

ДОПОЛНИТЕЛЬНЫЕ МАТЕРИАЛЫ К СТАТЬЕ
**ВЛИЯНИЕ НЕКОВАЛЕНТНЫХ ВЗАИМОДЕЙСТВИЙ
 НА ПРОЧНОСТЬ СВЯЗЫВАНИЯ ЛАМИВУДИНА
 С ДИСУЛЬФИДОМ МОЛИБДЕНА
 В МНОГОСЛОЙНОЙ И ОДНОСЛОЙНОЙ ГИБРИДНЫХ СТРУКТУРАХ**

А.С. Головешкин, И.Е. Ушаков, Р.У. Таказова, Н.Д. Лененко, А.С. Голубь

Институт элементоорганических соединений им. А.Н. Несмеянова РАН, Москва, Россия

E-mail: golov-1@mail.ru

Table S1. Calculated energies of model structures.

Model	1	2	3	3-exf*
E (eV)	-293.622	-293.701	-293.766	-293.103
E vs model 3 (kcal/mol Lam)	3.31	1.50	0	15.3

* exfoliated model

Table S2. Characteristics of NH...S, CH...S, C...S, O...S и N...S contacts of LamH with MoS₂ layers in the structure of (LamH)_{1/6}MoS₂.

A-H (Å)	A...S (Å)	H...S (Å)	∠AHS (°)	E (kcal/mol)
NH...S				
1.040	3.466	2.430	173.931	3.3
1.035	3.260	2.278	157.771	5.2
N...S				
	3.705			0.6
CH...S				
1.101	4.065	3.287	128.557	0.4
1.104	4.047	3.201	134.071	0.6
1.099	3.951	3.147	130.583	0.7
1.099	4.077	3.057	154.699	0.7
1.093	4.347	3.337	154.151	0.4
OH...S				
0.989	4.041	3.385	126.253	0.3
O...S				
	3.517			0.6
	3.970			0.3

Table S3. Characteristics of NH...S, CH...S, C..S, O..S и N...S contacts of LamH with MoS₂ layer in the structure of exfoliated (LamH)_{1/6}MoS₂.

A-H (Å)	A...S (Å)	A...S (Å)	∠AHS (°)	E (ккал/моль)
NH...S				
1.054	3.304	2.250	177.589	5.7
1.054	3.109	2.085	163.218	9.6
N...S				
	3.485			0.9
CH...S				
1.098	3.801	3.179	116.717	0.7
1.098	4.472	3.529	144.870	0.2
OH...S				
0.984	3.645	2.706	159.770	1.4
	3.216			0.6
	3.862			0.3

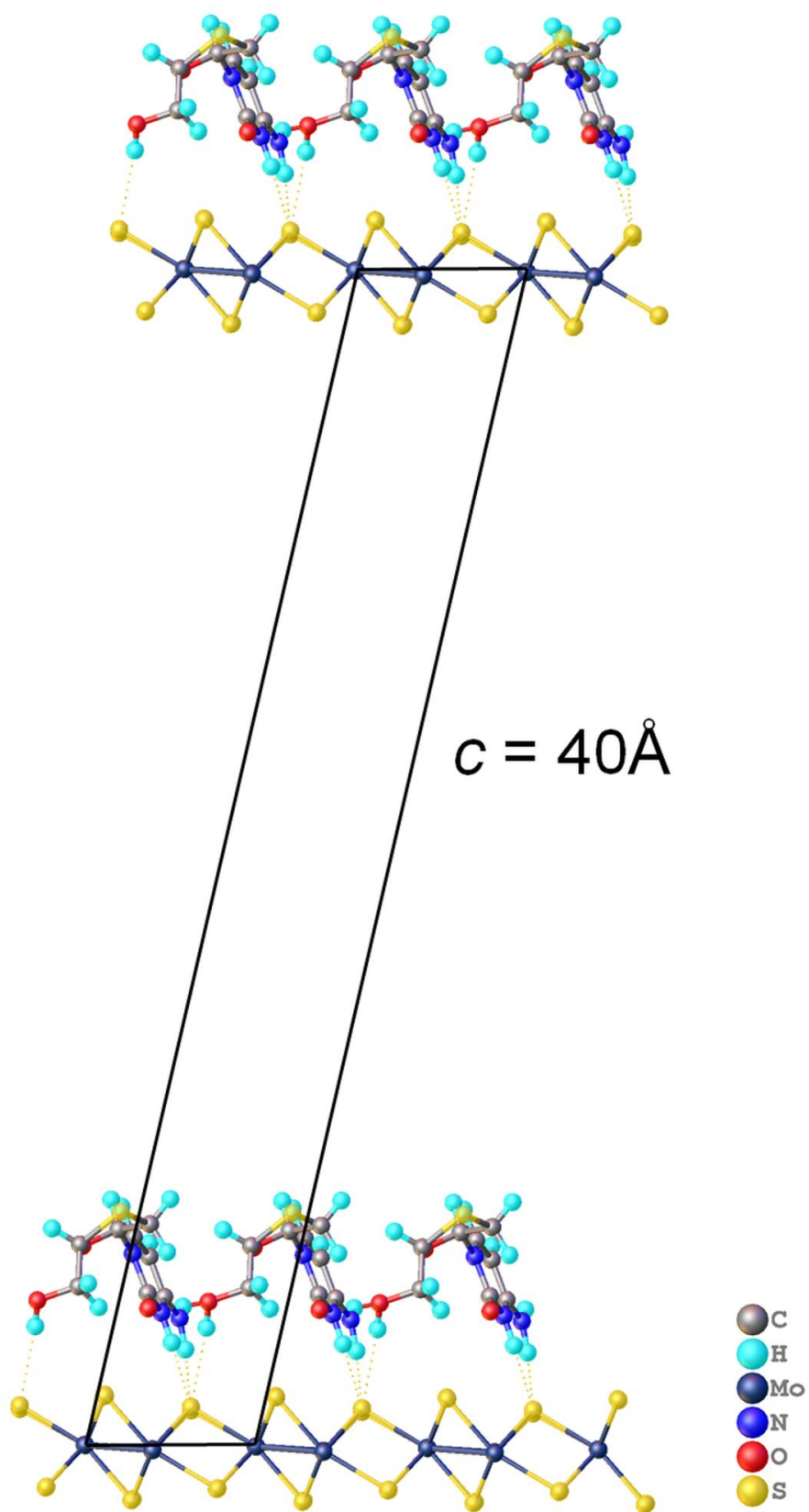


Рисунок S1. Exfoliated model of LamH-MoS₂ (3-exf).