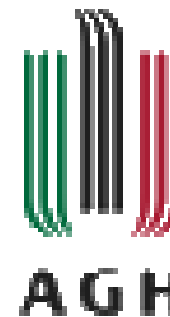




**Akademickie Centrum Komputerowe  
CYFRONET AGH**



***Influence of N-methylation and structural rigidity effects on the conformation of model peptidomimetics***



**Aneta Buczek<sup>1</sup>, Roksana Wałęsa<sup>1</sup>, Maciej Makowski<sup>1</sup>, Michał Jewgiński<sup>2</sup>, Rafał Latajka<sup>2</sup>, Teobald Kupka<sup>1</sup>, Małgorzata A. Broda<sup>1</sup>**

<sup>1</sup> Department of Physical Chemistry and Molecular Modeling, Faculty of Chemistry, University of Opole, Oleska 48, 45-052 Opole, Poland

<sup>2</sup> Department of Bioorganic Chemistry, Faculty of Chemistry, Wrocław University of Technology, Wybrzeże Wyspiańskiego 27, 50-370 Wrocław, Poland

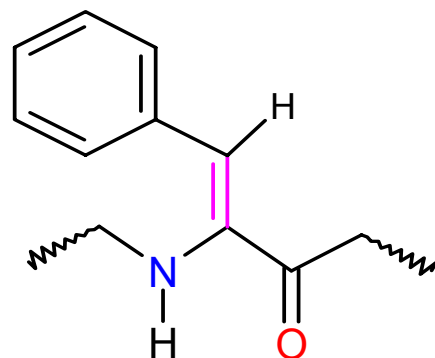
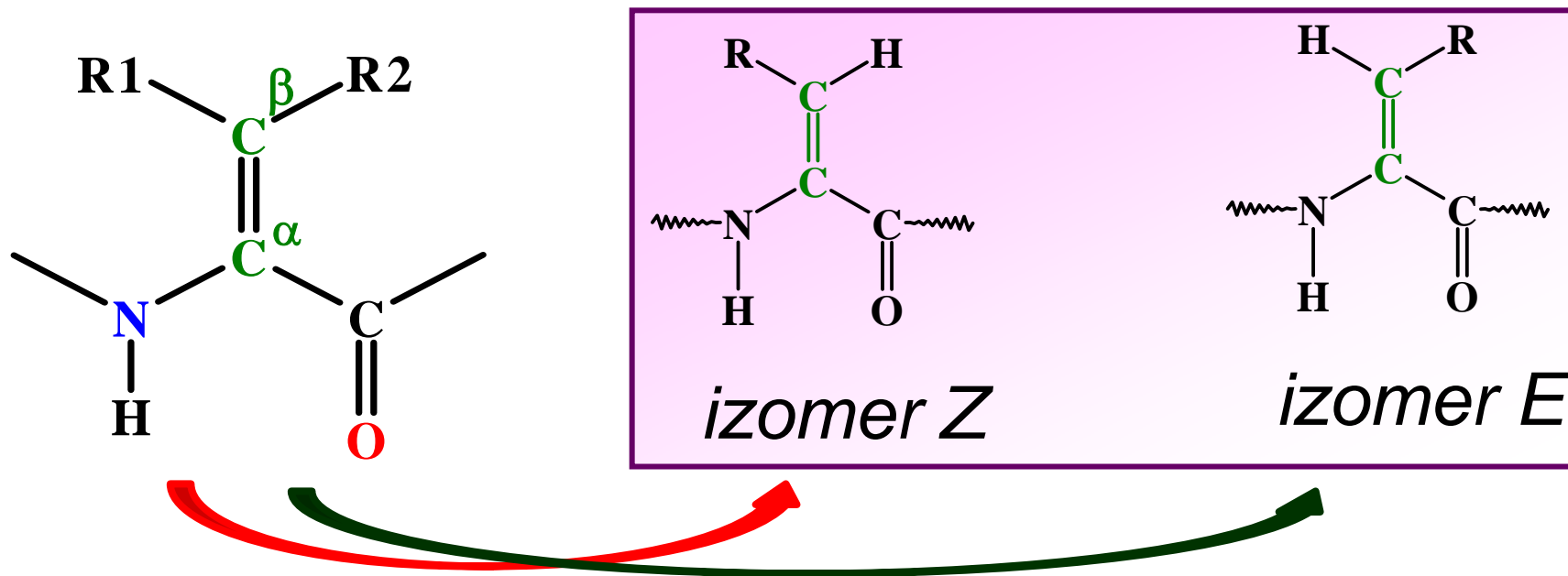


**Konferencja Użytkowników  
Komputerów Dużej Mocy**

Zakopane, 28 lutego - 1 marca 2013 r.

# MODYFIKACJE PEPTYDÓW

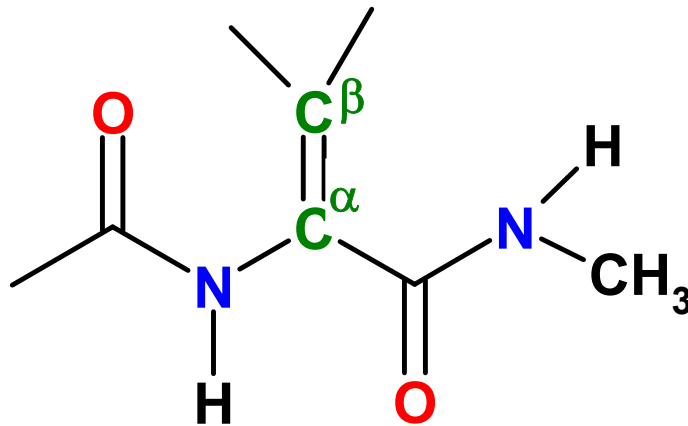
➤ Wprowadzenie reszty  $\alpha,\beta$ -dehydroaminokwasowej



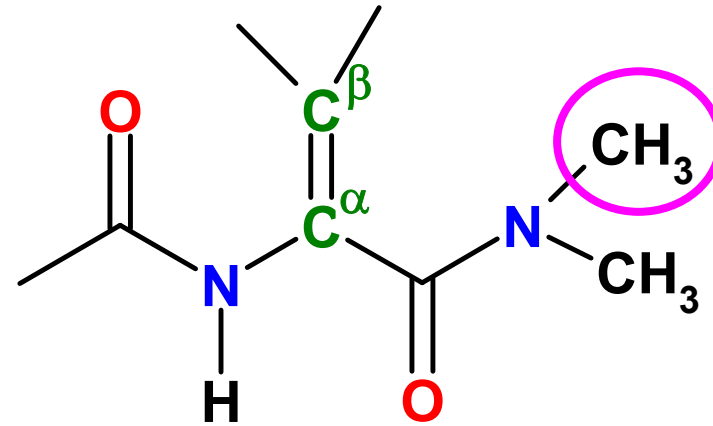
$(Z)$ - $\Delta$ Phe

# ***MODYFIKACJE PEPTYDÓW***

## ➤ ***N-Metylowanie C-końcowego atomu azotu***

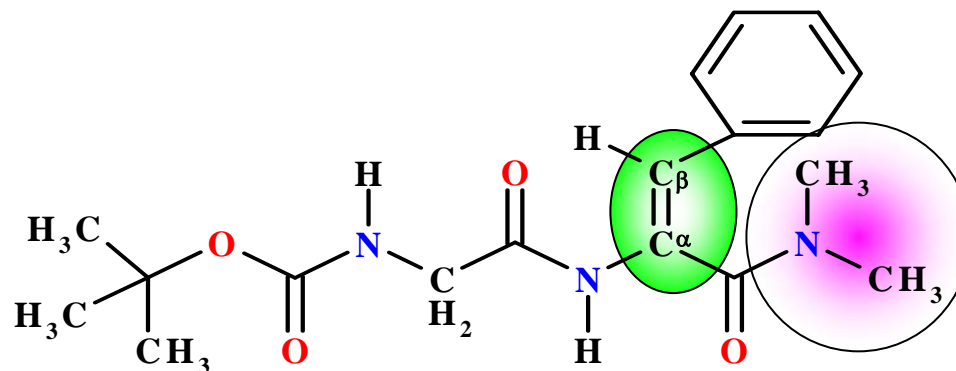


peptyd

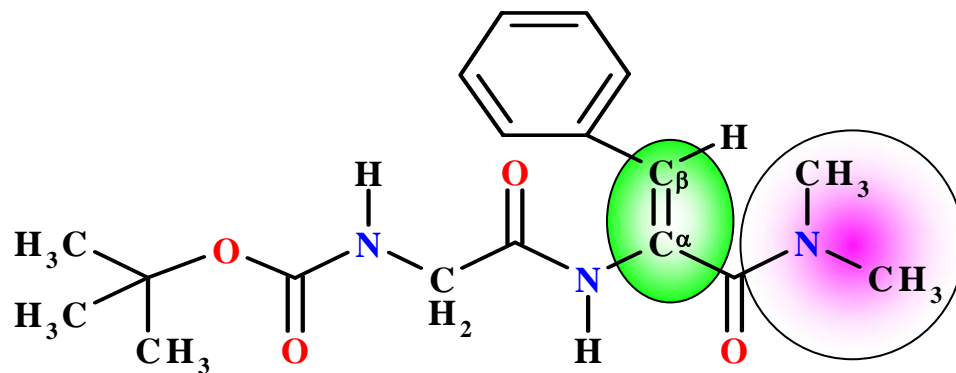


*N*-metylo-peptyd

# STRUKTURY BADANYCH ZWIĄZKÓW



**Boc-Gly-(E)-ΔPhe-NMe<sub>2</sub>**



**Boc-Gly-(Z)-ΔPhe-NMe<sub>2</sub>**

# DZIĘKUJĘ ZA UWAGĘ!



**KAPITAŁ LUDZKI**  
NARODOWA STRATEGIA SPÓJNOŚCI



**UNIwersytet  
OPOLSKI**

**UNIA EUROPEJSKA**  
EUROPEJSKI  
FUNDUSZ SPOŁECZNY



**Politechnika  
Wrocławska**

**Aneta Buczek i Roksana Wałęsa są stypendystkami projektu współfinansowanego ze środków Unii Europejskiej w ramach Europejskiego Funduszu Społecznego.**