

Povzetek

V doktorski disertaciji smo predstavili nove metode za oksidacijo in funkcionalizacijo žveplo vsebujočih in potencialno biološko aktivnih funkcionalnih skupin, v veliki meri z ozirom na okolju prijazne vidike zelene kemije. Večina eksperimentov v tem delu se nanaša na sulfoksimine in njihove N -SCF₃ derivate, ki so bioizosteri sulfonamidov in sulfonov ter se že uporabljajo v agrokemiji in farmacevtski industriji. Prva od metod, ki smo jih predstavili, je selektivna oksidacija N -SCF₃ sulfoksiminov do ustreznih N -SOCF₃ in N -SO₂CF₃ produktov, kjer smo lahko v večini primerov produkte izolirali s preprosto ekstrakcijo brez potrebe po nadaljnjem čiščenju. Večino substratov smo uspešno oksidirali pri sobni temperaturi, v neproblematičnih topilih, ki jih je mogoče reciklirati, in z uporabo manjšega presežka NaOCl·5H₂O kot zelenega oksidanta, ki se po reakciji pretvori v nenevarni NaCl. Metodo smo uspešno prenesli tudi na večje merilo, kjer smo dosegli še višje izkoristke. Pri reakcijah v večjem merilu smo izračunali tudi različne parametre zelene metrike. Vse nove produkte smo karakterizirali in jih uporabili kot substrate v nadaljnjih reakcijah, kot sta Suzuki-Miyauraovo in Sonogashirovo spajanje. Vsi produkti so bili tudi testirani za biološko aktivnost v sodelovanju z EU-OPENSREEN. Poleg oksidacij smo sulfoksimine funkcionalizirali tudi na dušikovem atomu z zanimivo sulfonamidno funkcionalno skupino, ki jo generiramo *in situ* preko premestitve N -fluorobenzensulfonamida. Z optimizacijo procesa smo se izognili uporabi nevarnega n -BuLi ter izvajanju reakcij pri zelo nizkih temperaturah in v suhih ter inertnih pogojih. S to metodo smo pripravili širok nabor novih produktov in nekatere uporabili v nadaljnjih pretvorbah, med drugim tudi pri metiliranju sulfonamida in reakcijah spajanja. Reakcijo smo preučili tudi z mehanističnega vidika ter s pomočjo dodatnih eksperimentov in DFT izračunov predlagali možen potek reakcije. Podobne oksidacije žveplovega atoma smo izvedli tudi na sulfanilamidih (R-NHSCF₃). V primerjavi s podobno strukturo N -SCF₃ sulfoksiminov so sulfanilamidi zahtevali drugačne oksidacijske pogoje, zato smo za sintezo sulfinamidov (NHSCF₃) uporabili m -CPBA v DCM, za sulfonamide (NHSCF₃) pa H₂O₂ z Na₂WO₄ v AcOH. Na ta način smo pripravili 21 različnih produktov, nekatere tudi v večjem merilu. Sulfinamide smo preizkusili tudi kot reagente za prenos trifluorometansulfinske skupine (-SOCF₃) na različne indole.