

POVZETEK

Vedno večja ozaveščenost o okoljski problematiki usmerja veliko pozornosti pridobivanju snovi iz naravnih obnovljivih virov, pri čemer je in lignocelulozna biomasa glavni obnovljivi vir organskega ogljika na zemlji. V okviru doktorske disertacije smo raziskali možnosti valorizacije in nadgradnje najmanj izkoriščenih komponent lignocelulozne biomase (lignin, ferulna kislina, sekundarni metaboliti).

Raziskali smo oksidativno cepitev dvojne in enojne vezi C–C, ki je iz sintetičnega vidika izredno pomembna reakcija za razgradnjo kompleksnih molekul iz biomase. Z uporabo oksidanta H₂O₂ ter katalizatorja V₂O₅, smo razvili metodo za selektivno oksidativno cepitev dvojne C–C vezi. Metoda omogoča selektivno pretvorbo derivatov cimetove kisline do benzaldehidov, benzokinonov ali benzojskih kislin. Selektivnost reakcije je odvisna od izbire topila. Derivate *p*-hidroksicimetove kisline smo v DME selektivno pretvorili do ustreznih benzaldehidov ter v TFE do benzokinonov. Derivate cimetove kisline in stirene, ki na *para* mestu nimajo hidroksilne skupine pa smo v MeCN selektivno pretvorili do benzojskih kislin. Metoda je primerna tudi za selektivno pretvorbo ferulne kisline do vanilina (91 %) v prisotnosti 7 ekv. 30 % H₂O₂ ter 5 mol% katalizatorja V₂O₅. Oksidativna cepitev enojne C–C vezi pa igra pomembno vlogo pri pretvorbi lignina do platformnih kemikalij. Predhodno razvito metodo na osnovi H₂O₂/V₂O₅ smo razširili na različne vrste lignina. Uporabili smo komercialno dostopen lignin ter realne vzorce organosolv in kraft lignina japonskega dresnika, octovca in smreke. Zaradi raznolike strukture ligninskih vzorcev, ki smo jo določili z NMR spektroskopijo smo oksidativno razgradnjo študirali posebej na vseh treh tipih vzorcev. V DME smo uspešno pretvorili komercialni lignin ter kraft lignin smreke do vanilina (izkoristek: 9,9 % in 7,6 %), kraft lignin japonskega dresnika pa smo depolimerizirali do mešanice aromatskih produktov.

Invazivne tujerodne rastlinske (IAPS) vrste so bogate z različnimi strukturnimi tipi naravnih barvil. Emodin, izoliran iz korenin japonskega dresnika smo kemijsko modificirali z uvedbo različnih funkcionalnih skupin z nitriranjem, sulfoniranjem in halogeniranjem. S kemijsko spremembo strukture emodina smo vplivali na njegove barvne, vezavne, protivirusne ter protibakterijske lastnosti. Emodine smo fotokemijsko okarakterizirali ter jih uporabili kot fotokatalizatorje v reakcijah reduktivne aktivacije aril halidov. Na knjižnici spojin emodina smo izvedli tudi študijo vpliva strukture na protivirusno aktivnost proti HCoV-NL63. Jodiran emodin E-3I in bromiran emodin E-2Br sta izkazala primerljivo protivirusno aktivnost kot Remdesivir, ki je že odobren za uporabo v nujnih primerih proti COVID-19. Derivate emodina smo uspešno vezali na tekstilni material (volno in poliamid), ki je izkazal protibakterijsko aktivnost proti bakterijam *S. aureus*. Rezultati kažejo, da se kljub vezavi spojin na tekstilni material ohrani njihova protibakterijska aktivnost. Emodin, ekstrakte iz IAPS ter lignin in PHA smo uspešno inkorporirali tudi v prevleke silanskega tipa in tako pripravili barvne ter transparentne hidrofobne premaze za steklo in les.

Ključne besede: *Invazivne tujerodne rastline, H₂O₂, oksidacija, zelena in trajnostna kemija, biomasa, lignin, ferulna kislina, vanilin, naravna barvila, emodin, HCoV-NL63, prevleke.*