

## New water-soluble isoxazole-linked 1,3,4-oxadiazole derivative with delocalized positive charge.

### Autorzy

Urszula Bąchor  
Ewa Drozd-Szczygieł  
Remigiusz Bąchor  
Lucjan B. Jerzykiewicz  
Robert Wieczorek  
Marcin Mączyński

### Rok wydania

2021

### Czasopismo

RSC Advances

### Numer woluminu

11

### Strony

29668-29674

### DOI

10.1039/D1RA05116D

### Kolekcja

Naukowa

### Język

Angielski

### Typ publikacji

Artykuł

### Streszczenie

Herein we present a synthesis and characterization of a new and unique low-weight heterocyclic compound 5-amino-2-(5-amino-3-methyl-1,2-oxazol-4-yl)-3-methyl-2,3-dihydro-1,3,4-oxadiazol-2-ylum bromide with the unusual electron charge delocalization owing the local positive charge at the carbon atom of oxadiazole moiety. X-ray single crystal of  $C_7H_{10}N_5O_2 \cdot Br^-$  showed the molecule crystalized in monoclinic, space group  $P2_1/c$ . Both five membered rings are planar and twisted forming the ring motif with the counter ion where  $H \cdots Br$  interactions are one of the dominant. The presented compound is characterized by high ionization efficiency in ESI-MS mode and undergoes dissociation within oxadiazole moiety under ESI-MS/MS conditions even under low collision energies. The presented compound is an interesting example of heterocyclic stable carbocation which may serve as a new lead structure.

### Licencja otwartego dostępu

CC-BY-NC

Licencja ta pozwala na kopiowanie, zmienianie, remiksowanie, rozprowadzanie, przedstawienie i wykonywanie utworu jedynie w celach niekomercyjnych. Warunek ten nie obejmuje jednak utworów zależnych (mogą zostać objęte inną licencją).

Pełny tekst licencji: <https://creativecommons.org/licenses/by-nc/4.0/legalcode>

### Adres publiczny

<https://doi.org/10.1039/D1RA05116D>

### Strona internetowa wydawcy

<https://www.rsc.org/>