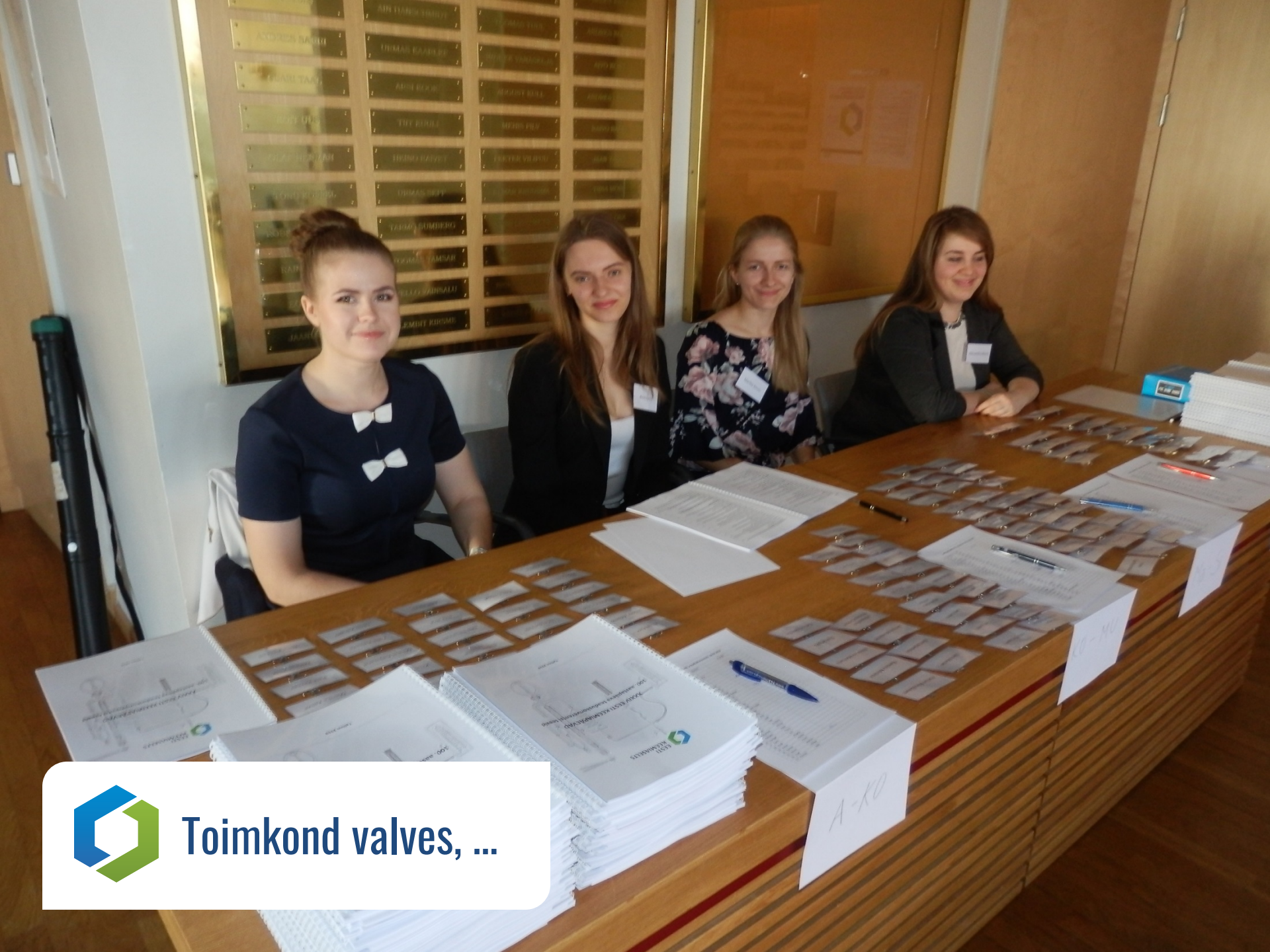




Eesti Keemiaseltsi 100. aastapäeva teaduskonverentsi

FOTOALBUM



Toimkond valves, ...



... tegutsev ...



... ja abivalmis





Alguse ootel ...







Eesti Keemiaseltsi
100. aastapäeva
TEADUSKONVERENTS



18. aprill 2019
kell 11.00-20.00
TalTech

Eesti Keemiaselts

100



Konverentsi avamine

Margus Lopp, Eesti Keemiaseltsi president



Eesti Keemiaseltsi
100. aastapäeva
TEADUSKONVERENTS



18. aprill 2019
kell 11.00-20.00
TalTech



1. sessioon
Tõnis Kanger, moderaator

Eesti Keemiaselts





Eesti Keemiaseltsi
100. aastapäeva
TEADUSKONVERENTS



18. aprill 2019
10.00 - 17.00
Tallinn

100



Eesti Keemia Selts 100. Ajalooline ülevaade
Kalle Truus, Tallinna Ülikool



Eesti Keemiaseltsi
100. aastapäeva
TEADUSKONVERENTS



18. aprill 2019
kell 11.00-20.00
TalTech

100



Kas raud on aju jaoks hea?
Tiit Land, Tallinna Ülikool



Eesti Keemiaseltsi
100. aastapäeva
TEADUSKONVERENTS



Uued horisondid hapete-aluste uuringutes
Ivo Leito, Tartu Ülikool



Narkotestri arendamine narkootikumide tuvastamiseks süljes

Jekaterina Mazina-Šinkar, Tallinna Tehnikaülikool

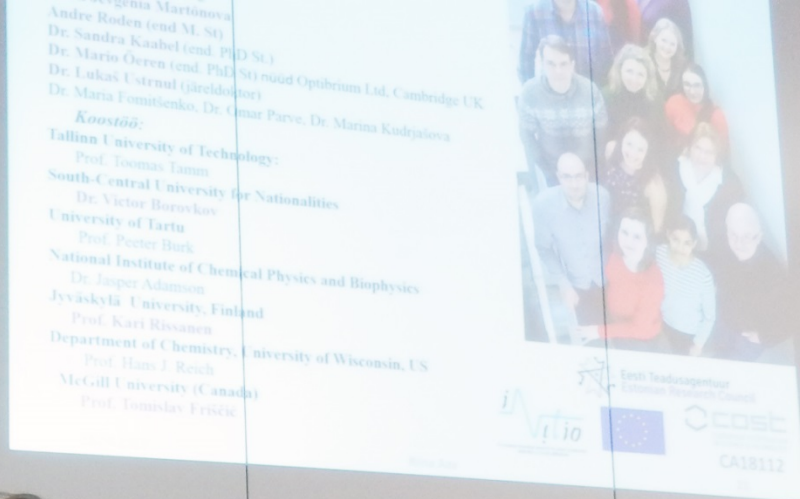
Eesti Keemiaseltsi
100. aastapäeva
TEADUSKONVERENTS



18. aprill 2019
kell 11.00-20.00
TalTech

Eesti Keemiaselts





Interaktsioonid, mis suunavad molekulide ise-organiseerumist hemikukurbituriilides ja nende kompleksides

Riina Aav, Tallinna Tehnikaülikool

Eesti Keemiaseltsi
100. aastapäeva
TEADUSKONVERENTS



18. aprill 2019
kell 11.00-20.00



2. sessioon

Peeter Burk, moderaator

Peeter Burk



**Keemiaharidus üldhariduskoolis: hetkeseis
rahvusvahelisel foonil ja väljakutsed tulevikku**
Miia Rannikmäe, Tartu Ülikool

Eesti Keemiaseltsi
100. aastapäeva
TEADUSKONVERENTS



49. mail 2019

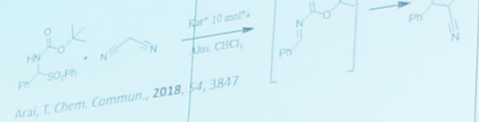
Tuuli Käämbre



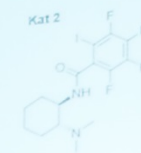
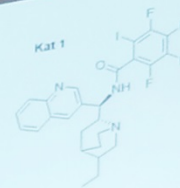
Mitokondriaalne metabolism ja vähk

Tuuli Käämbre, Keemilise ja Bioloogilise Füüsika Instituut

XB-katalüüs



Katse	Kat.	Alus, Temp.	Saagis %	ee %
1	Kat 1	Na ₂ CO ₃ , rt	86	86
2	Kat 2	Na ₂ CO ₃ , rt	88	76



TAL
TECH

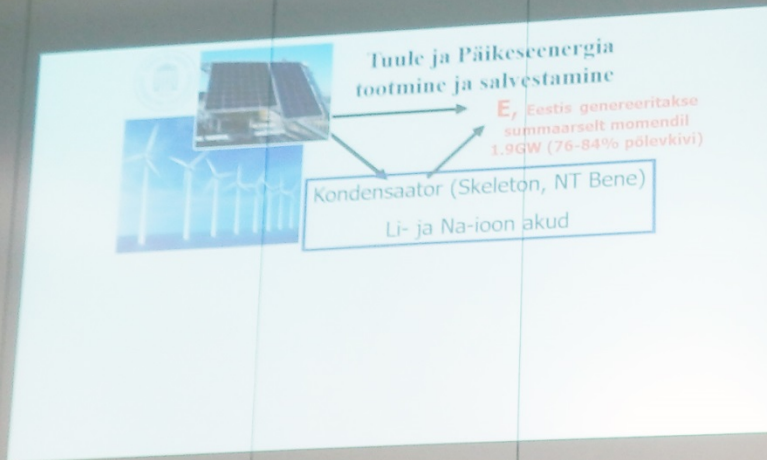


Asümmeetriline organokatalüüs:
klassikalised ja uued võimalused
Tõnis Kanger, Tallinna Tehnikaülikool



**Sb_2S_3 õhukesed absorberkihid
pool-läbipaistvatele päikesepatareidele**

Ilona Oja Acik, Tallinna Tehnikaülikool



**Elektrokeemiliste seadmete arendamine
taastuvenenergeetika komplekslahendusteks**
Enn Lust, Tartu Ülikool

Eesti Keemiaseltsi
100. aastapäeva
TEADUSKONVERENTS



3. sessioon

Jaak Järv, moderaator

Eesti Keemiaseltsi
100. aastapäeva
TEADUSKONVERENTS



Vesiniksidemete tugevus:
ab initio täpsus, jõuväljade kiirus
Mario Öeren, Optibrium Limited, Suurbritannia



Uued keemilised reaktortehnoloogiad
Tapio Salmi, Åbo Akademia, Soome



**Raua ja lämmastikuga
dopeeritud karbiidset
päritolu süsinikmaterjalide
ja süsiniknanotorude
komposiitidel põhinevad
katalüsaatorid
anioonvahetusmembraaniga
kütuseelementidele**

*Kaido Tammeveski, Tartu
Ülikool*





Molekulaarne jäljendamine – võimalused ja tegelikkus
Andres Öpik, Tallinna Tehnikaülikool



Toatemperatuuril fosforestseeruvate orgaaniliste ainete valmistamine ja nende rakenduste uurimine

Erki Enkvist, Tartu Ülikool



**TAL
TECH**
TALLINNA TEHNIKAÜLIKOOL



Tervitus, ...
Hallar Meybaum, Eesti Keemiatööstuse Liit

TAL
TECH
TALLINNA TEHNIKAÜLIKOO



... kingitus ja ...



... ja keemiatööstuse ettevõtteid
ühendava ühingu tegevuse ülevaade

Posterid ...

**TAL
TECH** TALLINN 2015

**DEAROMATIZATION OF PHENOLS : ELECTROPHILIC
SUBSTITUTION VERSUS ELECTROPHILIC ADDITION**

Elena Lõpp-Saarekaja, Anne Paju, Margus Lopp
Elena.Lopp-Saarekaja@taltech.ee
Talinn University of Technology, Akadeemia tee 15, Tallinn, Estonia.
anne.paju@taltech.ee

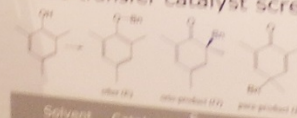
DEAROMATIZATION OF 1,4-DIARYLBENZENE DERIVATIVES BY
SUBSTITUTION VERSUS ELECTROPHILE
Elaine Lopa-Lopaneja, Anne Paj, Margus Lopp
Elaine Lopa-Lopaneja, Anne Paj, Margus Lopp, Akadeemia tee 15, Tallinn, Estonia
Department of Chemistry and Biotechnology, Tallinn University of Technology, Akadeemia tee 15, Tallinn, Estonia
e-mail of corresponding author: elaine.lopa-lopaneja@talltech.ee
© 2016 by the author. Published by MDPI Publishing, Basel, Switzerland
This article is an open access article distributed under the terms and conditions of the Creative Commons Attribution (CC BY) license (http://creativecommons.org/licenses/by/4.0/).

Conditions screening

Base	Reaction conc., M	SM, %	E, %	O, %	P, %
1 LiOH	0,5	51	14	27	5
2 LiOH	1	19	15	44	4
3 NaOH	1	51	15	28	4
4 ^a NaOH	1	23	18	41	5
5 NaOH	2	56	13	26	—
6 ^b LiOH	0,5	31	9	35	5

It was clarified that increasing of concentration improves yields but there are limits. Also, rise of reaction time leads to higher yield and different bases can improve or lower yield and selectivity.

Phase-transfer catalyst screening



	Solvent	Catalyst	E %	G %	P %
1	Toluene	I	82	4	—
2	Toluene	II	79	6	11
3	Toluene	III	79	6	rac
5	DCM	III	73	13	8
6 ^a	MeOH	III	73	8	10
		III	6	20	12

^a Propylene; 0.5 mmol substrate, 0.5 mmol catalyst.

Considering that *ortho*-product is enantio-
asymmetric synthesis was
phase-transfer

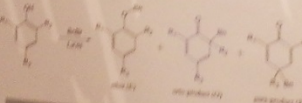
Considering that *ortho*-product is enantiomeric, asymmetric synthesis was performed with usage of these transfer catalysts (PTC). In presence of PTC, ether formation is preferred but it can be improved with different solvent usage. Best result were achieved with catalyst **III** in MeOH.

Introduction

The dearomatization of aromatic compounds is a powerful approach for synthesis of complex molecules from simple and easily available starting materials. However, there is only limited amount of dearomatization of phenol derivatives under non-oxidative conditions.¹⁻³

In this study, differently substituted hydrazides were used in electrophilic allylation reaction. Different substituents effect and conditions were investigated to achieve better selectivity to allyl and higher yields of addition products.

First of all, differently substituted phenols were used. Methyl group showed good results in *ortho*-product formation in comparison with *t*-Bu group, especially when group is at *ortho*-position in phenols.



	P1	P2	P3	E, %	G, %	E, %
1 Me	Me	H		11	17	64*
2 F-Bu	F-Bu	H				
3 Me	Me	Me		6	49	
4 Me	Me	F-Bu		14	27	39
5 F-Bu	Me	Me			3	4
6 GMe	GMe	Me		32	38	

	7/76	1/80	3/2	6
Publication period			32	38
Language and readability: 1 (most) values are 1 (all)				
Outright				

Also, it was discovered, that t-Bu group decreases yields due to low solubility of substrates in reaction mixture.

1944

1. R. I. Philipp, F. D. Toole, 2013, J. Am. Chem. Soc., 135, 1264-71
2. S. Koushanlou, I. Garcia-Fortanet, M. Angel Del Aguila-Garcia



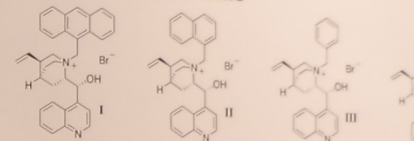
... posterid ...



Sissejuhatus

Indooli fragmenti on leitud paljudes bioloogiliselt aktiivsetes sünteesis.¹ Indooli lämmastikuaatomi enantioselektiivne alküleerimine Käesoleva töö raames uuniti indooli asümmeetrilist *N*-alküleerimist Michaeli akseptorina α,β -küllastumata ketoone **2** (Joonis 3). Indooli aromaatsesse tuuma elektronaktseptorne rühm, n enantioselektiivsuse ja kõrge saagisega faasiülekanne katalüsaator

Reaktsiooni optimeerimine



Joonis 1. Kinnhoona alkaloididel põhinevad faasiülekanne katalüsaatorid.

Tabel 1. Katalüsaatorite valik.⁽¹⁾

Jrk nr	Kat	Aeg (t)	Konv. ⁽¹⁾ (%)	ee ⁽²⁾ (%)
1	I	16	81	42
2	II	18	99	26
3	III	18	98	18
4	IV	16	80	36
5	V	16	97	6
6	VI	18	>99	rats.

(1) Konversioon määratud ¹H-TMR-ga toorsest. (2) ee määratud kiraalse HPLC analüüsiga. (3) Reaktsiooni tingimused: 1,2 ekv **1a**, 1 ekv **2a**, 20 mol% **Kat** ja 1 ekv K_2CO_3 toatemperatuuril.

Tabel 2. Aluse mõju.⁽¹⁾

Jrk nr	Alus	Aeg (t)	Saagis ⁽¹⁾ (%)	ee ⁽²⁾ (%)
1	K_2CO_3	21	95	65
2	Rb_2CO_3	5	92	65
4	5M aq Rb_2CO_3	24	95	64
5 ^(a)	Rb_2CO_3	24	97	70
6 ^(a)	Rb_2CO_3	6 p	97	74
7 ^(b)	Rb_2CO_3	4	89 ^(a)	70

(a) Kromatograafiliselt isoleeritud produkti saagis. (b) ee määratud puhastatud produktile kiraalse HPLC analüüsiga. (c) Reaktsiooni tingimused: 1 ekv **1b**, 1,2 ekv **2a**, 20 mol% **Kat I** ja 1,3 ekv Rb_2CO_3 toatemperatuuril. (d) 5 °C, (e) -20 °C. (f) Reaktsiooni tingimused: 1 ekv **1b**, 2 ekv **2a**, 5 mol% **Kat I** ja 1,3 ekv Rb_2CO_3 toatemperatuuril argooni atmosfääris. (g) Konversioon määratud ¹H-TMR-ga toorsest.

Kirjanduse allikad:

1. Singh, T. P.; Singh, O. M. *Mini-Rev. Med. Chem.* **2018**, *18*, 9-25.
Singh, T. P.; Singh, O. M.; Singh, A.; Tragni, M.; Achille, U.-R. *Angew. Chem.*



... posterid ...

VÄRVLISTES SOLANUM TUBEROSUM L. MUGULATES POLÜFENOOLIDE, SUHKRUTE JA MIKROELEMENTIDE ANALÜÜS

Katrin Kotkas¹, Viive Rosenberg¹, J. Aasmäe², Piret Saar-Reismaa¹, Maria Kulp¹, Merike Vaher²
¹Eesti Taimeteaduste Instituut, J. Aasmäe 1, Jõgeva, 48309 Jõgeva maakond
²Keemia ja biotehnoloogia instituut, Tallinna Tehnikaülikool, Akadeemia tee 15, 12618 Tallinn
e-mail: merike.vaher@taltech.ee

Sissepääs

Kartul (*Solanum tuberosum* L.) on nisu, riisi ja mais järel neljas põllukultuur, mida kasvatatakse registreeritud toiduna kogu maailmas suhteliselt suurtes kogustes¹. Kartulimugulate tootmisarvu määravad nii valgus, niiskus, rasked, mineraalained, kui ka kasvatamisel antud – polüfenoolid ja fenoolid happeid, mis toimivad antioksüdantidena. On teada, et talle ja tootmisel viibitakse kartulimugulate polüfenoolide tase ja antotsüaniinide sisaldus, mis on tingitud antotsüaniinide sisaldusest, on kõrgem võrreldes traditsiooniliste kultuuridega.

Kartul kartulimugulatele on loomulik kõrge tärklise sisaldus, kuid looduslikult sisaldavad ka suhkruid – sahharoosi, glükoosi ja fruktoosi – sisaldus jääb 1% piiresse kuivaine sisalduses.

Uuringu eesmärgiks oli hinnata kartulimugulate üldfenoolide, antotsüaniinide, mikroelementide ja suhkrute sisaldust sõltuvalt nende sugu värvusest ja taimematerjali vanusest võttes arvesse nendega seotud väikseid väikseid, mis võivad tarbija (diabeetikud, lapsed, vanad inimesed) poolt mõjutada.

Materialid ja meetodid

Uuringus kasutati sordi Blue Congo seemikuid (proovid 1-7), ristandeid sorte Desiree (proovid 8,9) ja Granolaga (proovid 10-15) ning merikloone (proovid 16-18). Võrdlussortideks olid kaks praegu meil tootmises laialt levinud sorti – Teele (19) ja Laura (20) ning lilla bataat (21).

Üldfenoolide sisaldus määrati Folin-Ciocalteu meetodil väljendatuna gallushappe ekvivalentides (GAE) g/kg kuivaine kohta, antotsüaniinide sisaldused määrati spektrofotomeetriliselt pH erinevuse meetodil väljendatuna tsüanidiin-3-O-glükoosiid ekvivalentides g/kg kuivaine kohta.

Muio-inositol (B8 vitamiin), sahharoosi, glükoosi ja fruktoosi sisaldused määrati kapillaarelektroforeesiga ning mineraalelementid aatomabsorptsioonspektroskoopia meetodil.



Tulemused

Taimematerjali korrektsioonid

Tabel 1. Võrdlus värviliste kartulimugulate korrektsioonide

Proov	Üldfenoolid (GAE) g/kg	Antotsüaniinid (g/kg)
1	2.5	0.5
2	2.2	0.4
3	2.8	0.6
4	2.1	0.3
5	2.4	0.5
6	2.3	0.4
7	2.6	0.5
8	2.7	0.6
9	2.5	0.5
10	2.4	0.4
11	2.6	0.5
12	2.5	0.4
13	2.3	0.3
14	2.2	0.2
15	2.1	0.2
16	2.4	0.4
17	2.3	0.3
18	2.2	0.2
19	2.1	0.2
20	2.0	0.1
21	2.5	0.4

Üldfenoolide ja antotsüaniinide sisaldused

Proov	Üldfenoolid (GAE) g/kg	Antotsüaniinid (g/kg)
1	2.5	0.5
2	2.2	0.4
3	2.8	0.6
4	2.1	0.3
5	2.4	0.5
6	2.3	0.4
7	2.6	0.5
8	2.7	0.6
9	2.5	0.5
10	2.4	0.4
11	2.6	0.5
12	2.5	0.4
13	2.3	0.3
14	2.2	0.2
15	2.1	0.2
16	2.4	0.4
17	2.3	0.3
18	2.2	0.2
19	2.1	0.2
20	2.0	0.1
21	2.5	0.4

Tabel 2.

Vase, mangaani, rauda, magneesiumi, kaltsiumi, kaaliumi ja teiste mikroelementide sisaldused kartulimugulates ja lillas bataadis.

Materialid ja meetodid

Üldfenoolide sisaldus

Antotsüaniinide sisaldus

Suhkrute sisaldus

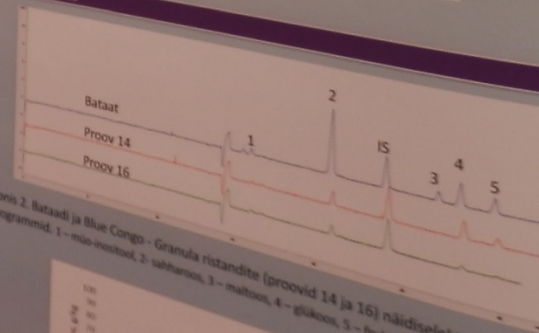
Mineraalainete sisaldus

Üldfenoolide ja antotsüaniinide sisaldused



Joonis 1. Üldfenoolide ja antotsüaniinide sisaldused võrdluses.

Suhkrute analüüs



Joonis 2. Bataadi ja Blue Congo – Granola ristandite (proovid 14 ja 16) näidiselektroforegrammid. 1 – muio-inositol, 2 – sahharoos, 3 – maltoos, 4 – glükoos, 5 – fruktoos, IS – sisestandard.



1. *Cardinalis*

J. Burk*, A. Pupart*, L.
Leemia Instituut, Tartu Ülikool
jaanus.burk@

1. The first part of the document is a list of references. The references are as follows:



TARTU ÜLIKOOL



... posterid ...





Vaheajad ...





... arutamised ...



Riina Aav



Margus Lopp

← ÕPPEHOONE
TUDENGIKAMALA



... ja kolleegidega kokkusaamine ...

TAL
TECH
TALLINNA TEHNIKAÜLIKOO











**TAL
TECH**
TALLINNA TEHNIKAÜLIKOO







TAL
TECH
TALLINNA TEHNIKAÜLIKOO

ENG 15.12.2019
ET 15.12.2019

Cambrex

Global presence
Local experts









Fotod: Marina Kudrjašova
Eesti Keemiaselts tänab!