

Dr. Krunalkumar R. Mehariya
Bhagwati K. Gauni Mehariya
Kirti kumar Goswami
Dr. Dipak Vachhani
Sunil Galani
Dr. Ranjit S. Pada

**X-Ray
Crystallographic
Study of Novel
Oxazole Derivatives**



Anchor Academic Publishing

disseminate knowledge

Mehariya, Krunalkumar R., Mehariya, Bhagwati K. Gauni, Goswami, Kirti kumar, Vachhani, Dipak, Galani, Sunil, Pada, Ranjit S.: X-Ray Crystallographic Study of Novel Oxazole Derivatives, Hamburg, Anchor Academic Publishing 2016

PDF-eBook-ISBN: 978-3-96067-583-9

Druck/Herstellung: Anchor Academic Publishing, Hamburg, 2016

Bibliografische Information der Deutschen Nationalbibliothek:

Die Deutsche Nationalbibliothek verzeichnet diese Publikation in der Deutschen Nationalbibliografie; detaillierte bibliografische Daten sind im Internet über <http://dnb.d-nb.de> abrufbar.

Bibliographical Information of the German National Library:

The German National Library lists this publication in the German National Bibliography. Detailed bibliographic data can be found at: <http://dnb.d-nb.de>

All rights reserved. This publication may not be reproduced, stored in a retrieval system or transmitted, in any form or by any means, electronic, mechanical, photocopying, recording or otherwise, without the prior permission of the publishers.

Das Werk einschließlich aller seiner Teile ist urheberrechtlich geschützt. Jede Verwertung außerhalb der Grenzen des Urheberrechtsgesetzes ist ohne Zustimmung des Verlages unzulässig und strafbar. Dies gilt insbesondere für Vervielfältigungen, Übersetzungen, Mikroverfilmungen und die Einspeicherung und Bearbeitung in elektronischen Systemen.

Die Wiedergabe von Gebrauchsnamen, Handelsnamen, Warenbezeichnungen usw. in diesem Werk berechtigt auch ohne besondere Kennzeichnung nicht zu der Annahme, dass solche Namen im Sinne der Warenzeichen- und Markenschutz-Gesetzgebung als frei zu betrachten wären und daher von jedermann benutzt werden dürften.

Die Informationen in diesem Werk wurden mit Sorgfalt erarbeitet. Dennoch können Fehler nicht vollständig ausgeschlossen werden und die Diplomica Verlag GmbH, die Autoren oder Übersetzer übernehmen keine juristische Verantwortung oder irgendeine Haftung für evtl. verbliebene fehlerhafte Angaben und deren Folgen.

Alle Rechte vorbehalten

© Anchor Academic Publishing, Imprint der Diplomica Verlag GmbH
Hermannstal 119k, 22119 Hamburg
<http://www.diplomica-verlag.de>, Hamburg 2016
Printed in Germany

Contents

1. Introduction.....	5
2. Oxazole-containing natural products	6
3. Chemistry.....	8
3.1 Synthesis of 5-(3-methoxy-4-(prop-2-yn-1 yloxy) phenyl) oxazole	8
3.2 Preparation of 5-(3-methoxy-4-(prop-2-yn-1 yloxy) phenyl) oxazole (6)..	8
3.3 Analytical data	8
4. X-ray Structure Report.....	9
4.1 Experimental.....	9
4.1.1 Data Collection.....	9
4.1.2 Data Reduction	9
4.1.3 Structure Solution and Refinement	10
4.2 Experimental Details.....	10
4.2.1 Crystal Data.....	10
4.2.2 Intensity Measurements.....	11
4.2.3 Structure Solution and Refinement	11
4.2.4 Atomic coordinates and Biso/Beq.....	12
4.2.5 Atomic coordinates and Biso involving hydrogen atoms	13
4.2.6 Anisotropic displacement parameters	13
4.2.7 Bond lengths (Å)	14
4.2.8 Bond lengths involving hydrogens (Å).....	15
4.2.9 Bond angles (°).....	15
4.2.10 Bond angles involving hydrogens (°).....	16
4.2.11 Torsion Angles (°).....	16
4.2.12 Intramolecular contacts less than 3.60 Å involving hydrogens.....	18
4.2.13 Intermolecular contacts less than 3.60 Å.....	19
4.2.14 Intermolecular contacts less than 3.60 Å involving hydrogens.....	20

5. Crystal Images	26
5.1 Represents the ORTEP of the molecule (14) with thermal ellipsoids drawn at 50% probability.....	26
5.2 Represents the ORTEP of the molecule (14) with thermal ellipsoids drawn at 50% probability (only one molecule)	27
5.3 Packing diagram of the molecules when viewed down the b axis.....	28
5.4 Packing diagram of the molecules when viewed down the b axis (only one molecule)	29
5.5 Packing diagram of the molecules when viewed down the a axis.....	30
5.6 Packing diagram of the molecules when viewed down the a axis.....	31
6. References.....	32