

**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

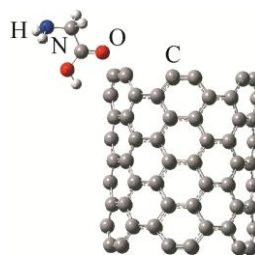
СОДЕРЖАНИЕ

ТЕОРИЯ СТРОЕНИЯ МОЛЕКУЛ И ХИМИЧЕСКОЙ СВЯЗИ

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

**Компьютерное моделирование
сорбции аминокислот
на углеродных нанотрубках**

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

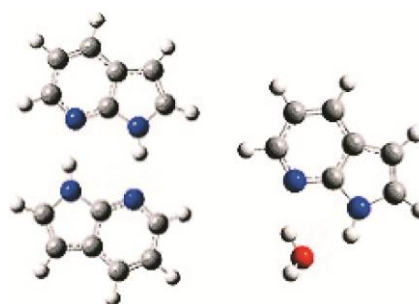


233

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

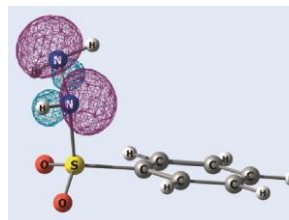


242

Фёдоров М.С., Гиричева Н.И.

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

Ключевые слова: ароматические сульфонилгидразиды,
гидразид бензолсульфоновой кислоты, конформеры,
NBO анализ, квантово-химические расчеты,
gou-эффект, аномальный эффект

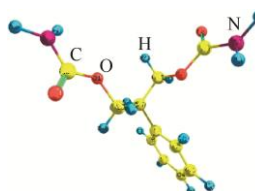


253

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



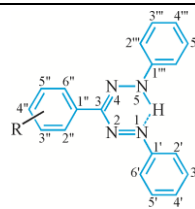
261

ИССЛЕДОВАНИЕ СТРОЕНИЯ МОЛЕКУЛ ФИЗИЧЕСКИМИ МЕТОДАМИ

Tezcan H., Tokay N.

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

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

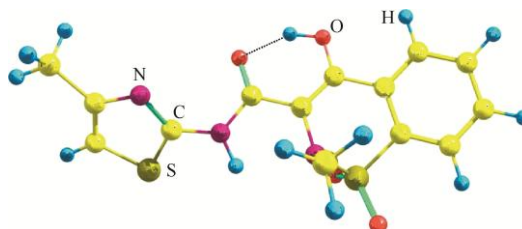


269

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

Theoretical investigation of the molecular structure and spectroscopic properties of oxicams

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



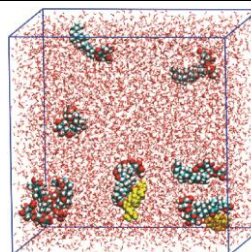
278

СТРУКТУРА ЖИДКОСТЕЙ И РАСТВОРОВ

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

Моделирование ассоциатов глицирризиновой кислоты с холестерином в метаноле

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

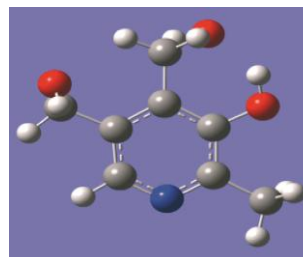


285

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

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

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



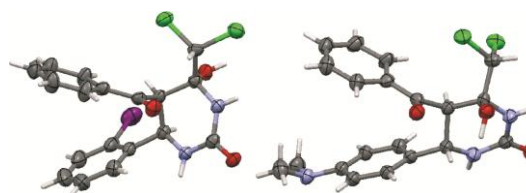
293

КРИСТАЛЛОХИМИЯ

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

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

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

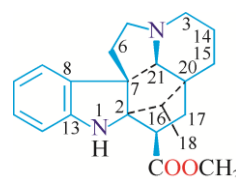


300

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

Кристаллическая структура псевдокопсинина и его солей

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

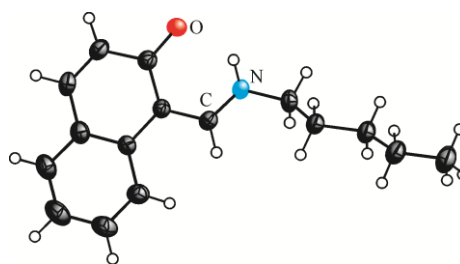


308

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



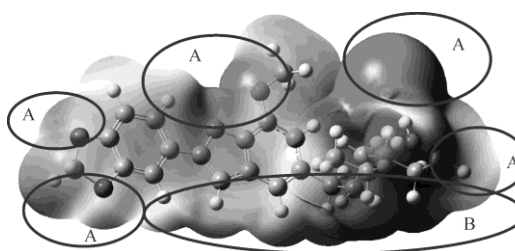
314

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



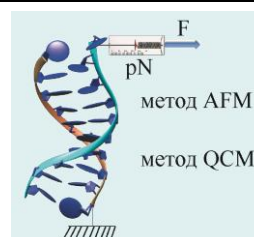
321

ОБЗОРЫ

Курусь Н.Н., Дульцев Ф. Н.

Измерение силы раскручивания двойной спирали ДНК

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



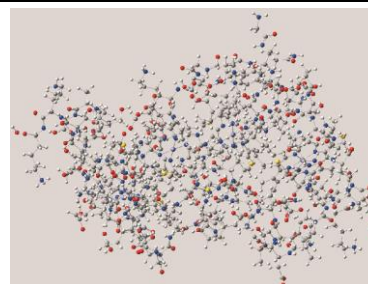
332

КРАТКИЕ СООБЩЕНИЯ

Митин А.В.

Взаимная поляризация аминокислот в малом тетра-гем цитохроме с 1MIP

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

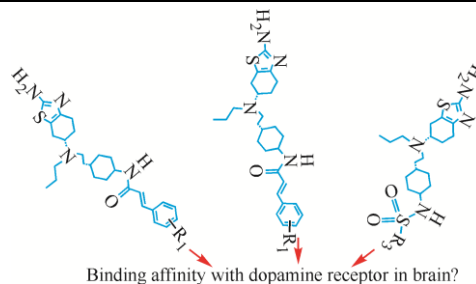


357

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

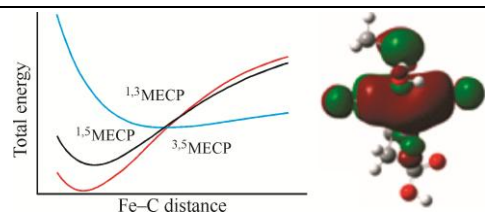


361

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

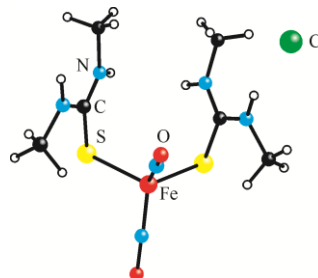


366

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

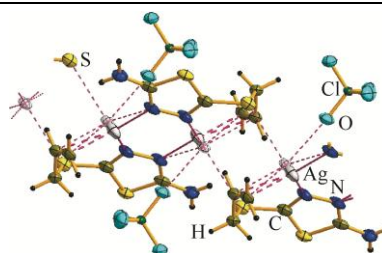


370

Слывка Ю.И.

**Кристаллическая структура
 π -комплекса AgClO_4
с 2-амино-5-аллилтио-1,3,4-тиадиазолом
состава $[\text{Ag}(\text{C}_5\text{H}_7\text{N}_3\text{S}_2)(\text{ClO}_4)]$**

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

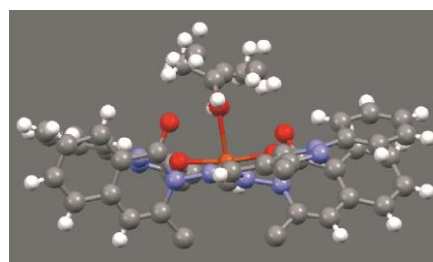


373

Попов Л.Д., Бородкин 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-
пергидропиримидин-2-она
и его N(1)-замещенного аналога**

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

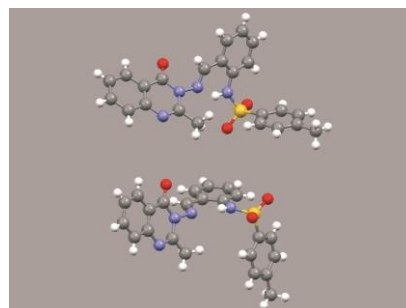


379

Попов Л.Д., Бородкин 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-4ан-хиназолин-3-
ил)иминометил]фенил]бензолсульфонамида**

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

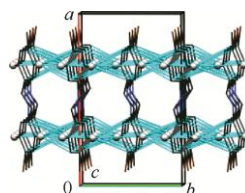


383

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



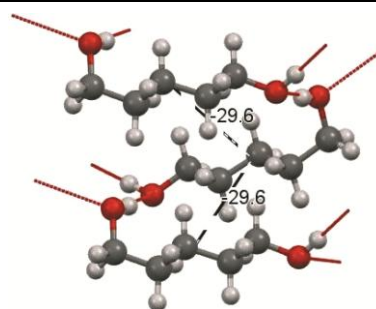
387

**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 α,ω-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

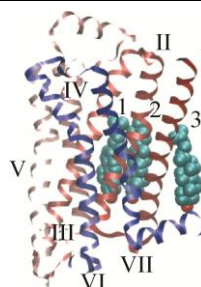


390

Богдан Т.В., Алексеев Е.С.

Роль консервативной межспиральной водородной связи Ser74–Trp158 в сайте связывания холестерина в конформационной стабильности β₂-адренорецептора (молекулярно-динамическое моделирование)

Ключевые слова: β₂-адренорецептор, межспиральная водородная связь Ser74 – Trp158, мутация S74A, молекулярно-динамическое моделирование

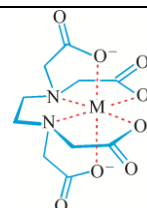


402

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

Комплексы ЭДТА, тимидина и ионов Cu²⁺ по данным масс-спектрометрии

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

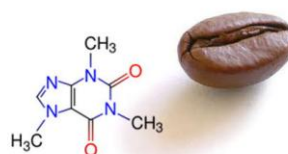


410

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

Исследование взаимодействия ДНК с ионами Cu²⁺ и Mg²⁺ 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, Ag(Phen)₂NO₃, *cis*-ДДП

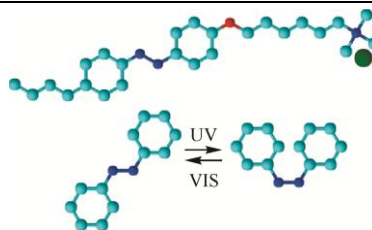


424

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

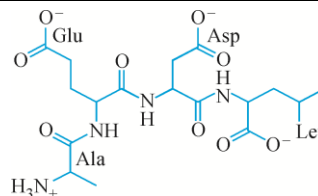


431

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