partitioning of metals between operational fractions in sediment record from Lake Peipsi. *Chemistry and Ecology*, 26(4), 35 - 48.

Vaher, M.; Matso, K.; Levandi, T.; Helmja, K.; Kaljurand, M. (2010). Phenolic compounds and antioxidant activity of bran, flour and whole grain of different wheat varieties. *Procedia Chemistry*, 2(S1), 76 - 82.

Uudsemaa, M.; Kanger, T.; Lopp, M.; Tamm, T. (2010). pKa calculation for monoprotonated bipiperidine, bimorpholine and their derivatives in H₂O and MeCN. *Chemical Physics Letters*, 485(1-3), 83 - 86.

Dobchev, D.A.; Mäger, I.; Tulp, I.; Karelson, G.; Tamm, T.; Tämm, K.; Jänes, J.; Langel, Ü.; Karelson, M. (2010). Prediction of cell penetrating peptides using artificial neural networks. *Molecular Biosystems*, 6(2), 79 - 89. [ilmumas]

Dobchev, D. A.; Mäger, I.; Tulp, I.; Karelson, G.; Tamm, T.; Tämm, T.; Jänes, J.; Langel, Ü.; Karelson, M. (2010). Prediction of Cell-Penetrating Peptides Using Artificial Neural Networks. *Current Computer-Aided Drug Design*, 6(2), 79 - 89.

Katritzky, A.; Kuanar, M.; Slavov, S.; Hall, C.; Karelson, M.; Kahn, I.; Dobchev, D. (2010). Quantitative Correlations of Physical and Chemical Properties with Chemical Structure; Utility for Prediction. *Chemical Reviews*, 110(1), 5714-5789.

Borissova, M.; Palk, K.; Vaher, M. (2010). Rapid analysis of free fatty acid composition in *Brassica rapa* L. and *Brassica napus* L. extracts by surface-assisted laser desorption time-of-flight mass spectrometry. *Procedia Chemistry*, 2(1), 174 - 179.

Nahku, R.; Valgepea, K.; Lahtvee, P.-J.; Erm, S.; Abner, K.; Adamberg, K.; Vilu, R. (2010).

Specific growth rate dependent transcriptome profiling of *Escherichia coli* K12 MG1655 in accelerostat cultures. *Journal of Biotechnology*, 145(1), 60 - 65.

Lippur, K.; Elmers, C.; Kailas, T.; Müürisepp, A-M.; Pehk, T.; Kanger, T.; Lopp, M. (2010). Synthesis of 5,5'-disubstituted bismorpholines. *Synthetic Communications*, 40(2), 266 - 281.

Paju, A.; Päre, M.; Selyutina, A.; Zusinaite, E.; Merits, A.; Pehk, T.; Siirde, K.; Müürisepp, A.M.; Kailas, T.; Lopp, M. (2010). Synthesis of novel acyclic nucleoside analogues with anti-retroviral activity. *Nucleosides Nucleotides & Nucleic Acids*, 29(9), 707 - 720.

Valgepea, K.; Adamberg, K.; Nahku, R.; Lahtvee, P.-J.; Arike, L.; Vilu, R. (2010). Systems biology approach reveals that overflow metabolism of acetate in *Escherichia coli* is triggered by carbon catabolite repression of acetyl-CoA synthetase. *BMC Systems Biology*, xx - xx. [ilmumas]

Tuvikene, R.; Truus, K.; Robal, M.; Volobujeva, O.; Mellikov, E.; Pehk, T.; Kollist, A.; Kailas, T.; Vaher, M. (2010). The extraction, structure, and gelling properties of hybrid galactan from the red alga *Furcellaria lumbricalis* (Baltic Sea, Estonia). *Journal of Applied Phycology*, 22, 51 - 63.

Tuvikene, R.; Truus, K.; Robal, M.; Volobujeva, O.; Mellikov, E.; Pehk, T.; Kollist, A.; Tiiu, K.; Vaher, M. (2010). The extraction, structure, and gelling properties of hybrid galactan from the red alga *Furcellaria lumbricalis* (Baltic Sea, Estonia). *Journal of Applied Phycology*, 22(1), 51 - 63.

Martin, Dana; Karelson, Mati (2010). The Quantitative Structure Activity Relationships for Predicting HIV Protease Inhibition by Substituted Fullerenes. *Letters in Drug Design and Discovery*, 7(8), 587 - 595.

Helmja, K.; Vaher, M.; Püssa, T.; Orav, A.; Viitak, A.; Levandi, T.; Kaljurand, M. (2010). Variation in the composition of the essential oils, phenolic compounds and mineral elements of *Hypericum perforatum* L. growing in Estonia. *Natural Product Research*, xx - xx. [ilmumas]

Übner, M.; Kaljurand, M.; Lopp, M. Humic substances as a background electrolyte in capillary electrophoresis. *Chemistry and Ecology*, 2010, 26(4), 157 - 165

1.2

Reijenga, J.; Seiman, A. (2010). Cleaning-up dirty isotachopherograms in time and frequency domain. *Procedia Chemistry*, 2(S1), 67 - 75.

Orav, A.; Koel, M.; Kailas, T.; Müürisepp, M. (2010). Comparative analysis of the composition of essential oils and supercritical carbon dioxide extracts from berries and needles of Estonian juniper (*Juniperus communis* L.). *Procedia Chemistry*, 2(S1), 161 - 167.

Gretšušnikova, T.; Järvan, K.; Orav, A.; Koel, M. (2010). Comparative analysis of the composition of the essential oil from the shoots, leaves and stems the wild *Ledum palustre* L. from Estonia. *Procedia Chemistry*, 2(S1), 168 - 173.

Seiman, A.; Reijenga, J.. (2010). Cross-correlation capillary electrophoresis in unmodified commercial equipment. *Procedia Chemistry*, 2(S1), 59 - 66.

Parve, O.; Järving, I.; Martin, I.; Metsala, A.; Vallikivi, I.; Aidnik, M.; Pehk, T.; Samel, N. (2010). Lipase-Catalysed Acylation of Prostanoids. *ChemInform, On-Line*, -

Katritzky, A.R. Radzvilovits, M. Slavov, S. Kasemets, K. Tamm, K. Karelson, M. (2010). Quantitative structure-activity relationship modeling of bioconcentration factors of polychlorinated biphenyls. *Toxicological and Environmental Chemistry*, 92(7), 1233 - 1247.

Borissova, M.; Palk, K.; Vaher, M. (2010). Rapid analysis of free fatty acid composition in *Brassica rapa* L. and *Brassica napus* L. extracts by surface-assisted laser desorption/ionization time-of-flight mass spectrometry. *Procedia Chemistry*, 2(S1), 174 - 179.

Mazina, J.; Gorbatsova, J. (2010). Sample preparation for CE-DAD analysis of the water soluble vitamins in food products. *Procedia Chemistry*, 2(S1), 46 - 53.

1.3

Mardla, V.; Rätsep, I.; Kobzar, G.; Samel, N. (2010). COX inhibiitorite nimesuliidi, paratsetamooli ja metamisooli toime aspiriinresistentsete koronaarhaigete trombotsüütidele enne ja pärast aortokoronaarset šunteerimist. *Eesti Arst*, 89(7-8), 470 - 476.

2.1

Koel, M.; Kaljurand, M. (2010). *Green Analytical Chemistry*. Royal Society of Chemistry

3.1

Kaevand, Toomas; Kalda, Jaan; Öpik, Andres; Lille, Ülo (2010). Anisotropic percolating pathways in the thin films of polymeric PEDT/PSS complex and their relation to the electrical conductivity as revealed by the mesoscale simulation. In: *Technological Developments in Networking, Education and Automation: International Joint Conferences on Computer, Information, and Systems Sciences, and Engineering (CISSE 09)*, December 4 - 12, 2009. (Toim.) Elleithy, Khaled; Sobh, Tarek; Iskander, Magued et al.. Dordrecht: Springer, 2010, 263 - 268.

3.2

Lepane, V.; Gorohhova, J. (2010). Capillary electrophoretic characterisation of humic substances. J.A. Gonzales-Perez, F.J. Gonzales-Vila, G. Almendros (Toim.). *Advances in Natural Organic Matter and Humic Substances Research 2008-2010. XV Meeting of the International Humic Substances Society, Puerto de la Cruz, Tenerife, 27 June-2 July 2010. Proceedings.* (113 - 116). Digital CSIC. The Institutional Repository of "Consejo Superior de Investigaciones Científicas"

Sokk, O.; Kuusik, R.; Loigu, E.; Menert, A. (2010). Integration of Technologies: Biogas Production, Fertilizer Production and Biogas Upgrading. 12th World Congress on Anaerobic Digestion, Guadalajara, Jalisco - Mexico, 31 October - 4 November 2010 (6 p.). International Water Association

Kriis, K.; Ausmees, K.; Pehk, T.; Lopp, M.; Kanger, T. (2010). A novel diastereoselective multicomponent cascade reaction. In: *Program and Abstracts BOS 2010 International Conference on Organic Synthesis. Riga - Latvia, 2010, June 27 - 30*, 117.

Aav, R.; Pehk, T.; Tamp, S.; Tamm, T.; Kudrjašova, M.; Parve, O.; Lopp, M. (2010). Prediction and assignment of coupling constants of diastereomeric cyclopentane derivatives. In: *Program and abstracts: BOS 2010 International Conference on Organic Synthesis, Riga, Latvia, 2010, June 27-30.*, 2010, 47.

Lippur, K.; Merits, A.; Lopp, M.; Kanger, T. Synthesis of 2,2'-bimorpholines and their biological activity. In: *Program and abstracts: BOS 2010 International Conference on Organic Synthesis, Riga, Latvia, 2010, June 27-30.*

4.1

Lepane, Viia (Guest Editor) (2010). Chemistry and Ecology. Special issue: Proceedings of the 12th Nordic-Baltic International Humic Substances Society (IHSS) Chapter Symposium, Tallinn, Estonia, June 14-17, 2009.

5.1

Lõhelaid, H.; Järving, R.; Järving, I.; Samel, N. (2010). Chimeric allene oxide synthase-lipoxygenase fusion proteins. FEBS Journal, 277(S1), 251

2.4 Instituudis kaitstud doktoriväitekirjade loetelu

Kati Helmja, Keemiainstituut

Teema: *Determination of Phenolic Compounds and their Antioxidative Capability in Plant Extracts* (Meetodid fenoolsete ühendite määramiseks ja nende antioksüdatiivsuse hindamiseks)

Juhendaja: prof Mihkel Kaljurand

Kaasjuhendaja: vanemteadur Merike Vaher

Kaitses: 12.03.2010

Omistatud kraad: filosoofiadoktor (keemia)

Marju Laars, Keemiainstituut

Teema: *Asymmetric Organocatalytic Michael and Aldol Reactions Mediated by Cyclic Amines* (Asümmeetriline organokatalüütiline Michaeli ja aldoolreaktsioon tsükliliste amiinide toimel)

Juhendaja: prof Tõnis Kanger

Kaitses: 25.11.2010

Omistatud kraad: filosoofiadoktor (keemia)

Kristin Lippur, Keemiainstituut

Teema: *Asymmetric Synthesis of 2,2'-Bimorpholine and its 5,5'-Substituted Derivatives* (2,2'-bimorfoliini ja selle 5,5'-asendatud derivaatide asümmeetriline süntees)

Juhendaja: prof Tõnis Kanger

Kaitses: 16.04.2010

Omistatud kraad: filosoofiadoktor (keemia)

2.5 Instituudis järeldoktorina T&A-s osalenud isikute loetelu

MJD105, MOBILITAS Postdoctoral Research Grant 2010, Ploom Anu „Structure-reactivity relationships in reactions at atoms of the third period elements“

2.6 Instituudis loodud tööstusomandi loetelu

Keemiainstituudi professor Mati Karelson'i osalusel loodud leiutistele õiguskaitsse taotlemiseks esitati seitse patenditaotlust, sh kaks Kanada, kaks Mehhiko ja kaks Euroopa ja üks USA patenditaotlusi. Kahele leiutisele anti välja USA patent.

Esitatud patenditaotlused:

1. CA2704560A1

Use of oligonucleotides with modified bases in hybridization of nucleic acids

Taotlus esitatud: 03.05.2010

Omanik: Balti Tehnoloogiaarenduse AS

Autorid: Mati Karelson, Erkki Truve, Allan Olsper, Cecilia Sarmiento, Mart Saarma

2. MX2010004984A

Use of oligonucleotides with modified bases in hybridization of nucleic acids

Taotlus esitatud: 04.05.2010

Omanik: Balti Tehnoloogiaarenduse AS

Autorid: Mati Karelson, Erkki Truve, Allan Olsper, Cecilia Sarmiento, Mart Saarma

3. EP2217705A2

Use of oligonucleotides with modified bases in hybridization of nucleic acids

Taotlus esitatud: 20.05.2010

Omanik: Balti Tehnoloogiaarenduse AS

Autorid: Mati Karelson, Erkki Truve, Allan Olsper, Cecilia Sarmiento, Mart Saarma

4. CA2704549A1

Use of oligonucleotides with modified bases as antiviral agents

Taotlus esitatud: 03.05.2010

Omanik: Balti Tehnoloogiaarenduse AS

Autorid: Mati Karelson, Mart Saarma, Andres Merits

5. MX2010004983A

Use of oligonucleotides with modified bases as antiviral agents

Taotlus esitatud: 04.05.2010

Omanik: Balti Tehnoloogiaarenduse AS

Autorid: Mati Karelson, Mart Saarma, Andres Merits

6. EP2212420A2

Use of oligonucleotides with modified bases as antiviral agents

Taotlus esitatud: 20.05.2010

Omanik: Balti Tehnoloogiaarenduse AS

Autorid: Mati Karelson, Mart Saarma, Andres Merits

7. US20100224819

Method for manufacturing a smart packaging material

Taotlus esitatud 09.09.2010

Omanik: Raidenil OÜ

Autorid: Mati Karelson, Kaupo Karelson, Jaan Leis, Neinar Seli

Väljaantud patendid:

1. US7662315B2 (USA patent)

Infrapunakiirgusele tundlik komposiitmaterjal

Patent välja antud: 16.02.2010

Omanik: Raidenil OÜ
Autorid: Mati Karelson, Neinar Seli

2. US 7,786,292

Antisense agents combining strongly bound base-modified oligonucleotide and artificial nuclease

Patent välja antud: 31.08.2010

Omanik: Balti Tehnoloogiaarenduse AS

Autorid: Mati Karelson, Mart Saarma, Mehis Pilv

3. Instituudi infrastruktuuri uuendamise loetelu

Automaatne Polarimeeter MPC500, 23 647,31 eur

Rootoraurusti R-210, 2 837,68 eur

Röntgendifraktomeeter SMART X2S, 200 000,64 eur

Matlab litsents nr.656065, 3 465,00 eur

Portatiivne kapillaarelektroforeesi seade, 6 835,35 eur

UV-vis Spektrofotomeeter Varian/Cary 50 Bio, 14 562,27 eur

Ultrapuhta vee saamise süsteem, 14 675,39 eur

Vedelikukromatograafiline süsteem proteiinide puhastamiseks ÄKTApurifier, 50 529,19 eur