

РОССИЙСКАЯ АКАДЕМИЯ НАУК  
СИБИРСКОЕ ОТДЕЛЕНИЕ

# ЖУРНАЛ СТРУКТУРНОЙ ХИМИИ

НАУЧНЫЙ ЖУРНАЛ

Основан в 1960 г.

Выходит 8 раз в год

Т О М 58

Февраль-март

№ 2, 2017

## СТРОЕНИЕ БИОЛОГИЧЕСКИ АКТИВНЫХ СОЕДИНЕНИЙ

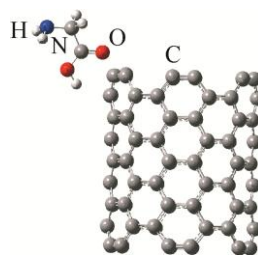
### СОДЕРЖАНИЕ

#### ТЕОРИЯ СТРОЕНИЯ МОЛЕКУЛ И ХИМИЧЕСКОЙ СВЯЗИ

Нечаева Л.С., Бутырская Е.В.,  
Запругаев С.А.

**Компьютерное моделирование  
сорбции аминокислот  
на углеродных нанотрубках**

**Ключевые слова:** углеродная нанотрубка, глицин,  
аланин, фенилаланин, компьютерное моделирование,  
энергия адсорбции

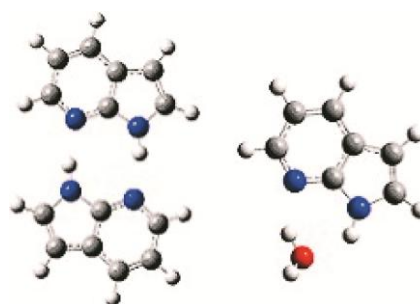


233

Тен Г.Н., Глухова О.Е., Слепченков М.М.,  
Щербакова Н.Е., Баранов В.И.

**Теоретическое исследование механизма  
таутомерного превращения  
в димере 7-азаиндола и комплексе  
7-азаиндола с молекулой воды методами  
оптической спектроскопии**

**Ключевые слова:** 7-азаиндол, комплекс с водой,  
димер, таутомер, электронные спектры,  
низкочастотные колебания, спектры флуоресценции

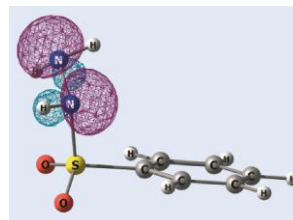


242

Фёдоров М.С., Гиричева Н.И.

**Проявление *gauche*-эффекта в конформерах  
гидразида бензолсульфоновой кислоты**

**Ключевые слова:** ароматические сульфонилгидразиды,  
гидразид бензолсульфоновой кислоты, конформеры,  
NBO анализ, квантово-химические расчеты,  
*gauche*-эффект, аномерный эффект

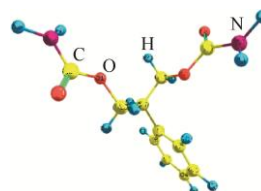


253

Khaleghi-Rad A., Beyramabadi S.A., Morsali A.,  
Ebrahimi M., Khorasandi-Chenarboo M.

**Tautomerism of the antiepileptic drug Felbamate:  
A DFT study**

**Keywords:** Felbamate, Taloxa, DFT, PCM,  
tautomerism, intramolecular proton transfer



261

ИЗДАТЕЛЬСТВО СО РАН  
НОВОСИБИРСК  
2017

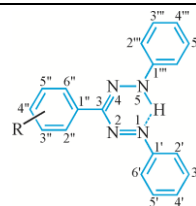
## ИССЛЕДОВАНИЕ СТРОЕНИЯ МОЛЕКУЛ ФИЗИЧЕСКИМИ МЕТОДАМИ

Tezcan H., Tokay N.

269

### Structural and spectral properties of 3-substitutedphenyl-1,5-diphenylformazans: A quantum chemical study

**Keywords:** formazans, substituent effects, UV-vis spectra, TD-DFT, PCM

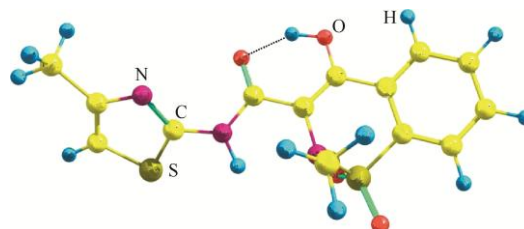


Pacheco A.G., Salgado-Morán G., Gerli-Candia L., Ramírez-Tagle R., Glossman-Mitnik D., Misra A., De Carvalho Alcântara A.F.

278

### Theoretical investigation of the molecular structure and spectroscopic properties of oxicams

**Keywords:** nonsteroidal anti-inflammatory drugs, chemical properties, spectroscopic analysis, density functional theory



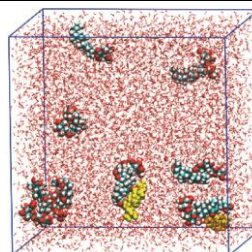
## СТРУКТУРА ЖИДКОСТЕЙ И РАСТВОРОВ

Аникеенко А.В., Зеликман М.В., Кадцын Е.Д., Медведев Н.Н.

285

### Моделирование ассоциатов глицирризиновой кислоты с холестерином в метаноле

**Ключевые слова:** молекулярно-динамическое моделирование, водные растворы, глицирризиновая кислота, холестерин, метанол, структура ассоциатов

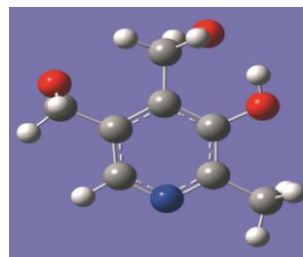


Гамов Г.А., Александрыйский В.В., Шарнин В.А.

293

### Строение сольватов пиридоксина в водном растворе по данным квантовохимических расчетов и спектроскопии ЯМР

**Ключевые слова:** пиридоксин, DFT, ЯМР, сольватация, таутомерное равновесие



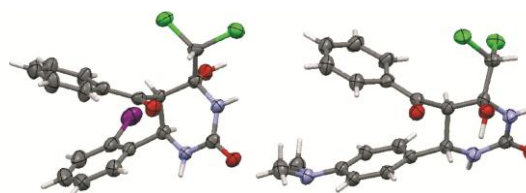
## КРИСТАЛЛОХИМИЯ

Миронова Е.В., Криволапов Д.Б., Литвинов И.А., Мустакимова Л.В., Мамедов В.А.

300

### Структура новых производных пергидропиримидин-2-онов и межмолекулярные взаимодействия в их кристаллах

**Ключевые слова:** пергидропиримидин-2-оны, кристаллическая и молекулярная структура, рентгеноструктурный анализ

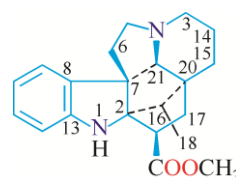


Адизов Ш.М., Ташходжаев Б., Кунафиев Р.Ж., Мирзаева М.М., Юлдашев П.Х.

308

### Кристаллическая структура псевдокопсинина и его солей

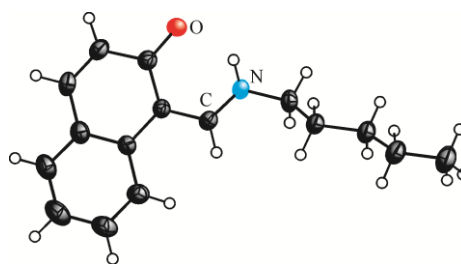
**Ключевые слова:** индолиновые алкалоиды, псевдокопсинин, галоидные соли, PCA



Ahmad M., Perveen Z., Bortoluzzi A.J., Hameed S., Shah M.R., Tariq M., ud Din G., Anwar M.

**Structural diversities and preliminary antimicrobial studies of 1-((E)-(pentylimino)methyl)naphthalen-2-ol and its metal complexes**

**Keywords:** 2-hydroxynaphthaldehyde, *n*-amyl amine, zwitterions, octahedral, centrosymmetric square planar, antimicrobial



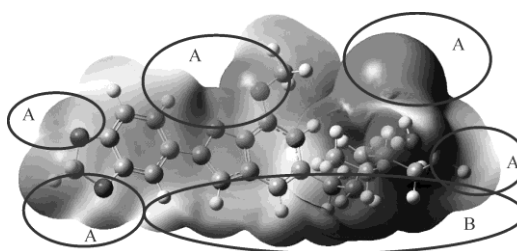
314

**СУПРАМОЛЕКУЛЯРНЫЕ И НАНОРАЗМЕРНЫЕ СИСТЕМЫ**

Yakalı G., Öztürk S.E., Aygün M.

**Strong hydrogen bonded supramolecular architecture in a crystal of the {3-[2-(1,3-benzodioxol-5-yl)-7-methoxy-1-benzofuran-5-yl] propyl} diethylamine cation with the hydrogen bonded chloride hydrate anion (halides) assembly: X-ray structure analysis, DFT calculations, Hirshfeld surface analysis**

**Keywords:** crystal structure, benzofuran, bifurcate hydrogen bond, chloride hydrate, supramolecular architecture, tetramers, halides, DFT, Hirshfeld surface analysis



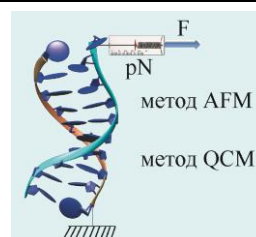
321

**ОБЗОРЫ**

Курусь Н.Н., Дульцев Ф. Н.

**Измерение силы раскручивания двойной спирали ДНК**

**Ключевые слова:** межмолекулярные силы, кварцевый резонатор, олигонуклеотиды, комплементарность, атомно-силовая микроскопия



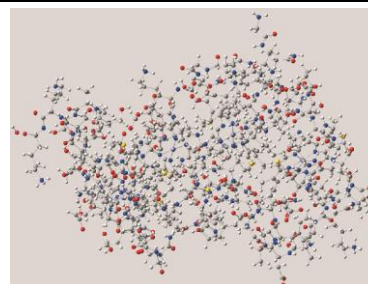
332

**КРАТКИЕ СООБЩЕНИЯ**

Митин А.В.

**Взаимная поляризация аминокислот в малом тетра-гем цитохроме с 1M1P**

**Ключевые слова:** неэмпирический расчет, приближение ЛКАО, метод Хартри-Фока, молекулярные орбитали, анализ заселенности

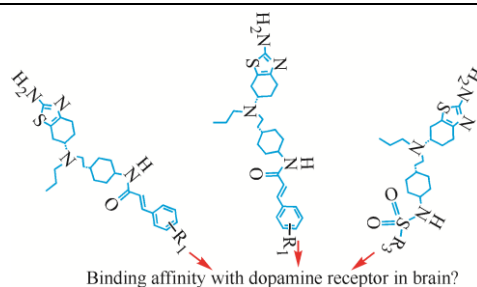


357

Mahani M., Sheikhghomi S., Sheikhghomi H., Fasihi J.

**Quantitative structure activity relationship study on binding affinity of some aminothiazole derivatives with dopamine receptor in brain**

**Keywords:** QSAR, partial least squares, soft modelling, structural descriptors, aminothiazole derivatives, dopamine receptor

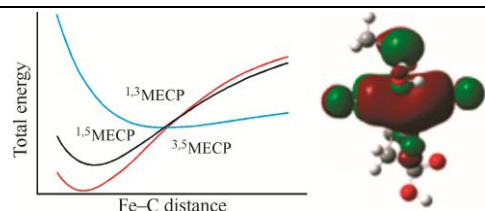


361

Zha G.-J.

**Spin-forbidden CO binding to iron–sulfur cluster-free hydrogenase:  
A density functional study**

**Keywords:** density functional theory, PHmd–CO, cluster-free hydrogenase

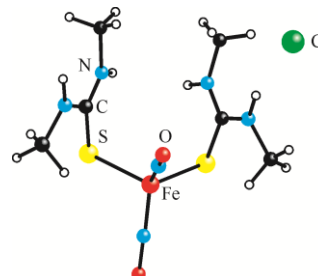


366

Шматко Н.Ю., Корчагин Д.В., Шилов Г.В.,  
Санина Н.А., Алдошин С.М.

**Молекулярная и кристаллическая структура  
катионного динитрозильного комплекса железа  
с 1,3-диметилтиомочевинной**

**Ключевые слова:** оксид азота (NO),  
динитрозильные комплексы железа,  
1,3-диметилтиомочевина, PCA

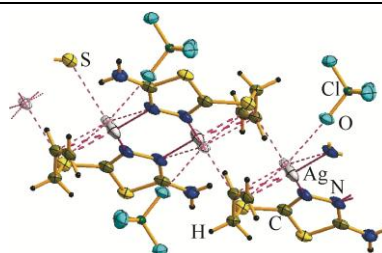


370

Слывка Ю.И.

**Кристаллическая структура  
π-комплекса AgClO<sub>4</sub>  
с 2-амино-5-аллилтио-1,3,4-тиадиазолом  
состава [Ag(C<sub>5</sub>H<sub>7</sub>N<sub>3</sub>S<sub>2</sub>)(ClO<sub>4</sub>)]**

**Ключевые слова:** синтез, серебро(I), π-комплекс,  
1,3,4-тиадиазол, кристаллическая структура

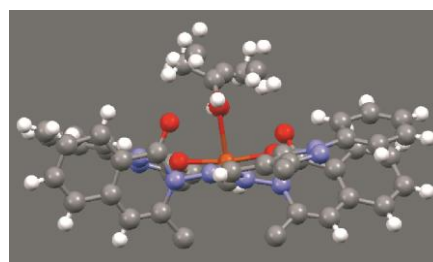


373

Попов Л.Д., Бородин С.А., Ткачёв В.В.,  
Туполова Ю.П., Бурлов А.С., Шилов Г.В.,  
Утенышев А.Н.

**Кристаллическая структура 2-метил-3-  
{[3-метил-5-оксо-1-фенилпиразол-4-илиден-  
метил]амино}-хиназолин-4-оната меди(II)**

**Ключевые слова:** рентгеноструктурный анализ,  
комплекс меди(II), кристаллическая структура

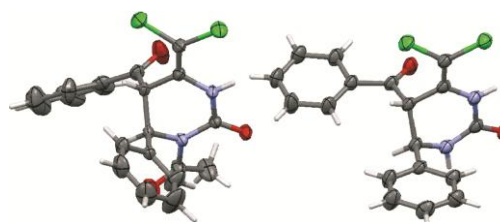


375

Миронова Е.В., Криволапов Д.Б., Литвинов И.А.,  
Мустакимова Л.В., Мамедов В.А.

**Молекулярная и кристаллическая структура  
4-дихлорметил-5-бензоил-6-фенил-  
пергидропиридин-2-она  
и его N(1)-замещенного аналога**

**Ключевые слова:** 2(1H)-пиримидиноны,  
дегидратация пиримидинонов,  
рентгеноструктурный анализ,  
молекулярная и кристаллическая структура

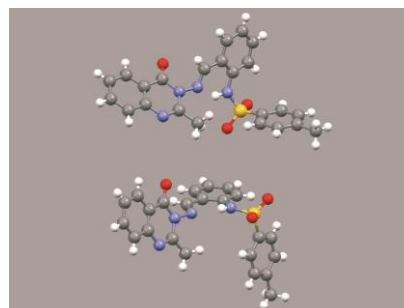


379

Попов Л.Д., Бородин С.А., Туполова Ю.П.,  
Левченков С.И., Ткачёв В.В., Бурлов А.С.,  
Цатурян А.А.

**Молекулярная и кристаллическая структура  
нового основания Шиффа:  
4-метил-N-[2-[(2-метил-4-оксо-4а-хиназолин-3-  
ил)иминометил]фенил]бензолсульфонамида**

**Ключевые слова:** основание Шиффа,  
рентгеноструктурный анализ, ЯМР,  
кристаллическая структура, молекулярное строение

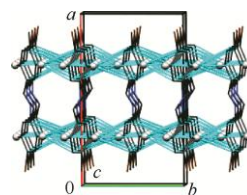


383

Jothi L., Anuradha G., Vasuki G., Ramesh Babu R.,  
Ramamurthi K.

**Crystal structure  
of N-(*p*-methylbenzylidene)-*p*-bromoaniline**

**Keywords:** synthesis, crystal structure, benzylidene, aniline,  
hydrogen bonding



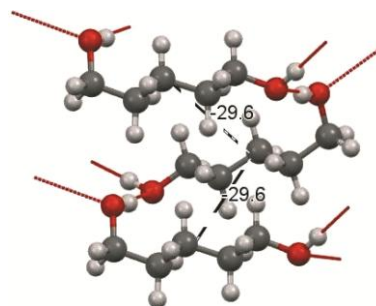
387

**МАТЕРИАЛЫ XVII СИМПОЗИУМА  
ПО МЕЖМОЛЕКУЛЯРНОМУ ВЗАИМОДЕЙСТВИЮ  
И КОНФОРМАЦИЯМ МОЛЕКУЛ, ПОСВЯЩЕННОГО 100-ЛЕТИЮ  
СО ДНЯ РОЖДЕНИЯ А.И. КИТАЙГОРОДСКОГО  
Россия, Пущино, 23–27 июня 2014 г.**

Гринёва О.В.

**Кристаллохимический анализ алифатических  
 $\alpha,\omega$ -диолов: возможности подходов  
А.И. Китайгородского и их развитие**

**Ключевые слова:** метод атом-атомных потенциалов,  
межмолекулярные взаимодействия, энергия кристалла,  
энергетическое координационное число, полиморфы,  
конформации, симметрия молекул в кристаллах,  
водородные связи,  
Кембриджский банк структурных данных

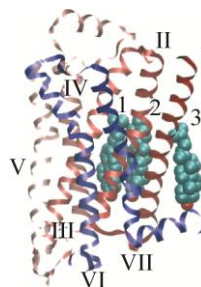


390

Богдан Т.В., Алексеев Е.С.

**Роль консервативной межспиральной  
водородной связи Ser74–Trp158 в сайте  
связывания холестерина в конформационной  
стабильности  $\beta_2$ -адренорецептора  
(молекулярно-динамическое моделирование)**

**Ключевые слова:**  $\beta_2$ -адренорецептор,  
межспиральная водородная связь Ser74 – Trp158,  
мутация S74A, молекулярно-динамическое моделирование



402

Пастон С.В., Николаев А.И., Ушков П.А.

**Комплексы ЭДТА, тимидина и ионов  $\text{Cu}^{2+}$   
по данным масс-спектрометрии**

**Ключевые слова:** азотистые основания ДНК,  
ионы меди(II), ЭДТА, хелатные комплексы,  
масс-спектрометрия, электроспрей

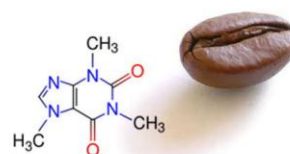


410

Пастон С.В., Поляничко А.М., Шуленина О.В.

**Исследование взаимодействия ДНК  
с ионами  $\text{Cu}^{2+}$  и  $\text{Mg}^{2+}$   
в присутствии кофеина**

**Ключевые слова:** ДНК, кофеин, ионы металлов,  
УФ поглощение, круговой дихроизм, ИК спектроскопия,  
вторичная структура ДНК



417

Касьяненко Н.А., Qiushi Z., Варшавский М.С.,  
Бакулев В.М., Демидов В.Н.

**Металлокомплексы ДНК и металлизация  
макромолекулы в растворе**

**Ключевые слова:** ДНК,  
наночастицы и люминесцирующие нанокластеры серебра,  
 $\text{Ag}(\text{Phen})_2\text{NO}_3$ , *цис*-ДДП



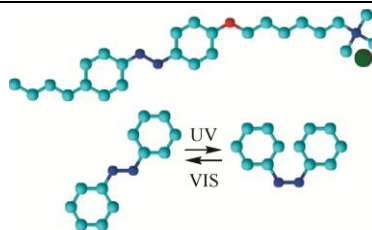
424



Унксов И.Н., Касьяненко Н.А.

**Конформационные изменения молекулы ДНК в растворе, вызванные связыванием светочувствительного катионного ПАВ**

**Ключевые слова:** фотоиндуцированная компактизация ДНК в комплексе с ПАВ, персистентная длина ДНК, *транс-цис*-изомеризация азобензольной группы

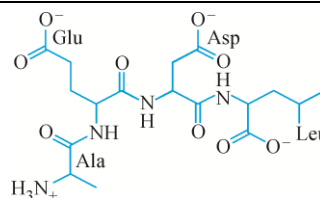


431

Морозова Е.А., Линькова Н.С., Хавинсон В.Х.,  
Соловьёв А.Ю., Касьяненко Н.А.

**Взаимодействие пептида AEDL с ДНК *in vitro***

**Ключевые слова:** тетрапептид AEDL, бронхиальный эпителий, ДНК-пептидные взаимодействия, круговой дихроизм, вискозиметрия



438

**Содержание следующего номера — в конце журнала**