

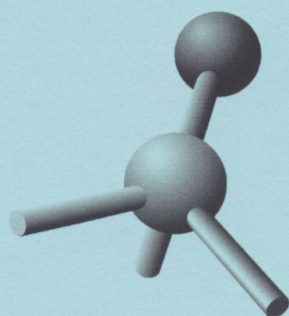


ISSN 0136-7463

РОССИЙСКАЯ АКАДЕМИЯ НАУК

Том 58
февраль
март
2017

ЖУРНАЛ СТРУКТУРНОЙ ХИМИИ



СТРОЕНИЕ БИОЛОГИЧЕСКИ АКТИВНЫХ
СОЕДИНЕНИЙ

№ 2

НОВОСИБИРСК

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

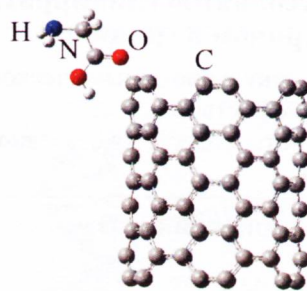
СОДЕРЖАНИЕ

ТЕОРИЯ СТРОЕНИЯ МОЛЕКУЛ И ХИМИЧЕСКОЙ СВЯЗИ

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

**Компьютерное моделирование
сорбции аминокислот
на углеродных нанотрубках**

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

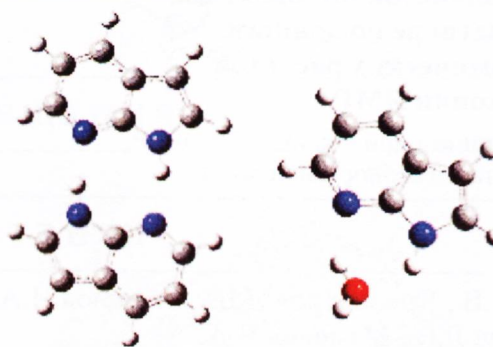


233

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

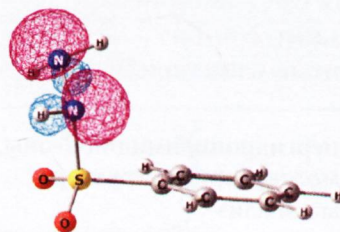


242

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

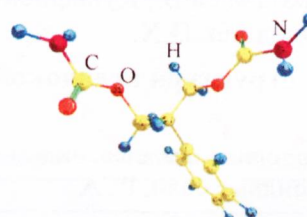


253

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

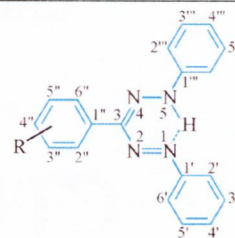


261

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

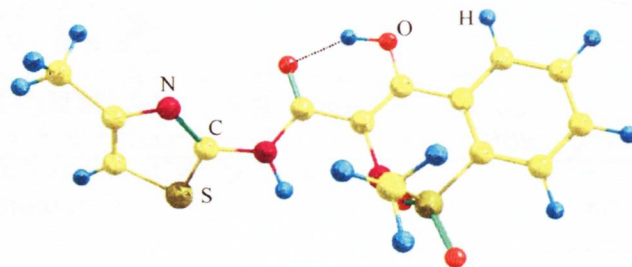


269

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



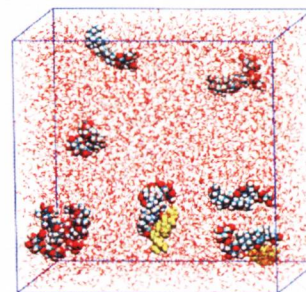
278

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

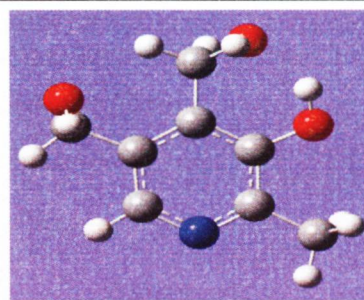


285

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



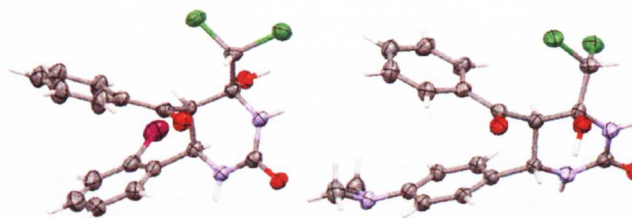
293

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

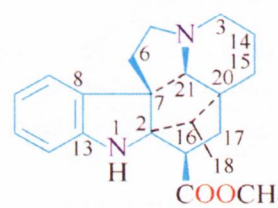


300

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

Кристаллическая структура псевдокопсинина и его солей

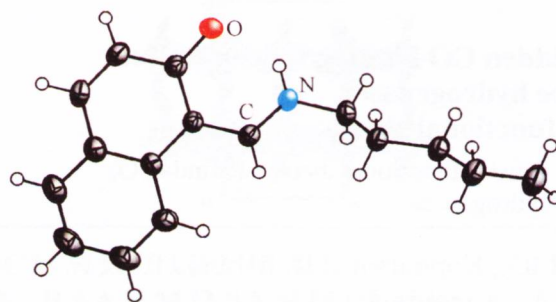
Ключевые слова: индолиновые алкалоиды, псевдокопсинин, галоидные соли, PCA



308

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

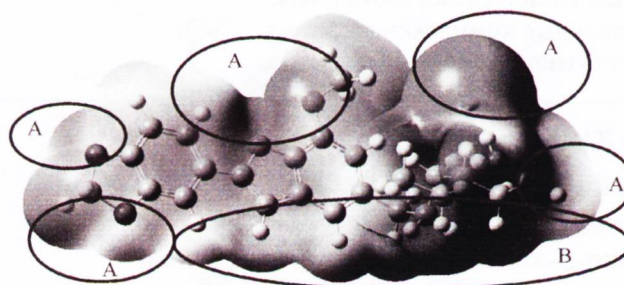
Keywords: 2-hydroxynaphthaldehyde, *n*-amyl amine, zwitterions, octahedral, centrosymmetric square planar, antimicrobial



СУПРАМОЛЕКУЛЯРНЫЕ И НАНОРАЗМЕРНЫЕ СИСТЕМЫ

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

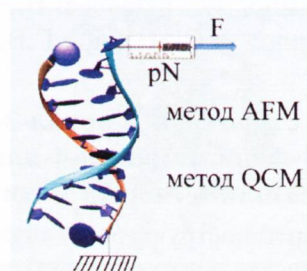
Keywords: crystal structure, benzofuran, bifurcate hydrogen bond, chloride hydrate, supramolecular architecture, tetramers, halides, DFT, Hirshfeld surface analysis



ОБЗОРЫ

Измерение силы раскручивания двойной спирали ДНК

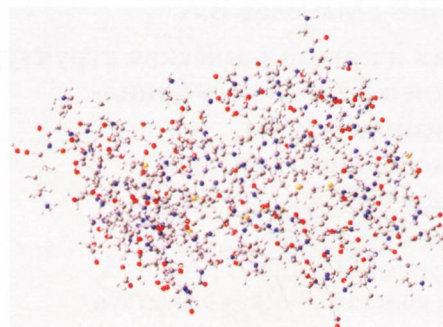
Ключевые слова: межмолекулярные силы, кварцевый резонатор, олигонуклеотиды, комплементарность, атомно-силовая микроскопия



КРАТКИЕ СООБЩЕНИЯ

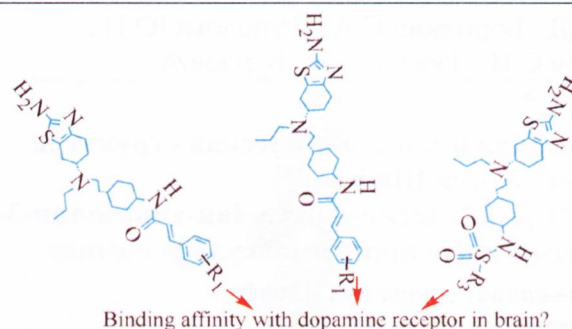
Взаимная поляризация аминокислот в малом тетра-гем цитохроме с 1M1P

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



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

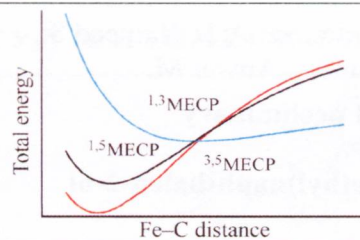
Keywords: QSAR, partial least squares, soft modelling, structural descriptors, aminothiazole derivatives, dopamine receptor



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

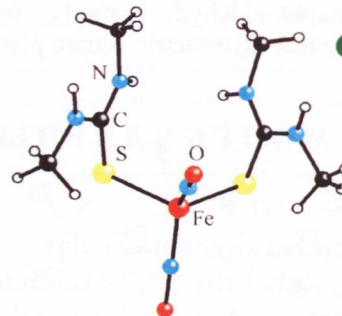


366

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-диметилтиомочевиной**

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

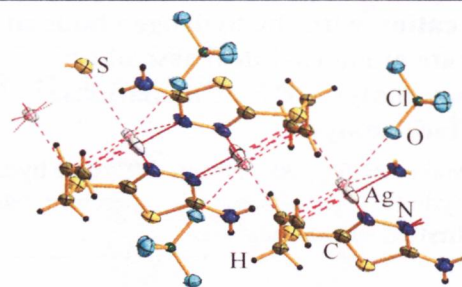


370

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

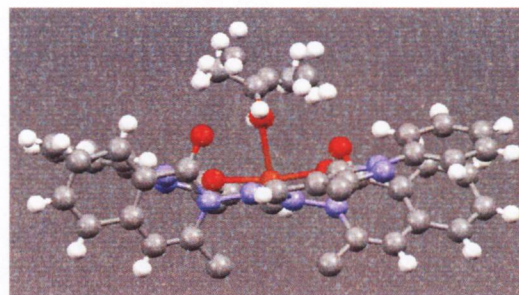


373

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

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

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

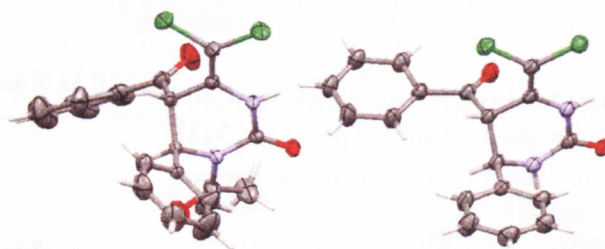


375

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

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

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

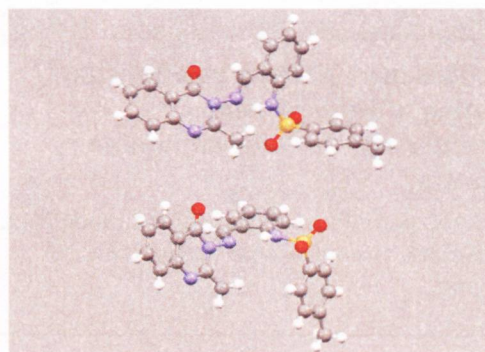


379

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

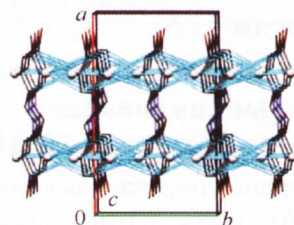
Ключевые слова: основание Шиффа,
рентгеноструктурный анализ, ЯМР,
кристаллическая структура, молекулярное строение



383

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

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



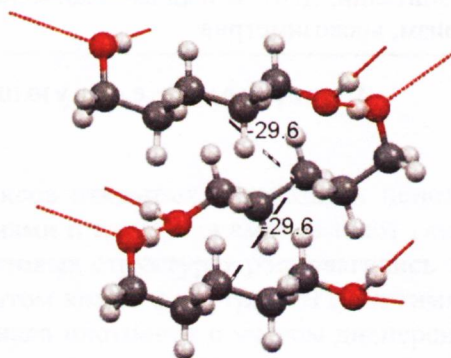
387

**МАТЕРИАЛЫ XVII СИМПОЗИУМА
ПО МЕЖМОЛЕКУЛЯРНОМУ ВЗАИМОДЕЙСТВИЮ
И КОНФОРМАЦИЯМ МОЛЕКУЛ, ПОСВЯЩЕННОГО 100-ЛЕТИЮ
СО ДНЯ РОЖДЕНИЯ А.И. КИТАЙГОРОДСКОГО
Россия, Пушкино, 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

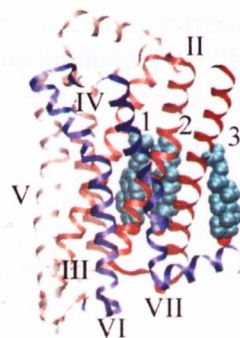


390

Богдан Т.В., Алексеев Е.С.

**Роль консервативной межспиральной
водородной связи Ser74–Trp158 в сайте
связывания холестерина в конформационной
стабильности β_2 -адренорецептора
(молекулярно-динамическое моделирование)**

Ключевые слова: β_2 -адренорецептор,
межспиральная водородная связь Ser74 – Trp158,
мутация S74A, молекулярно-динамическое моделирование

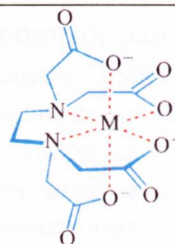


402

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

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

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

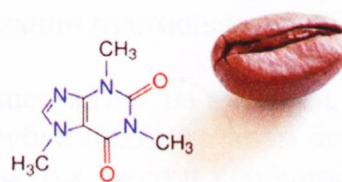


410

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

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

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

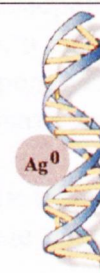


417

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

**Металлокомплексы ДНК и металлизация
макромолекулы в растворе**

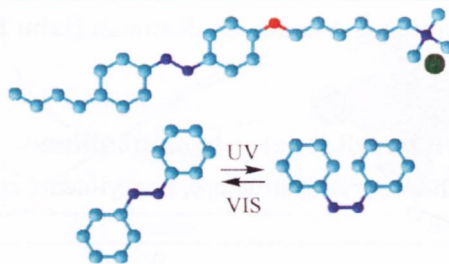
Ключевые слова: ДНК,
наночастицы и люминесцирующие нанокластеры серебра,
 $\text{Ag}(\text{Phen})_2\text{NO}_3$, *cis*-ДДП



424

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

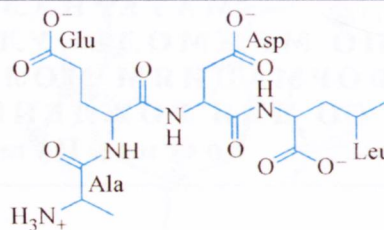


431

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