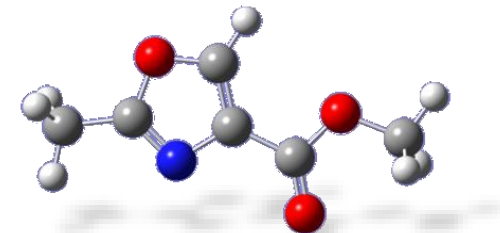
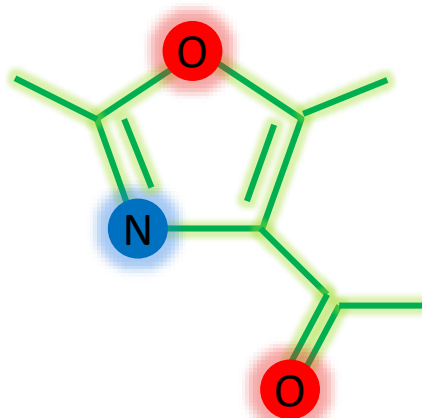
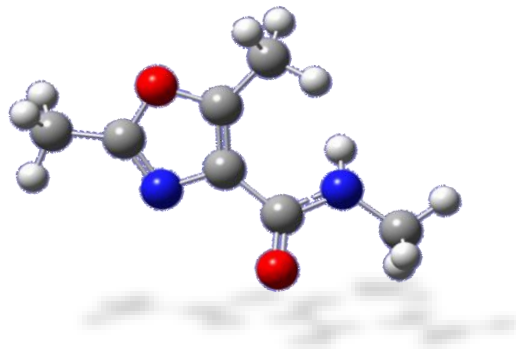




UNIWERSYTET  
OPOLSKI



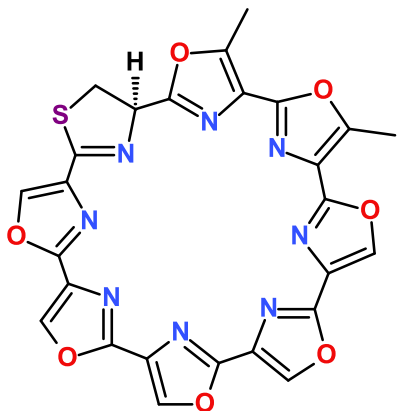
# *Porównanie właściwości konformacyjnych pochodnych metylooksazoli i oksazoli*



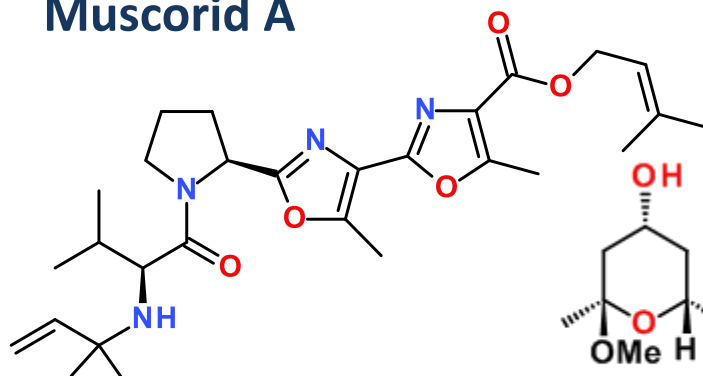
Monika Porada  
Dawid Siodłak  
Anna Kusakiewicz-Dawid

# Występowanie w naturze

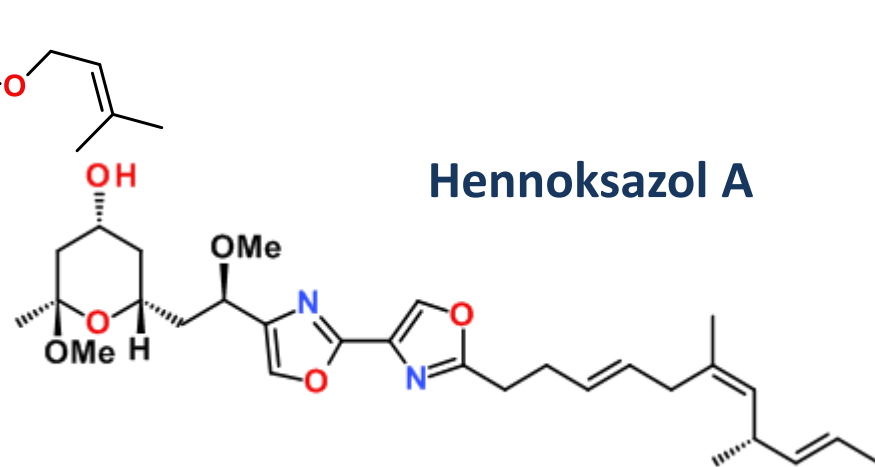
Telomestatyna



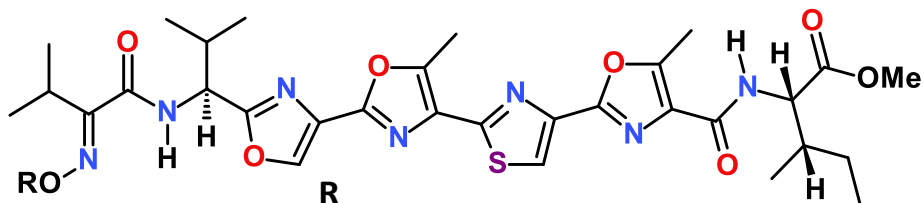
Muscorid A



Hennoksazol A



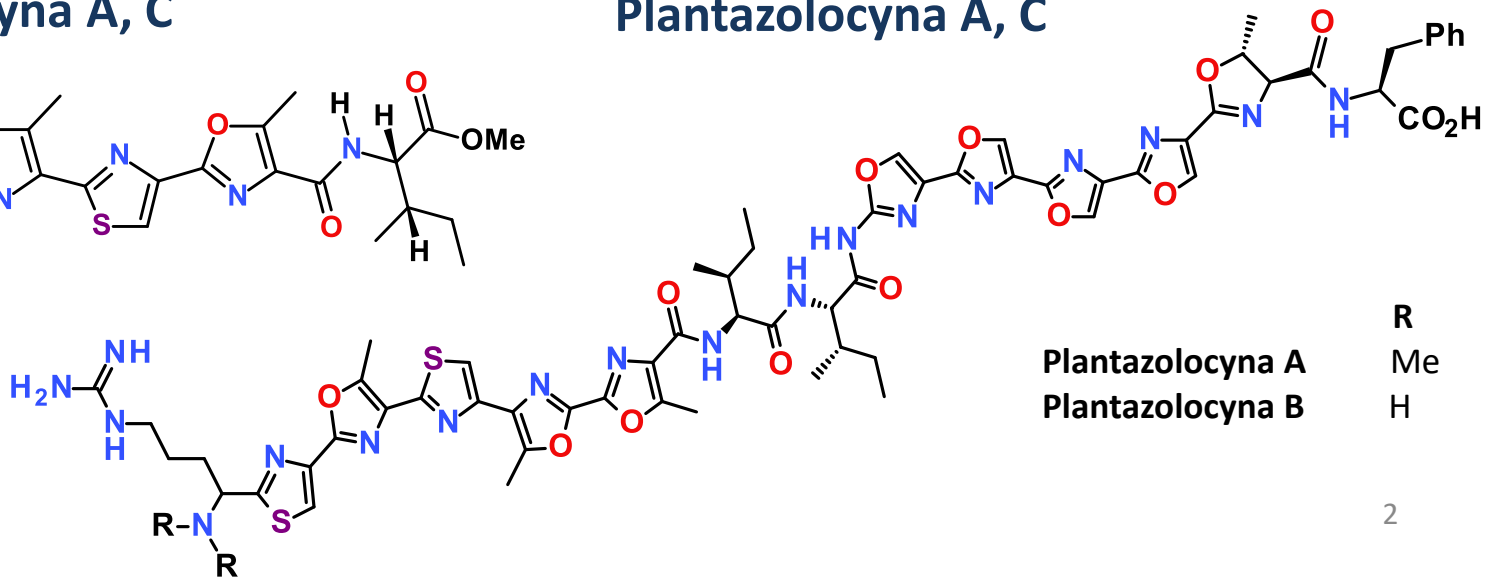
Azolemycyna A, C



Azolemycyna A  
Azolemycyna C

R  
H  
Me

Plantazolocyna A, C



Plantazolocyna A  
Plantazolocyna B

R  
Me  
H

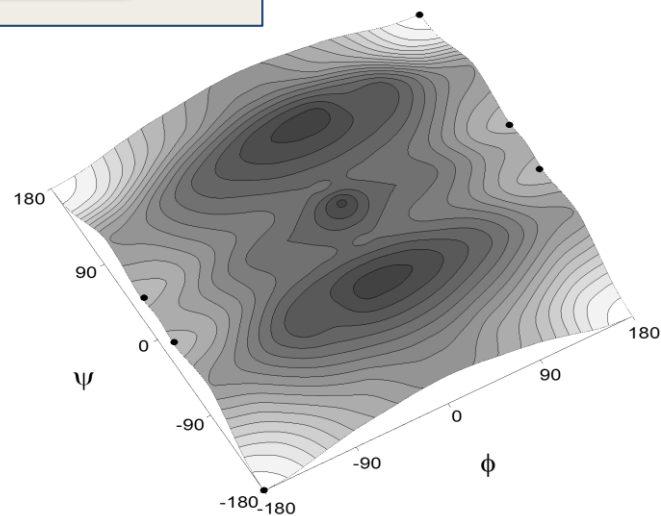
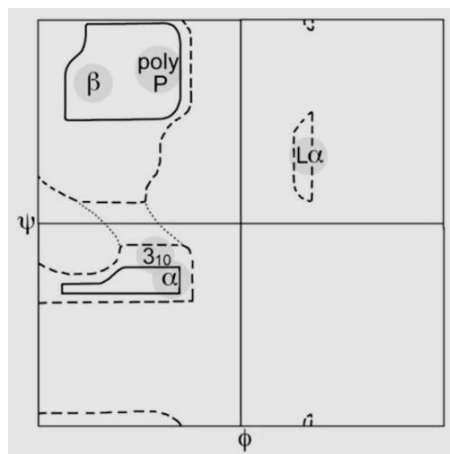
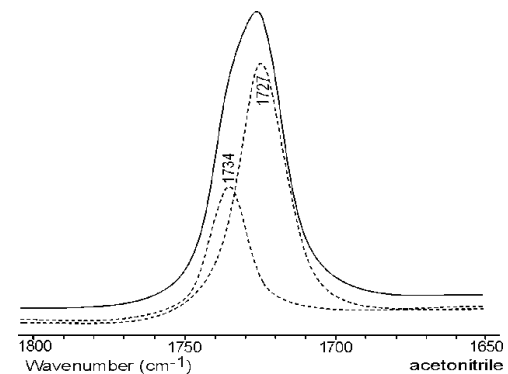
# Metody badania właściwości konformacyjnych

Spektroskopia w podczerwieni (FTIR)

Spektroskopia magnetycznego rezonansu jądrowego (NMR)

Rentgenowska analiza strukturalna

**Metody teoretyczne**



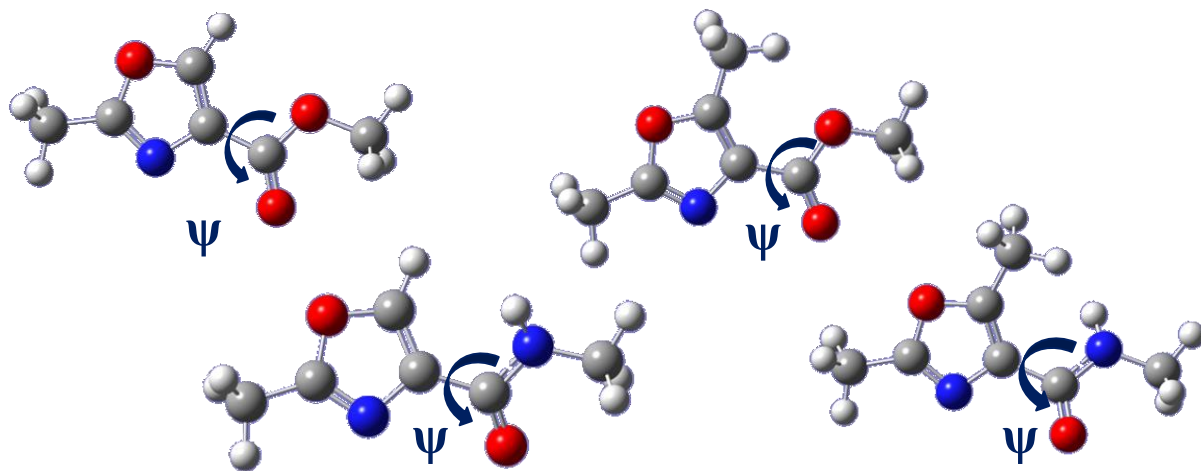
# *Cel i metodyka badań*

## **Cel pracy:**

Badanie właściwości konformacyjnych prostych modelowych związków 2-metylookszolu i 2,5-dimetylookszolu połączonych z wiązaniem amidowym bądź estrowym.

## **Metodyka:**

Zaplanowany cel zrealizowano wykorzystując metody teoretyczne prowadząc obliczenia w próżni jak również symulując obecność rozpuszczalników o różnej polarności (chloroform; woda).



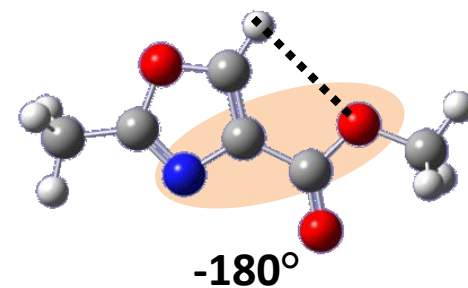
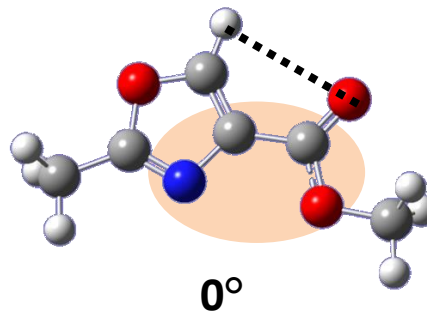
**Metoda:** M06-2X

**Baza:** 6-311++G(d,p)

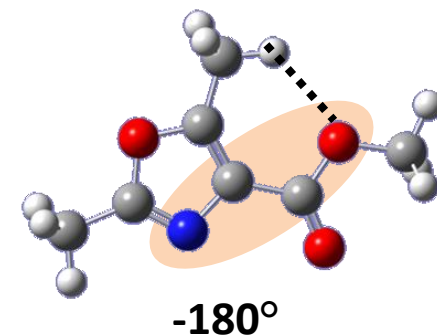
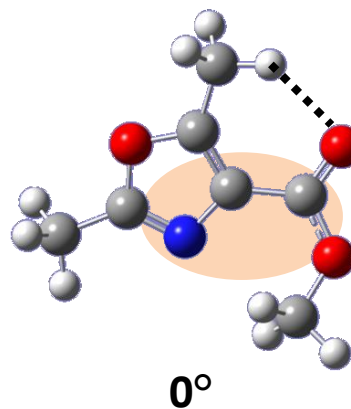
**Model:** SMD

# Konformacje w próżni -COOMe

Kąt torsyjny	$\Delta E$ [kcal/mol]
0.0	0.00
-180.0	0.73

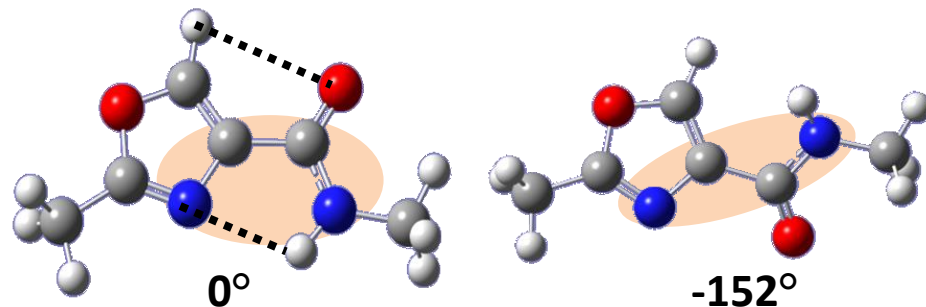


Kąt torsyjny	$\Delta E$ [kcal/mol]
-179.9	0.00
0.0	6.41

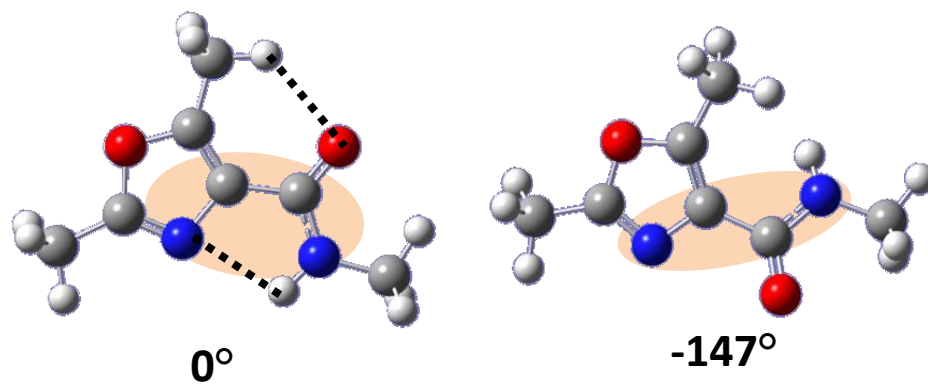


# Konformacje w próżni -CONHMe

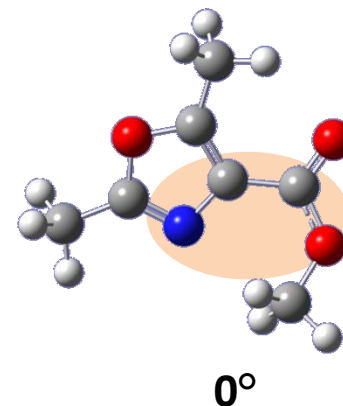
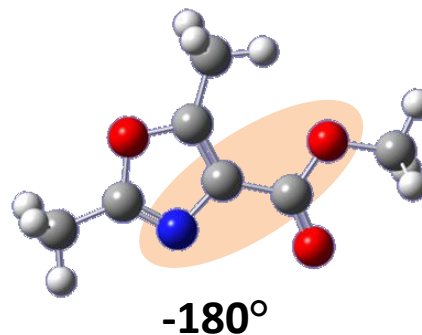
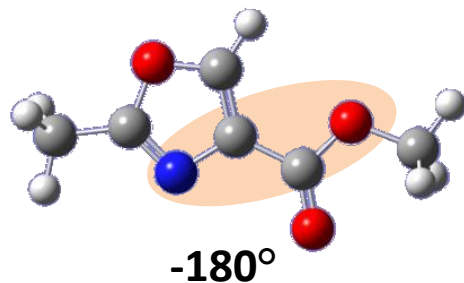
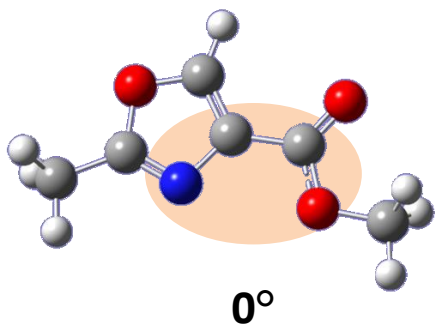
Kąt torsyjny	$\Delta E$ [kcal/mol]
0.0	0.00
-151.8	7.58



Kąt torsyjny	$\Delta E$ [kcal/mol]
0.0	0.00
-146.7	8.42



# Konformacje w chloroformie -COOMe



Kąt torsyjny

$\Delta E$  [kcal/mol]

Kąt torsyjny

$\Delta E$  [kcal/mol]

vacuo

0.0

0.00

-179.9

0.00

-180.0

0.73

0.0

6.41

*Chloroform*

0.0

0.00

-179.9

0.00

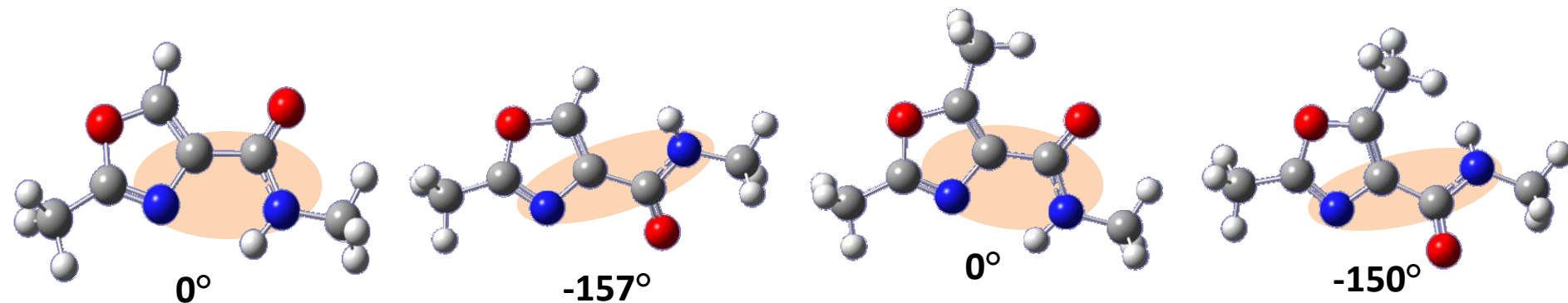
-180.0

0.28

25.9

6.17

# Konformacje w chloroformie -CONHMe



Kąt torsyjny

$\Delta E$  [kcal/mol]

Kąt torsyjny

$\Delta E$  [kcal/mol]

vacuo

0.0

0.00

0.0

0.00

-151.8

7.58

-146.7

8.42

**Chloroform**

0.0

0.00

0.0

0.00

-157.0

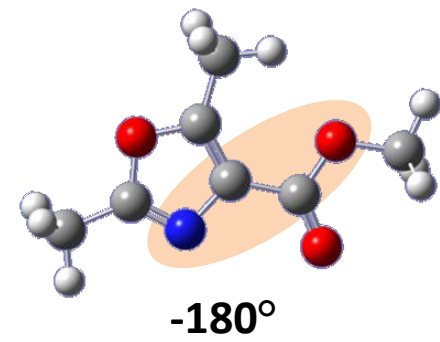
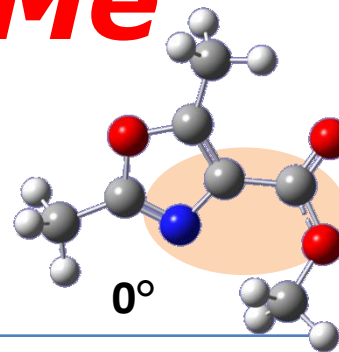
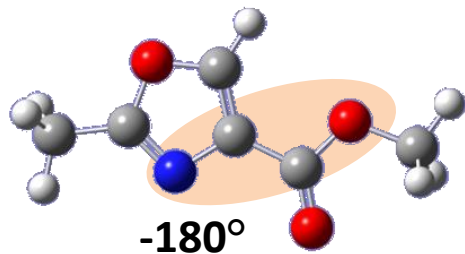
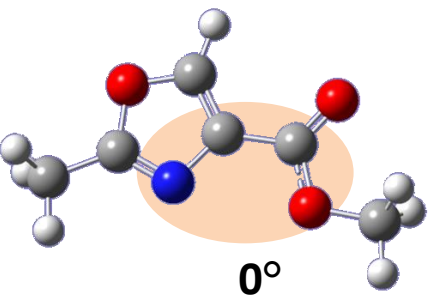
4.31

-149.5

4.43



# Konformacje w wodzie -COOMe



Kąt torsyjny

$\Delta E$  [kcal/mol]

Kąt torsyjny

$\Delta E$  [kcal/mol]

*vacuo*

0.0

0.00

-179.9

0.00

-180.0

0.73

0.0

6.41

*Chloroform*

0.0

0.00

-179.9

0.00

-180.0

0.28

25.9

6.17

*Woda*

-180.0

0.00

-179.9

0.00

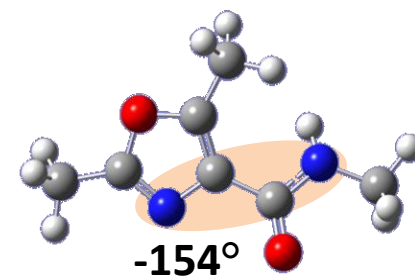
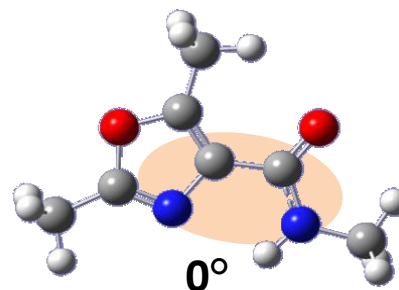
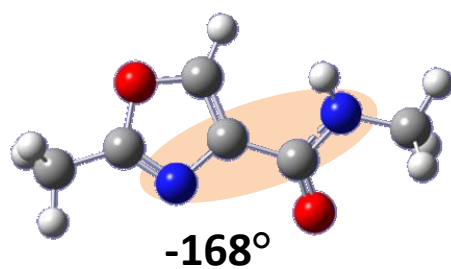
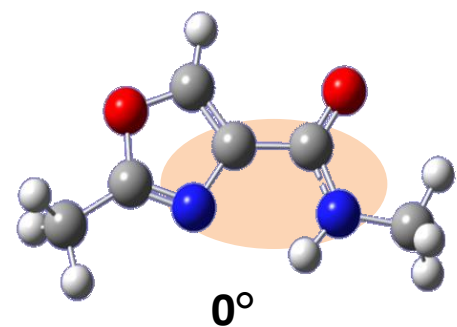
0.0

0.24

32.8

6.97

# Konformacje w wodzie -CONHMe



Kąt torsyjny

$\Delta E$  [kcal/mol]

Kąt torsyjny

$\Delta E$  [kcal/mol]

vacuo

0.0

0.00

0.0

0.00

-151.8

7.58

-146.7

8.42

Chloroform

0.0

0.00

0.0

0.00

-157.0

4.31

-149.5

4.43

Woda

0.0

0.00

0.0

0.00

-168.1

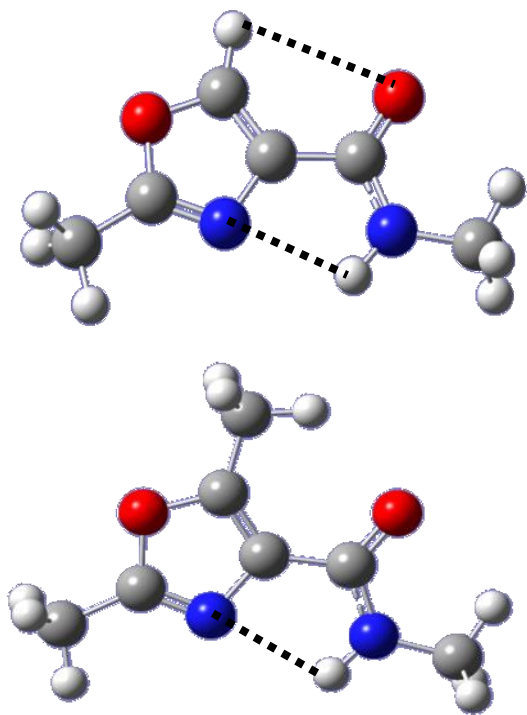
1.21

-153.6

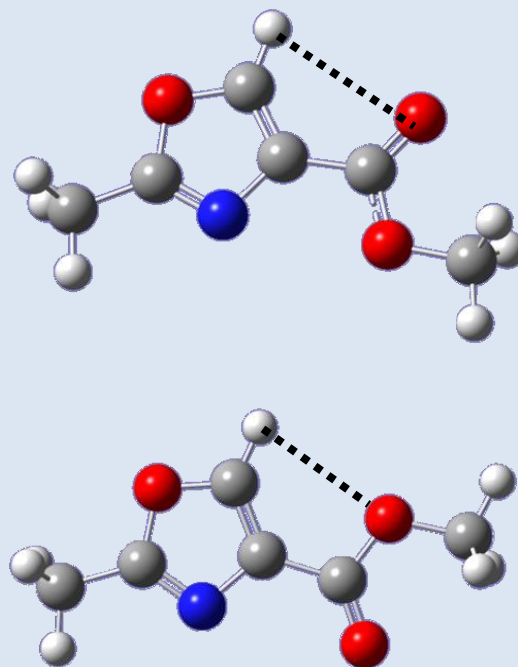
0.82

# Podsumowanie

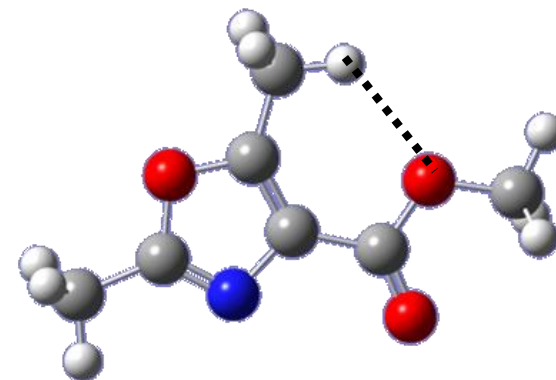
$$\Psi = 0^\circ$$



$$\Psi = 0^\circ ; \Psi = 180^\circ$$



$$\Psi = 180^\circ$$





# *Plany na przyszłość ...*

## 1. Korelacja wyników eksperymentalnych z teoretycznymi

**NMR**

**FTIR**

**X-ray**



## 2. Analiza konformacyjna zawierająca dwa lub więcej pierścieni oksazolowych

# ***Bibliografia***

- Z.J. Anderson, D.J.Fox, *Organic & Biomolecular Chemistry*, **14**, 2016, 1450-1454.
- N.Liu, L.Song, M.Liu, F.Shang, Z.Anderson, D.J. Fox, G.L.Challis, Y. Huang, *Chemical Science*, **7**, 2016, 482-488.
- A. Nagatsu, H. Kajitani, J. Sakakibara, *Tetrahedron Letters*, **36**, 4097-4100.
- T. Ichiba, W.Y. Yoshida, P.J. Scheuer, *Journal of the American Chemical Society*, **113**, 1991, 3173-3174.
- B. Kalyon, S.E.Helaly, R.Scholz, J. Nachtigall, J. Vater, R. Borriss, R.D. Sussmuth, *Organic Letters*, **12**, 2996-2999.
- R. Scholz, K.J. Molohon, J. Nachtigall, J. Vater, A. L. Markley, R.D. Sussmuth, D.A. Mirchell, R. Borriss, *Journal of Bacteriology*, **1**, 215-224.

# *Podziękowania*

- Praca została wykonana z wykorzystaniem Infrastruktury PLGrid



- Grant dla Młodych Naukowców Wydział Chemii Uniwersytetu Opolskiego

