

УДК 544.18

Е. А. Лапыкина, Н. И. Гиричева, Д. В. Короткова, С. А. Сырбу

**ПРОЯВЛЕНИЕ ЧЕТНО-НЕЧЕТНОГО ЭФФЕКТА В МОЛЕКУЛЯРНЫХ ПАРАМЕТРАХ
p-n-АЛКИЛОКСИБЕНЗОЙНЫХ КИСЛОТ И ИХ ПИРИДИНОВЫХ ЭФИРОВ**

Ивановский государственный университет,
ул. Ермака, 39, 153025 Иваново, Россия. E-mail: n.i.giricheva@mail.ru

*Методом DFT/B3LYP/cc-pVTZ изучено проявление альтернации в величинах молекулярных параметров *p-n*-алкилоксибензойных кислот и их пиридиновых эфиров в зависимости от числа атомов углерода в радикалах. Установлено, что молекулярные характеристики, такие как геометрические параметры (длина, ширина, объем, вращательная постоянная) и составляющие дипольного момента, проявляют четно-нечетный эффект, сравнимый с тем, который наблюдается для температур фазового перехода $N \rightarrow I$, в то время как этот эффект не наблюдается на величинах полной электронной энергии E и термодинамических функций G и H . На примере гомологов *p-n*-алкилоксибензойных кислот и их пиридиновых эфиров показано, что геометрическое строение индивидуальных соединений является одной из весомых причин проявления четно-нечетного эффекта в экспериментальных макрохарактеристиках процессов, протекающих в жидкокристаллических системах.*

Ключевые слова: четно-нечетный эффект, жидкие кристаллы, *p-n*-алкилоксибензойные кислоты, пиридиновые эфиры *p-n*-алкилоксибензойных кислот, молекулярные характеристики, квантово-химические расчеты.

DOI: 10.18083/LCAppl.2016.4.27

E. A. Lapykina, N. I. Giricheva, D. V. Korotkova, S. A. Syrbu

**MANIFESTATION OF THE EVEN-ODD EFFECT IN THE MOLECULAR PARAMETERS
OF *p-n*-ALKYLOXYBENZOIC ACIDS AND THEIR PYRIDINE ESTERS**

Ivanovo State University,
39 Ermak St., Ivanovo, 153025, Russia. E-mail: n.i.giricheva@mail.ru

*The manifestation of alternation in changing of molecular parameters values of *p-n*-alkyloxybenzoic acids and their pyridine esters versus the number of carbon atoms in radicals was studied by DFT/B3LYP/cc-pVTZ method. It was found that molecular characteristics, such as geometric parameters (length, width, volume, rotational constant), as well as the components of the dipole moment exhibit even-odd effect comparable to that observed for the $N \rightarrow I$ phase transition temperature, while this effect was not observed in the values of total electron energy E and the thermodynamic functions G and H . As an example of homologous series of the *p-n*-alkyloxybenzoic acids and the pyridine esters of *p-n*-alkyloxybenzoic acids it was shown that the geometric structure of the individual compounds is one of the main reasons of even-odd effect manifestation in experimental macrocharacteristics of the processes, occurring in liquid crystal systems.*

Key words: even-odd effect, liquid crystals, *p-n*-alkyloxybenzoic acids, pyridine esters of *p-n*-alkyloxybenzoic acids, molecular characteristics, quantum chemical calculations.

Введение

Альтернирование различных характеристик жидкокристаллических соединений, содержащих алкильные или алкилоксидные радикалы, в зависимости от числа атомов углерода в них, называется четно-нечетным эффектом. Особенно часто в качестве подтверждения наличия четно-нечетного эффекта приводят изменение температуры нематико-изотропного фазового перехода [1–5]. Причиной проявления четно-нечетного эффекта является несколько факторов, которые обусловлены как строением индивидуальных молекул, так и их взаимным расположением в конденсированной фазе, а следовательно, и силами межмолекулярных взаимодействий.

В большинстве работ, посвященных данной тематике, структурные особенности индивидуальных молекул с четным или нечетным количеством атомов углерода в алкильном или алкилоксидном радикалах детально не рассматриваются. Можно отметить работы [2, 3], в которых исследовано влияние строения молекул *4-n-алкил-4'-цианобифенилов* ($n = 5-10$) на теплофизические свойства соединений [2], а также квантово-химическое исследование проявления четно-нечетного эффекта на геометрических характеристиках *n-алкил-n'-цианобифенила* ($n = 1-8$) [3]. В работе [2] с использованием сочетания методов Монте-Карло и атом-атомных потенциалов показано, что существует ярко выраженная четно-нечетная корреляция между энергией системы эллипсоидальных частиц и анизотропией геометрической формы *4-n-алкил-4'-цианобифенилов*. В работе [3] на основании результатов квантово-химических расчетов с использованием метода *HF/6-31G** отмечено, что проявление четно-нечетного эффекта наблюдается на таких характеристиках, как дипольный момент, ширина, объем и момент инерции молекулы, тогда как на значениях полной энергии и длин молекул *4-n-алкил-4'-цианобифенилов* этот эффект проявляется слабо.

В настоящей работе изучены другие серии мезогенов (*n-n-алкилоксибензойные кислоты* и *пиридиновые эфиры n-n-алкилоксибензойных кислот*) с алкилоксидными радикалами $-O-R$, где $R = -C_nH_{2n+1}$ ($n = 3-10$), с целью определения проявления четно-нечетного эффекта при анализе

более широкого набора молекулярных характеристик методами квантовой химии.

В дальнейшем будут использованы следующие сокращения: *n-кислота* – для *пара-n-алкилоксибензойной кислоты* и *n-эфир* – для *пиридинового эфира пара-n-алкилоксибензойной кислоты*, где n – число атомов углерода в радикале.

Квантово-химические расчеты

В работе использован метод функционала электронной плотности *DFT/B3LYP* в сочетании с базисным набором *cc-pVTZ* (пакет *Gaussian03*) [6]. Для конформеров с *n-n*-линейными радикалами $-O-R$ молекул *n-кислот* и *n-эфиров* выполнена полная оптимизация геометрических параметров и расчет частот колебаний.

Визуализация геометрической структуры выполнена с помощью программы *ChemCraft* [7].

Результаты и их обсуждение

Статистический анализ рентгеноструктурных данных соединений с алкилоксидными радикалами разной длины

Четно-нечетный эффект напрямую связан со структурой и упаковкой кристаллических структур. Мезоморфные соединения, содержащие *пара*-алкилоксизаместители различной длины, имеют большое число нежестких торсионных координат, порождающих конформационное многообразие молекул. Для получения информации о строении радикала $-O-R$ в кристаллических соединениях, содержащих фрагмент $X-C(=O)-C_6H_4-O-R$ с различной длиной R ($n = 3-10$), был выполнен анализ более 300 структур, найденных в Кристаллографической базе данных [8].

Статистический анализ данных [8] показал, что в кристаллических соединениях с алкилоксидными радикалами преимущественно реализуются три варианта структур, два из которых имеют плоскую «зигзаг-конформацию» радикала $-O-R$ с $\varphi(O=C---O-R) = 180^\circ$ (структура **a**) или 0° (структура **b**) и остальными торсионными углами, равными 180° , и структуры **c**, которые имеют радикал, выходящий из плоскости бензольного кольца $\varphi(OC_1C_2C_3) = 50^\circ-70^\circ$ (рис. 1).

Отметим, что с удлинением углеродной цепи, начиная с $n = 5$, структур типа *a* и *b* оказывается больше, чем структур типа *c*, в три раза. Поэтому при дальнейшем рассмотрении

четно-нечетного эффекта для конденсированной фазы и свободных молекул с алкилоксидными радикалами использованы только структуры первых двух типов.

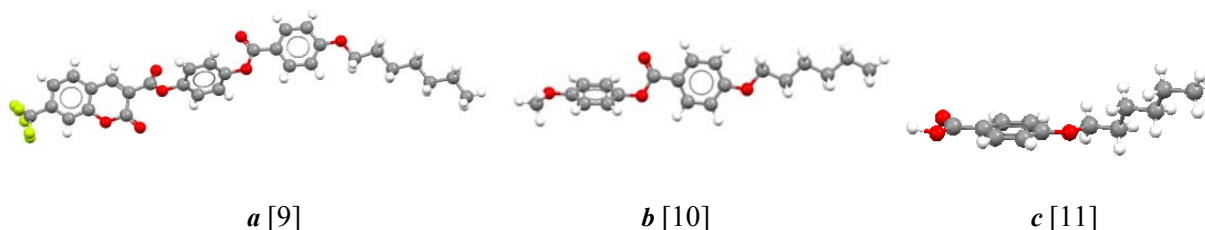


Рис. 1. Примеры структур, реализующихся в кристаллах [8]

Заслуживает внимания экспериментальный факт, обнаруженный в работе [12] при анализе банка данных по диэлектрическим, объемным, оптическим, реологическим свойствам гомологических рядов нематогенов с различными типами межмолекулярных взаимодействий. Показано изменение зависимостей значений анизотропии молекулярной поляризуемости, эффективной поляризуемости мезофазы, параметра ориентационного порядка мезофазы, плотности молекулярной упаковки и активационных характеристик вязкого течения от длины цепи терминального заместителя при

наличии в ней свыше пяти атомов углерода. По нашему мнению, одной из причин обнаруженного экспериментального факта является изменение конформационного состояния алкилоксидного радикала при его удлинении.

В конденсированной фазе способ и прочность упаковки молекул в кристалле напрямую зависит от геометрического строения радикала и количества атомов углерода в нем.

В качестве примера на рис. 2 показано расположение соседних молекул в кристаллах 4'-цианофенил-4-*n*-пентоксibenзоата и 4'-цианофенил-4-*n*-деканоксибензоата.

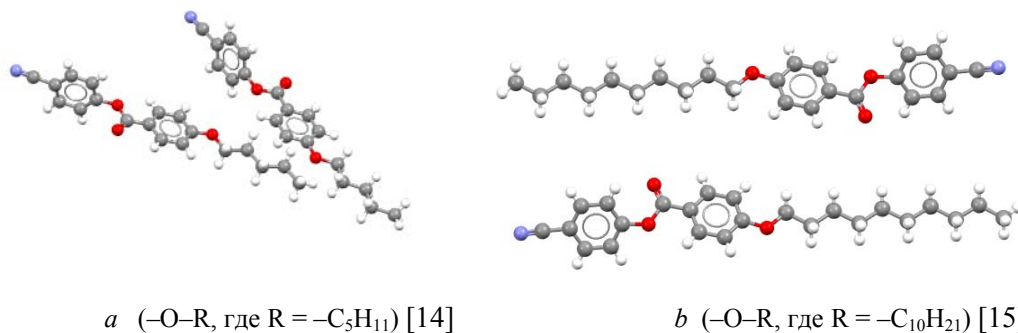


Рис. 2. Взаимное расположение соседних молекул в кристаллах 4'-цианофенил-4-*n*-пентоксibenзоата и 4'-цианофенил-4-*n*-деканоксибензоата

Как отмечено в работе [2], характер и расположение атомов в алкильной цепи таковы, что в четных членах гомологического ряда связь С-С добавляется к цепочке преимущественно в направлении длинной молекулярной оси (почти в параллель к ней), тогда как в нечетных гомологах – под некоторым углом к ней. Следует отметить,

что в случае алкилоксидных заместителей наблюдается обратная картина. В нечетных членах гомологического ряда связь С-С добавляется к цепочке преимущественно в направлении длинной молекулярной оси (почти в параллель к ней), тогда как в четных гомологах – под некоторым углом к ней [13].

Квантово-химическое исследование четно-нечетного эффекта в рядах гомологов *n*-*n*-алкилоксибензойных кислот и их пиридиновых эфиров

Четно-нечетный эффект был рассмотрен на примере серии ($n = 3-10$) свободных молекул *n*-кислот и *n*-эфиров. Данные молекулы имеют различные конформации алкилоксидных радикалов, подобные изображенным на рис. 1.

Причем для *n*-кислот выбраны конформеры типа *a*, а для *n*-эфиров конформеры типа *b* (рис. 3).

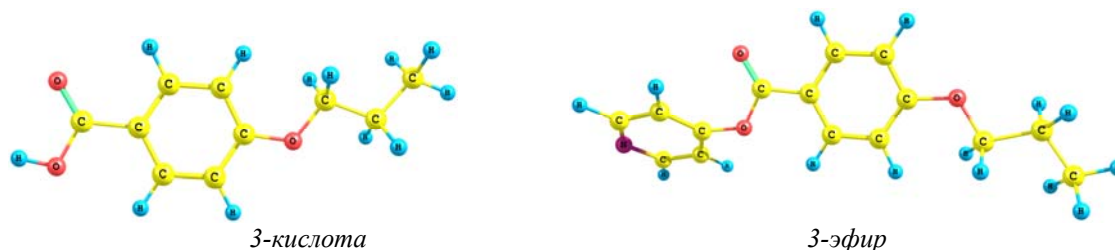


Рис. 3. Строение конформера типа *a* для 3-кислоты и типа *b* для 3-эфира

Проявление четно-нечетного эффекта на геометрических параметрах серий *n*-кислот и *n*-эфиров. Рассматриваемые молекулы имеют стержнеобразную структуру с направлением директора вдоль главной оси *x*. На рис. 4 показана зависимость длины *l* молекул в сериях *n*-кислот и *n*-эфиров от количества атомов углерода *n* в алкилоксидном радикале (в качестве длины молекулы выбрана величина Δx для наиболее удаленных атомов водорода молекулы).

В работе [3] утверждается, что четно-нечетный эффект не наблюдается на зависимости

В качестве молекулярных параметров, которые определяют строение гомологов и их упаковку в кристалле, рассмотрены: геометрические параметры (длина и ширина молекулы, молекулярный объем, вращательные постоянные), электронные характеристики (общая энергия, составляющие дипольного момента, поляризуемость). Кроме того, методом статистической термодинамики с использованием молекулярных постоянных были рассчитаны термодинамические функции газообразных соединений при $T = 298$ К (энтропия, энтальпия, энергия Гиббса).

$l = f(n)$ для серии *n*-алкил-*n'*-цианобифенила. Однако для рассматриваемых гомологов *n*-кислот и *n*-эфиров детальный анализ графика 4 и последующее преобразование графика в зависимость $\Delta l = f(n)$ (график 5, точки которого представляют отклонения от линейной зависимости $l = f(n)$, рассчитанной по МНК-процедуре) наглядно демонстрирует проявление четно-нечетного эффекта (рис. 5). В последующем тексте все зависимости $\Delta \chi = f(n)$, где χ – определенный параметр, получены аналогичным образом.

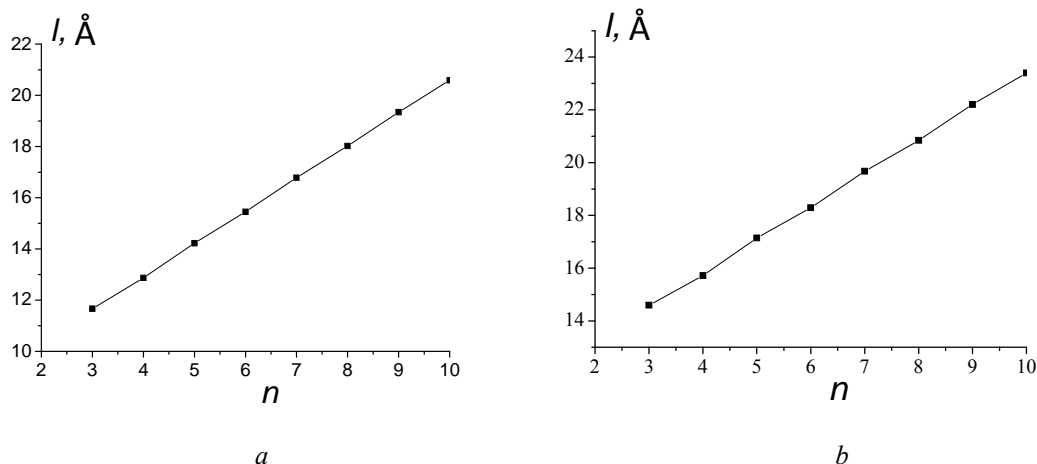


Рис. 4. Зависимость длины молекулы от числа атомов углерода в радикалах для серий *n*-кислот (*a*) и *n*-эфиров (*b*)

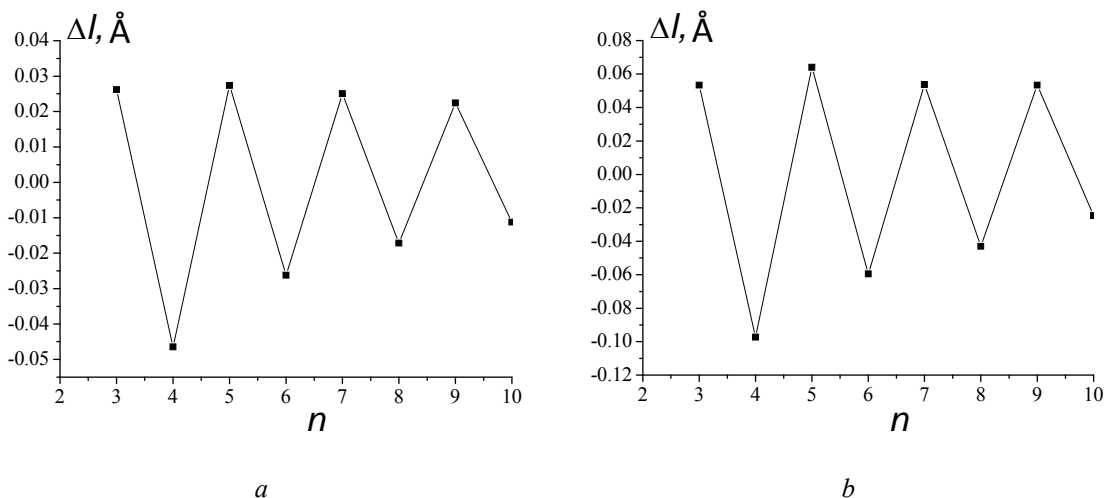


Рис. 5. Зависимость $\Delta l = f(n)$ для серий n -кислот (а) и n -эфиров (б)

Как в серии 4- n -алкил-4'-цианобифенилов с алкил-радикалами [3], так и в сериях n -кислот и n -эфиров с алкилоксидными радикалами четно-нечетный эффект наблюдается на зависимостях ширины $d = f(n)$ (в качестве ширины молекулы выбрана величина Δu для наиболее удаленных по оси y атомов водорода) (рис. 6, а), объема $V = f(n)$, составляющей I_{xx} главного момента инерции и вращательной постоянной B_x (рис. 6, б).

Величина I_{xx} больше у молекул с нечетным n , так как расположение концевых групп $-\text{CH}_3$ относительно оси x в этом случае способствует

увеличению ширины молекулы, в отличие от радикалов с четным n . Вращательная постоянная B_x обратно пропорциональна составляющей момента инерции I_{xx} .

Зависимость $B_x = f(n)$ для рассматриваемых молекул представлена зигзагообразной кривой (рис. 6, б), из которой видно, что при переходе от нечетного гомолога к четному значения вращательной постоянной изменяются меньше, чем при переходе от четного к нечетному, причем эта разница постепенно уменьшается с ростом n .

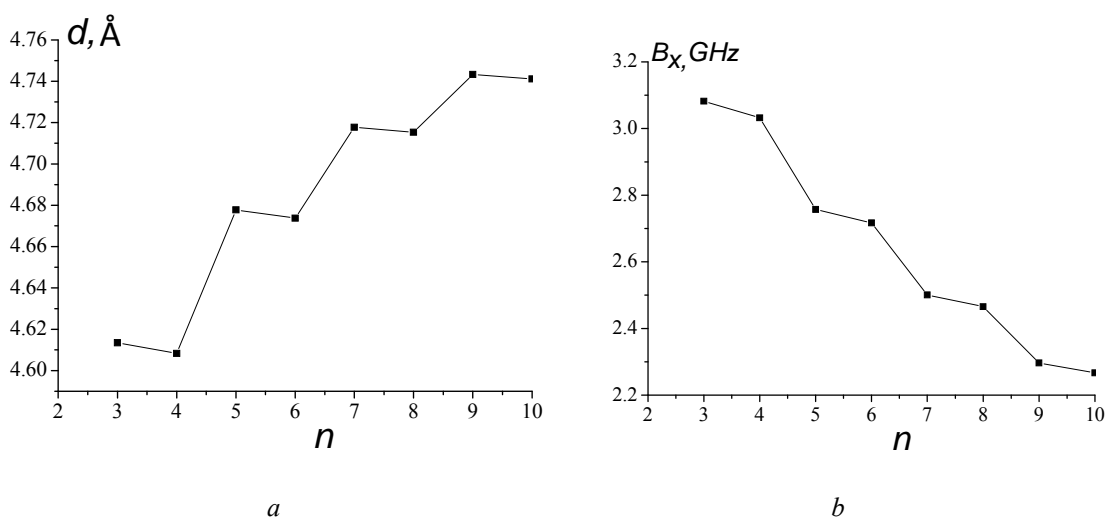


Рис. 6. Зависимости ширины молекулы (а) и вращательной постоянной (б) от числа атомов углерода в радикалах для серии n -кислот

Проявление четно-нечетного эффекта в электронных характеристиках серий *n*-кислот и *n*-эфиров. Общая энергия молекул в рядах *n*-кислот и *n*-эфиров плавно понижается с увеличением числа атомов углерода в алкильном радикале и не отражает четно-нечетного эффекта, (коэффициент корреляции $R = -1$). В то время как энергии граничных орбиталей возрастают с ростом *n* (ВЗМО в серии *n*-кислот: $-6.519, -6.511, -6.507, -6.504, -6.502, -6.501, -6.500, -6.499$ в эВ от $n = 3$ до $n = 10$) и слабо отражают четно-нечетный эффект как в серии *n*-кислот, так и *n*-эфиров.

Четно-нечетный эффект ярко выражен на составляющих дипольного момента μ_x, μ_y для рассматриваемых структур с алкилоксидными радикалами (рис. 7). Причем для *n*-кислот с увеличением числа атомов углерода в радикале составляющие дипольного момента μ_y увеличиваются, а для *n*-эфиров уменьшаются, что связано с разными конформерами *n*-кислот и *n*-эфиров (рис. 3), рассматриваемыми в данной работе. Переход от нечетного к четному гомологу сопровождается меньшим изменением μ_y , чем переход от четного к нечетному (подобно зависимости $B_x = f(n)$, рис. 6, *b*).

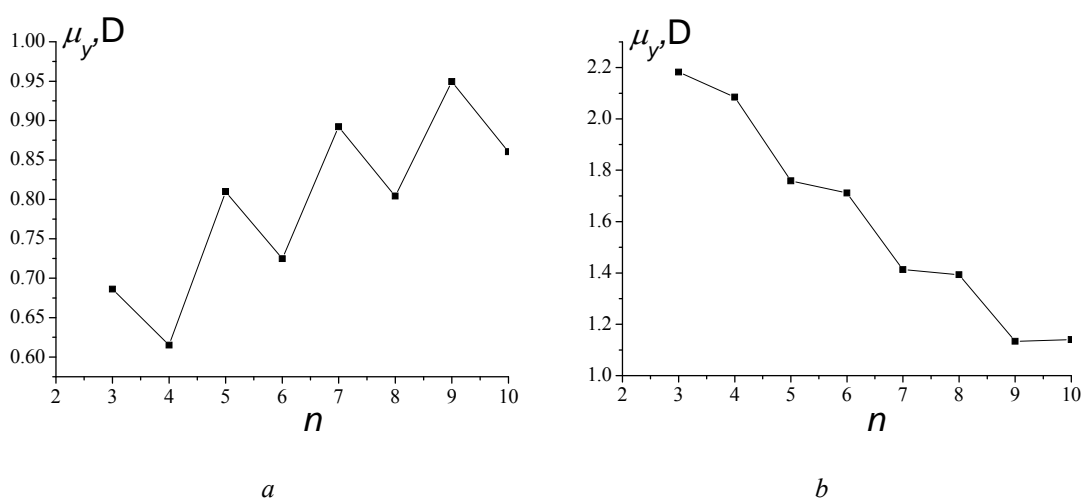


Рис. 7. Зависимость составляющей дипольного момента μ_y молекулы от числа атомов углерода в радикалах для серий *n*-кислот (а) и *n*-эфиров (б)

Зависимость элемента тензора поляризуемости $\alpha_{yy} = f(n)$ также отражает четно-нечетный

эффект для рассматриваемых соединений серий *n*-кислот и *n*-эфиров (рис. 8).

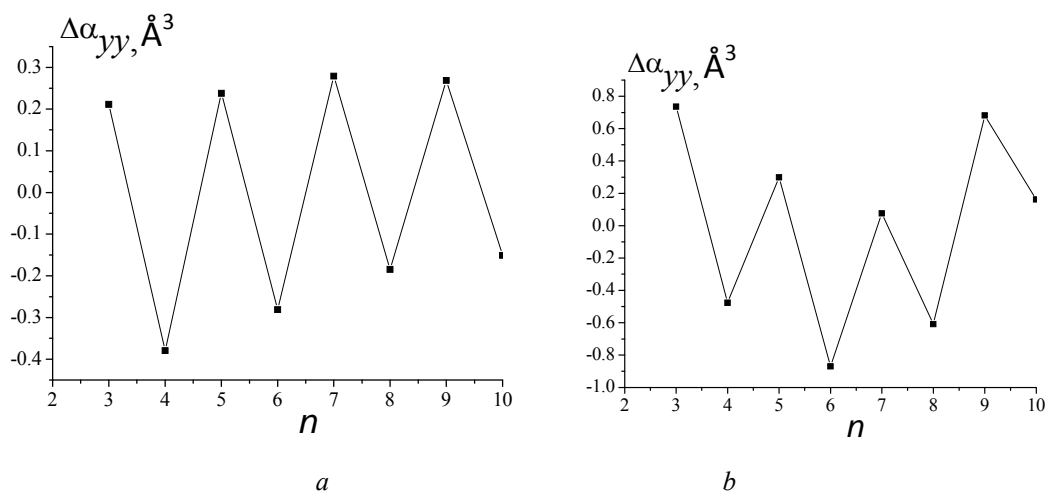


Рис. 8. Зависимость $\Delta\alpha_{yy} = f(n)$ для серий *n*-кислот (а) и *n*-эфиров (б)

Проявление четно-нечетного эффекта в термодинамических функциях серий *n*-кислот и *n*-эфиров. Термодинамические функции серий газообразных *n*-кислот и *n*-эфиров при $T = 298\text{ K}$ (энтропия, энтальпия, энергия Гиббса) были рассчитаны методом статистической термодинамики (в приближении жесткий ротатор – гармонический осциллятор) с использованием вычисленных молекулярных постоянных. Установлено, что слабое проявление четно-нечетного эффекта демонстрирует только величина энтропии (рис. 9).

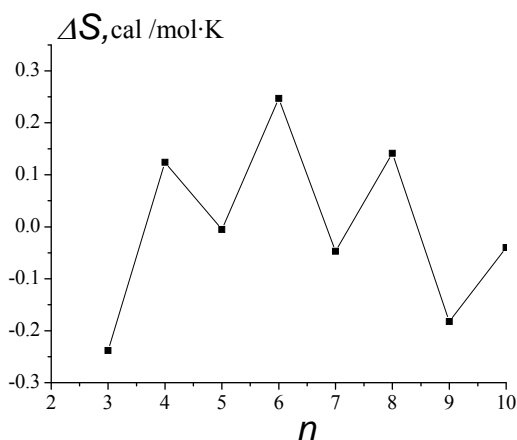


Рис. 9. Зависимость $\Delta S = f(n)$ для серии *n*-кислот

Сравнительный анализ интенсивности проявления четно-нечетного эффекта в различных характеристиках серий *n*-кислот

На рис. 10 приведен график зависимости значений температур нематико-изотропного фазового перехода в ряду гомологов *пара*-*n*-алкилоксибензойных кислот от количества атомов

углерода в цепи терминального заместителя молекул, построенный на основании экспериментальных данных, полученных в работе [16] методом поляризационной термомикроскопии.

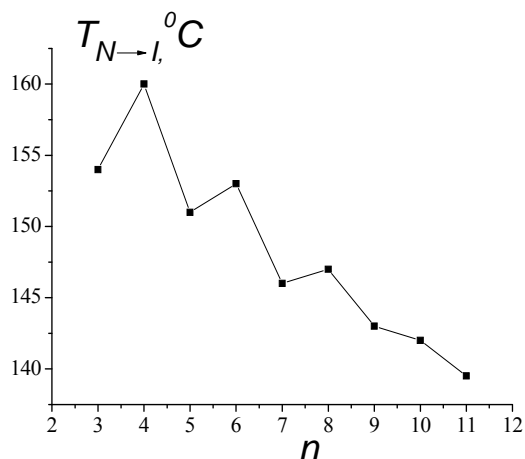


Рис. 10. Зависимость значений температур нематико-изотропного фазового перехода $N \rightarrow I$ от числа атомов углерода в радикалах для серии *n*-кислот

Поскольку максимальное изменение в большинстве рассмотренных выше характеристик χ_n происходит при переходе от четвертого гомолога (χ_4) к пятому (χ_5), то сумма отклонений χ_4 и χ_5 от линейной зависимости $\chi = f(n)$, отнесенная к средней величине характеристик χ_4 и χ_5 , выбрана за эталон сравнения χ . Величина χ , позволяющая оценить масштаб четно-нечетного эффекта при рассмотрении различных свойств в серии рассмотренных *n*-кислот, приведена в таблице наряду с аналогичной величиной для экспериментальных значений температур фазовых переходов $N \rightarrow I$ [16].

Интенсивность проявления четно-нечетного эффекта в различных характеристиках серий *n*-кислот

Характеристика	<i>l</i>	<i>d</i>	B_x	<i>V</i>	<i>E</i>	μ_x	μ_y	α_{yy}	<i>G</i>	<i>H</i>	<i>S</i>	$T_{IC \rightarrow I}$
$\chi, \%$	1,3	1,1	5,2	10,7	0	5,3	22,9	0,3	0	0	0,2	1,8

Выводы

С помощью квантово-химических расчетов на примере гомологов *n*-кислот и *n*-эфиров установлено, что такие молекулярные характеристики, как геометрические параметры (длина, ширина, объем, вращательная постоянная)

и составляющие дипольного момента проявляют четно-нечетный эффект, сравнимый с тем, который наблюдается для температур фазового перехода $N \rightarrow I$, в то время как этот эффект не наблюдается на величинах полной электронной энергии *E* и термодинамических функций *G* и *H* (табл.).

Следовательно, геометрическое строение индивидуальных соединений является одной из весомых причин проявления четно-нечетного эффекта в экспериментальных макрохарактеристиках процессов, протекающих в жидкокристаллических системах.

Работа выполнена при финансовой поддержке Министерства образования и науки РФ (базовая часть, проект № 3474).

Список литературы / References

1. Demus D., Zschke H. Flüssige Kristalle in Tabellen. II. Leipzig: VEB, Deut. Verlag, 1984. 468 p.
2. Яйлоян С. М., Саркисян А. Ц., Бежанова Л. С., Бакдасарян З. В., Варданян К. К., Абрамян Э. Б. Влияние структурных особенностей 4-*n*-алкил-4-цианобифенилов на их теплофизические свойства. // *Журн. структурной химии*. 1999. Т. 40, № 3. С. 500–507. [Yailoyan S.M., Sarkissyan A.Ts., Bagdasarjan Z.V., Vardanian K.K., Abrahamian E. B. Influence of structural features of 4-*n*-alkyl-4-cyanobiphenyls on their thermal properties. *Journal of structural chemistry*. 1999, **40** (3), 500–507 (in Russ.).]
3. Dwivedi M.K., Tiwari S.N. Odd-even effect in *p*-alkyl-*p'*-cyanobiphenyl liquid crystalline series: An ab initio study. *Journal of Molecular Liquids*. 2011, **158**, 208–211. DOI:10.1016/j.molliq.2010.12.001.
4. Сырбу С. А., Дицина О. Ю., Киселев М. Р. Влияние водородной связи на физические свойства системы *n*-*n*-пропилоксибензойная кислота – *n*-*n*-пропилокси-*n'*-цианобифенил // *Жидк. крист. и их практич. использ.* 2016. Т. 16, № 3. С. 30–38. DOI: 10.18083/LCAppl.2016.3.30 [Syrbu S.A., Ditsyna O.Yu., Kiselev M.R. Hydrogen bond influence on physical properties of *p*-*n*-propyloxybenzoic acid – *p*-*n*-propyloxy-*p'*-cyanobiphenyl system. *Zhidk. krist. ikh prakt. ispol'z. = Liq. Cryst. and their Appl.*, 2016, **16** (3), 30–38 (in Russ.).]
5. Безбородов В. С., Лапаник В. И., Михалёнок С. Г., Кузьменок Н. М., Орёл А. С. Синтез и мезоморфные свойства ариловых эфиров *транс*-4-алкил-2-метил(2,6-диметил)циклогексанкарбоновых кислот // *Жидк. крист. и их практич. использ.* 2016. Т. 16, № 2. С. 30–37. [Bezborodov V.S., Lapanik V.I., Mikhalyonok S.G., Kuz'menok N.M., Arol A.S. Synthesis and mesomorphic properties of aryl esters of *trans*-4-alkyl-2-methyl(2,6-dimethyl)cyclohexanecarboxylic acids. *Zhidk. krist. ikh prakt. ispol'z. = Liq. Cryst. and their Appl.*, 2016, **16** (2), 30–37 (in Russ.).]
6. Frisch M.J., Trucks G.W., Schlegel H.B., Scuseria G.E., Robb M.A., Cheeseman J.R., Montgomery Jr. J.A., Vreven T., Kudin K.N., Burant J.C., Millam J.M., Iyengar S.S., Tomasi J., Barone V., Mennucci B., Cossi M., Scalmani G., Rega N., Petersson G.A., Nakatsuji H., Hada M., Ehara M., Toyota K., Fukuda R., Hasegawa J., Ishida M., Nakajima T., Honda Y., Kitao O., Nakai H., Klene M., Li X., Knox J.E., Hratchian H.P., Cross J.B., Adamo C., Jaramillo J., Gomperts R., Stratmann R.E., Yazyev O., Austin A.J., Cammi R., Pomelli C., Ochterski J.W., Ayala P.Y., Morokuma K., Voth G.A., Salvador P., Dannenberg J.J., Zakrzewski V.G., Dapprich S., Daniels A.D., Strain M.C., Farkas O., Malick D.K., Rabuck A.D., Raghavachari K., Foresman J.B., Ortiz J.V., Cui Q., Baboul A.G., Clifford S., Cioslowski J., Stefanov B.B., Liu G., Liashenko A., Piskorz P., Komaromi I., Martin R.L., Fox D.J., Keith T., AllLaham M.A., Peng C.Y., Nanayakkara A., Challacombe M., Gill P.M.W., Johnson B., Chen W., Wong M.W., Gonzalez C. and Pople J.A. *Program package Gaussian 03, Revision B.04*. Gaussian Inc.: Pittsburgh, PA, 2003.
7. Chemcraft Program <http://www.chemcraftprog.com>
8. Cambridge Crystallographic Data Centre (CCDC) : URL : <http://www.ccdc.com.ac.uk>
9. Devarajegowda H.C., Palakshamurthy B.S., Harishkumar H.N., Suchetan P.A., Sreenivasa S. 4-[4-(Heptyloxy)benzoyloxy]phenyl 2-oxo-7-trifluoro-methyl-2H-chromene-3-carboxylate. *J. Acta Cryst. E*. 2013, **69** (8), o1355–o1356. DOI: 10.1107/S1600536813020679.
10. Hasse B.W., Paulus H. Mesogenic 4-Methoxyphenyl 4-Hexyloxybenzoate. *J. Acta Cryst. C*. 1991, **47**, 2005–2006. DOI: 10.1107/S0108270191002731.
11. Bryan R.F., Hartley P., Miller R.W. An X-Ray Study of the *p*-*n*-Alkoxybenzoic Acids. Part VII. Crystal Structures of Related Forms of *p*-*n*-Hexoxy- and *p*-*n*-Octoxy-Benzoic Acids. *Mol. Cryst. Liq. Cryst.* 1980, **62** (3–4), 311–326. DOI: 10.1080/00268948008084028
12. Сырбу С. А. Влияние межмолекулярных взаимодействий на физико-химические свойства жидкокристаллических систем нематического типа: дис. ... д-ра хим. наук. Иваново, 2003. 308 с. [Syrbu S.A. Intermolecular interactions influence on the physical-chemical properties of the nematic type liquid crystalline systems. Doctor thesis (Chem.). Ivanovo, 2003. 308 p. (in Russ.).]
13. Вигдергауз М. С., Петрова Е. И. Эффект альтернирования в закономерностях хроматографического удерживания // *Успехи химии*. 1992. Т. 61, № 12. С. 2172–2186. [Vigdergauz M.S., Petrova E.I. The effect of alternation in chromatographic retention relationships. *Russian Chemical Reviews*. 1992, **61** (12), 1194–1202. DOI: 10.1070/RC1992v061n12ABEH001025].

14. Baumeister U., Hartung H., Gdaniec M., Jaskolski M. Crystal and Molecular Structure of the Nematogenic Compound 4'-Cyanophenyl-4-*n*-Pentoxybenzoate. *Mol. Cryst. Liq. Cryst.* 1981, **69** (1–2), 119–130.
DOI: 10.1080/00268948108072692.
15. Kubo K., Mori A. 4-Cyanophenyl 4-*n*-decanyloxybenzoate. *Acta Cryst. Sect. E.* 2001, **57**, o318–o320.
DOI: 10.1107/S1600536801004081.
16. Demus D., Zschke H. Flüssige kristalle in tabellen. I. Leipzig: VEB, Deut. Verlag, 1974. 356 p.

Поступила в редакцию 6.10.2016 г.
Received 6 October 2016