

УДК 541.4/41+544.25+532.21

О. Б. Акопова, Н. В. Бумбина, Н. В. Жарникова, А. И. Смирнова, Н. В. Усольцева

**ЗВЕЗДООБРАЗНЫЕ СОЕДИНЕНИЯ С ФРАГМЕНТАМИ ОКСАДИАЗОЛА.
I. ВЛИЯНИЕ ВАРИАЦИИ МОЛЕКУЛЯРНОЙ СТРУКТУРЫ ПРОИЗВОДНЫХ
АЗО-ДИФТАЛЕВЫХ КИСЛОТ НА ПРОЯВЛЕНИЕ МЕЗОМОРФИЗМА
ПО ДАННЫМ ПРОГНОЗА**

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

Получены данные по прогнозу колончатого мезоморфизма новых звездообразных производных азо-дифталевых кислот с фрагментами оксадиазола и высокой плотностью периферийного окружения гидрофобными заместителями. Проведен их анализ в сравнении с ранее полученными результатами по влиянию структурных модификаций подобных соединений с меньшим числом углеводородных радикалов и меньшей их разветвленностью. Установлено, что наличие в периферийных фенильных кольцах трех углеводородных радикалов у производных азо-диорто- и азо-диметаталевых кислот с фрагментами оксадиазола ухудшает возможности потенциального проявления колончатого мезоморфизма по сравнению с соединениями с меньшим числом таких заместителей. Показано, что при введении разветвленного изобутильного радикала наблюдается положительный прогноз мезоморфизма, так же как и при наличии радикалов линейного строения.

Ключевые слова: моделирование, прогноз мезоморфизма, дискотические мезогены, звездообразные гетероциклы, многоосновные кислоты, оксадиазолы.

DOI: 10.18083/LCAppl.2019.3.83

О. В. Akopova, N. V. Bumbina, N. V. Zharnikova, A. I. Smirnova, N. V. Usol'tseva

**STAR-SHAPED COMPOUNDS WITH OXADIAZOLE FRAGMENTS.
I. INFLUENCE OF MOLECULAR STRUCTURE VARIATION
OF AZO-DIPHTHALIC ACIDS DERIVATIVES ON THEIR MESOMORPHISM
ACCORDING TO PROGNOSIS DATA**

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

The prognosis data on the columnar mesomorphism manifestation for new star-shaped azo-diphthalic acid derivatives with oxadiazole fragments and hyperbranched peripheral hydrophobic substituents were obtained. The data were analyzed and compared with the previously obtained results on the effect of structural modifications of such compounds with a smaller number of hydrocarbon radicals and lower branching. It was established that the presence of three hydrocarbon radicals in the peripheral phenyl rings in derivatives of azo-diortho- and azo-dimetaphthalic acid with oxadiazole fragments reduces the potential for columnar mesomorphism manifestation in comparison with the compounds having smaller number of such substituents. It was demonstrated that likewise the case of linear structure radicals presence, introducing a branched iso-butyl radical leads to a positive prognosis of mesomorphism.

Key words: modeling, mesomorphism prediction, discotic mesogens, star-shaped heterocycles, polybasic acids, oxadiazoles.

Введение

Все возрастающая необходимость развития нанотехнологий увеличивает спрос на молекулярный дизайн и синтез новых мезогенных молекул с определенным набором свойств. Поиск новых молекулярных объектов, охватывающих как мезоморфные, так и люминесцентные свойства, имеет перспективу их использования в современных нанотехнологиях в качестве претендентов для оптоэлектроники, для различных технологических устройств на основе оптических и электрических свойств, как материалов для разработки инновационных стратегий по увеличению углов обзора, для преодоления ограничений по потере контраста в дисплеях при повышенной температуре и высокой теплоотдаче из-за высокого потребления электроэнергии и т. д. [1]. Имеются сообщения и о звездообразных гетероциклических мезогенах на основе многоосновных кислот, содержащих в своей структуре азо-группы, которые позволяют управлять надмолекулярной структурой с помощью светового потока. Соединения подобной структуры подвержены фотоориентации [2–5].

Среди различных классов гетероциклических соединений оксадиазолы заслуживают особого внимания поскольку обладают рядом уникальных свойств. Они интересны как фоточувствительные материалы для солнечных батарей, как наноструктурируемые материалы для электрооптических приложений, могут использоваться как хемо- и биосенсоры [6–8]. Они могут проявлять жидкокристаллические свойства с хорошими электролюминесцентными и электронотранспортными характеристиками, которые востребованы в светодиодной технике [9, 10]. Включение фрагментов 1,3,4-оксадиазола в звездообразные мезогены позволяет создавать наноматериалы, которые имеют преимущества перед другими звездообразными гетероциклическими соединениями. Оксадиазолы обладают высокой термической и гидролитической стабильностью, устойчивостью к окислительной деструкции, фотолюминесцентными свойствами (преимущественно в синей области спектра) с высокими квантовыми выходами, хорошими электроноакцепторными характеристиками и т. д. [11–14].

Основная проблема заключается в сложности синтеза таких соединений, большом объеме синтетических работ, отсутствии экологических методик синтеза сложных молекул. Решение этих проблем требует развития теоретических подходов к молеку-

лярному дизайну и синтезу мезогенных соединений с заданным типом мезоморфизма. Это находит отражение в многочисленных работах по развитию теоретических подходов к предсказательному описанию жидкокристаллического состояния вещества. Анализ таких работ представлен в публикации [15]. Одно из направлений связано с прогнозом мезоморфизма у дискотических соединений по их молекулярным параметрам, которое опирается только на строение единичных молекул [16, 17]. Имеется ряд преимуществ при использовании данного метода: он требует небольших затрат машинного времени при относительно высокой прогностической способности (от 70 до 90 % и выше) и прост в использовании. С помощью этого метода можно проводить поиск новых дискотических мезогенов с различными типами мезоморфизма. В дальнейшем этот метод был адаптирован нами к звездообразным соединениям [18–20] и показал высокие прогностические характеристики в приложении к звездообразным соединениям [21–23]. Применение данного метода к поиску новых звездообразных мезогенов с фрагментами оксадиазола нашло отражение в работах [21–25].

В обзоре [26] обобщены результаты исследований указанным методом по прогнозу мезоморфизма, присущего ДМ, у новых звездообразных соединений разнообразного строения с фрагментами оксадиазола (рис. 1). В нем рассмотрен аспект изучения взаимосвязи молекулярного строения 324 новых звездообразных производных многоосновных кислот (этилендиаминтетрауксусной, азодиорто- и азодиизофталевой, циануровой, галловой) с фрагментами оксадиазола и азо-группами, чувствительными к световым воздействиям) с проявлением колончатого мезоморфизма, исходя из данных прогноза, опираясь при этом только на строение единичных молекул. Установлено, что 141 соединение способно по прогнозу формировать *Col*-мезофазы (I–III, V, VIb, IX); выявлена 41 структура с потенциальной возможностью проявления латентного мезоморфизма; наиболее склонными к проявлению мезоморфизма, характерного для ДМ, оказались соединения серий I и III; у низших гомологов серии V ($n \leq 9$) можно ожидать формирование мезоморфизма, характерного для каламитных мезогенов, в то время как у гомологов с $n \geq 10$ имеется возможность образования мезофаз, присущих дискотическим мезогенам; соединения серий IV, VIa, c и VII не способны по данным прогноза к проявлению мезоморфизма колончатого типа (табл. 1).

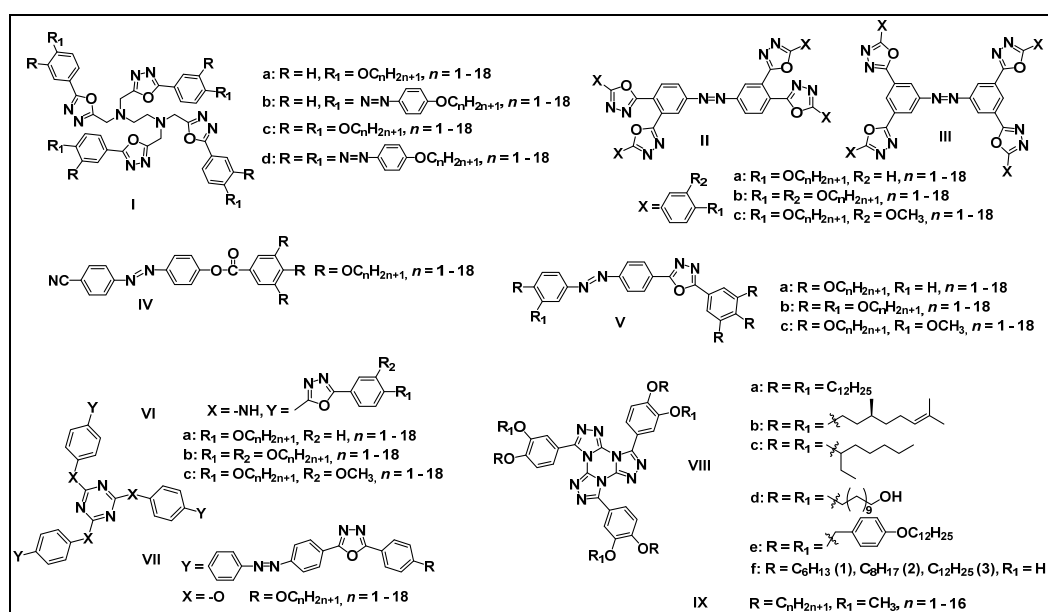


Рис. 1. Молекулярные структуры звездообразных производных многоосновных кислот с фрагментами оксадиазола и азо-группами: этилендиаминтетрауксусной – I, азо-диорто – II и азо-диметафталевой – III, галловой – IV, V, циануровой – VI, VII и трипс-триазолотриазина – VIII, IX, прогноз мезоморфизма которых приведен в [26]

Fig. 1. Molecular structures of star-shaped polybasic acid derivatives with oxadiazole fragments and azo-groups: ethylenediamine tetraacetic acid – I, azo-diortho – II and azo-dimeta phthalic acid – III, gallic – IV, V, cyanuric – VI, VII, and tristriazolotriazine – VIII, IX. Mesomorphism prognosis for these compounds is given in [26]

Таблица 1. Результаты прогноза мезоморфизма, характерного для ДМ, для производных многоосновных кислот с оксадиазольными фрагментами и их аналогов [26]

Table 1. Mesomorphism prognosis results for derivatives of polybasic acids with oxadiazole fragments and their analogues [26]

n	I				II			III			V			VI		
	a	b	c	d	a	b	c	a	b	c	a	b	c	a	b	c
1	2	3	4	5	6	7	8	9	10	11	12	13	14	15	16	17
1	–	+	+	+	–	–	–	–	–	–	–	–	–	–	–	–
2	+	+	+	+	–	–	–	–	+	+	–	–	–	–	–	–
3	+	+	+	+	±	±	±	±	+	+	–	–	–	–	–	–
4	+	+	+	+	+	+	+	+	+	+	–	–	–	–	±	–
5	+	+	+	+	+	+	+	+	+	+	–	–	–	–	+	–
6	+	+	+	+	+	+	+	+	+	+	–	–	–	–	+	–
7	+	+	+	+	+	+	+	+	+	+	–	–	–	–	+	±
8	+	±	+	+	+	+	+	+	+	+	–	–	–	–	+	±
9	+	±	+	+	+	+	+	+	+	+	–	±	±	–	+	±
10	+	±	+	±	+	+	+	+	+	+	±	+	+	–	+	–
11	+	–	+	–	+	+	+	+	+	+	+	+	+	–	+	–
12	+	–	+	–	±	+	+	+	+	+	+	+	+	–	+	–
13	+	–	+	–	±	±	±	+	+	+	+	+	+	–	+	–
14	+	–	+	–	±	±	±	+	+	+	+	+	+	–	+	–
15	±	–	±	–	±	–	–	±	+	+	+	+	±	–	±	–
16	±	–	±	–	–	–	–	–	+	±	±	+	±	–	–	–
17	–	–	±	–	–	–	–	–	±	±	–	+	–	–	–	–
18	–	–	–	–	–	–	–	–	–	–	–	+	–	–	–	–

Примечание: «+» – положительный; «–» – отрицательный; «±» – равновероятный прогнозы. Для всех соединений серий IV и VII прогноз отрицательный

Целью настоящего исследования является выявление из данных прогноза влияния на проявление мезоморфизма, присущего ДМ, дальнейшего увеличения числа периферийных заместителей, а

также изменения полноты заполнения ими пространственного объема вокруг центральных фрагментов (рис. 2).

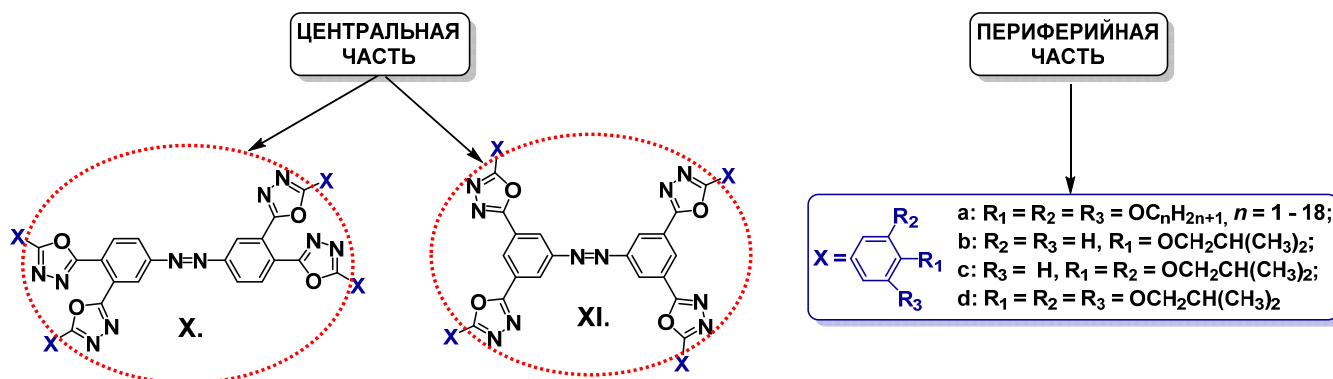


Рис. 2. Новые звездообразные соединения с фрагментами оксадиазола, сконструированные нами, для изучения влияния структурных изменений молекул подобного типа на проявление мезоморфизма, присущего ДМ и алгоритм выделения центральной и периферийной части молекулы (пунктирная линия)

Fig. 2. New star-shaped compounds with oxadiazole fragments that were constructed to study the effect of structural changes on the mesomorphism manifestation inherent for DM.

The algorithms for the central and peripheral parts assignment (dashed line)

Экспериментальная часть

Использованные методы

Для решения поставленной задачи применяется метод прогноза мезоморфизма у дискотических соединений по их молекулярным параметрам с использованием программы *СМР «ChemCard»*, адаптированный к звездообразным соединениям. Суть метода заключается в построении молекулярных моделей соединений **X**, **XI**, их оптимизации в пакете программ *HyperChem*, расчете и анализе *МР* путем сравнения их расчетных значений с классификационным рядом {1} в программе *СМРChemCard* [17].

Классификационный ряд {1}: $K = 2,0-8,5$; $K_c = 1,0-2,6$; $K_p = 0,2-0,7$; $K_s = 0,25-1,0$; $M_m = 0,2-0,8$; $M_r = 0,15-0,8$; $K_{ar} = 0,08-0,3$, где параметр K характеризует анизотрию молекулы в целом, а параметры K_c и K_p – центра и периферии, соответственно. Параметр K_s показывает степень замещенности центрального фрагмента периферийными заместителями. Параметр M_m учитывает соотношение масс центральной и периферийной частей. Параметр M_r учитывает степень окружения центрального ядра молекулы-дискогена перифе-

рийными заместителями. Параметр K_{ar} учитывает плотность упаковки периферийных заместителей вокруг центрального фрагмента. Отклонение хотя бы одного из этих параметров от предельных значений классификационного ряда {1} свидетельствует о неспособности сконструированного соединения к формированию колончатых или нематических мезофаз, характерных для ДМ. Достоверность прогноза по нашему методу, адаптированному к звездообразным дискотическим соединениям, обычно достигает величины $\geq 70\%$, а с учетом скрытых мезофаз доходит до 80–95 %. Более подробное описание метода и расчетные формулы *МР* можно найти в работах [16, 19, 25, 27].

Для изучения влияния молекулярного строения на проявление колончатого мезоморфизма из результатов прогноза и сравнения с ранее полученными данными по звездообразным соединениям **I–VIII** (рис. 1) [26] были выбраны и модифицированы производные азо-диорто- (**II**) и азо-диметафталевых (**III**) кислот. Модификация была проведена путем введения в периферию молекулы дополнительно еще четырех гидрофобных заместителей или замены углеводородных радикалов линейного строения на разветвленные фрагменты.

Из новой серии соединений **X**, **XI** (рис. 2) было построено и оптимизировано 42 модели. При расчете *MP* модели строились в устойчивой *транс*-конформации углеводородных радикалов с учетом их чередования над и под плоскостью центрального фрагмента молекулы. Оптимизация моделей проводилась методом молекулярной механики MM+ в программе *HyperChem* (рис. 3). Из оптимизированных молекулярных моделей извлекались их геометрические характеристики, кото-

рые далее использовались для расчета *MP* и прогноза мезоморфизма в программе *CMP «ChemCard»* (рис. 4). Расчеты *MP* проведены по определенному алгоритму, когда в центральную часть молекулы включены фрагменты оксадиазола (рис. 2). На рис. 2 представлены структурные формулы новой серии звездообразных соединений **X**, **XI** и алгоритмы их деления на центральную и периферийную части, с учетом которых проводились расчеты *MP* и дальнейший анализ прогноза мезоморфизма.

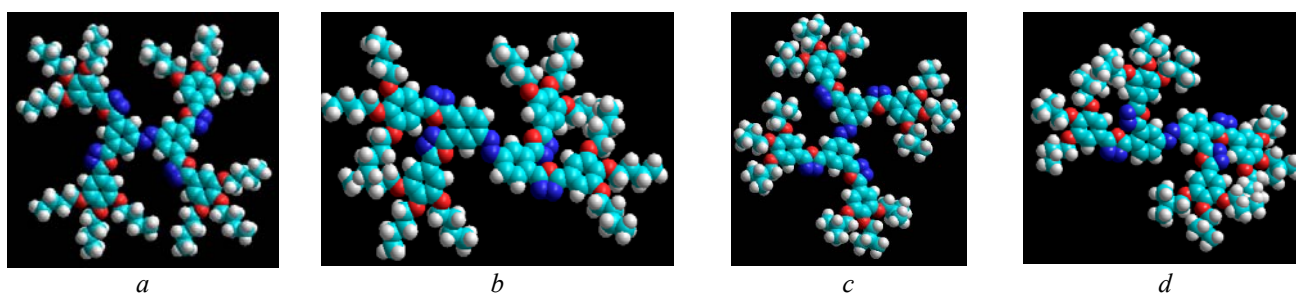


Рис. 3. Примеры оптимизированных в одной из устойчивых конформаций моделей молекул соединений **X**, **XIa**, $n = 4$ (a, b); **X**, **XIc** (c, d)

Fig. 3. Examples of optimized models shown in one of the stable conformations for compounds **X**, **XIa**, $n = 4$ (a, b); **X**, **XIc** (c, d)

Предварительный просмотр

H:\Статьи\Акопова_Жидкие кристаллы\CRD-Изобутил(3)-азодифтал.1.crd Мезоморфизм: Да

Библиография:
ГИП

Название соединения 1,2,1',2'-тетра[(3,4,5-трис-изобутилокси)фенил-2-(1,3,4-оксадиазол)-4,4'-азо-дифталевая кислота

Краткое обозначение изобутил-1,2(3)-hin

Брутто формула C92H122N10O16

Брутто формула ядра	C20H6N10O4	Mc	450.3262
Брутто периферии	C72H116O12	Mp	1173.6842
Длина центра - Ic	13.62	Mm	0.3837
Ширина центра - bc	5.46	Mr	0.3837
Длина периферии - lp	10.15	Ks	1.0000
Толщина молекулы - s	11.57	Kc	2.4945
Lm	34.56	Kp	0.6709
N	4	K	2.9870
Nmax	4	Kar	0.2639
N(pi+n)c		Ke	
N(pi+n)p			

Xc: $R_1 = R_2 = R_3 = \text{OCH}_2\text{CH}(\text{CH}_3)_2$

Рис. 4. Пример расчета *MP* в программе *CMP «ChemCard»* и результаты прогноза мезоморфизма **Xc**
Fig. 4. Calculation example of *MP* in the *CMP «ChemCard»* program and mesomorphism prognosis results for **Xc**

Результаты и их обсуждение

В таблицах 2–4 приведены данные по молекулярным параметрам и прогнозу мезоморфизма у

новых, сконструированных нами, производных азо-диорто- (X) и азо-диметафталевых кислот (XI) с фрагментами оксадиазола.

Таблица 2. Данные по *MP* и прогнозу мезоморфизма производных азо-диортофталевой кислоты (Xa)

Table 2. *MPs* and mesomorphism prognosis data for azo-diortophthalic acid derivatives (Xa)

<i>n</i> гомолога	<i>E_{опт}</i> Ккал/моль	Значения молекулярных параметров				<i>P</i>
		<i>M_m</i>	<i>K</i>	<i>K_p</i>	<i>K_{ar}</i>	
1	134,12	0,67	3,96	0,90'	0,180	—
2	132,56	0,54	3,64	0,77*	0,204	±
3	140,04	0,45	3,56	0,67	0,216	+
4	149,22	0,38	3,29	0,60	0,223	+
5	157,63	0,34	3,21	0,54	0,224	+
6	166,35	0,30	3,12	0,49	0,224	+
7	177,68	0,27	2,88	0,45	0,221	+
8	187,59	0,24	2,84	0,42	0,218	+
9	198,04	0,22	2,74	0,39	0,214	+
10	208,68	0,21	2,71	0,36	0,210	+
11	219,22	0,19*	2,63	0,34	0,206	±
12	230,07	0,18*	2,61	0,32	0,202	±
13	240,72	0,17'	2,56	0,30	0,198	—
14	251,46	0,16'	2,54	0,29	0,193	—
15	262,13	0,15'	2,52	0,27	0,184	—
16	272,84	0,14'	2,49	0,25	0,180	—
17	283,60	0,13'	2,47	0,25	0,181	—
18	294,33	0,13'	2,45	0,24	0,177	—

Примечание: *E_{опт}* – энергия оптимизации, *M_m* = *M_r*, *K_s* = 1,00; *K_c* = 2,50–2,53; *P* – прогноз мезоморфизма, характерный для ДМ; штрихом отмечены значения *MP*, выходящие за границы классификационного ряда, звездочкой отмечены значения *MP*, близкие к граничным значениям классификационного ряда {1}

Таблица 3. Данные по *MP* и прогнозу мезоморфизма производных азо-диметафталевой кислоты (XIa)

Table 3. *MPs* and mesomorphism prognosis data for azo-dimetaphthalic acid derivatives (XIa)

<i>n</i> гомолога	<i>E_{опт}</i>	Значения молекулярных параметров				<i>P</i>
		<i>M_m</i>	<i>K</i>	<i>K_p</i>	<i>K_{ar}</i>	
1	125,18	0,67	3,79	0,76'	0,199	—
2	124,43	0,54	3,70	0,66	0,224	+
3	133,99	0,45	3,26	0,57	0,236	+
4	143,84	0,38	3,20	0,51	0,242	+
5	153,80	0,34	3,01	0,46	0,243	+
6	163,65	0,30	2,97	0,42	0,243	+
7	175,00	0,27	2,75	0,38	0,239	+
8	184,72	0,24	2,75	0,35	0,235	+
9	194,77	0,22	2,58	0,33	0,230	+
10	204,90	0,21	2,59	0,31	0,226	+
11	215,91	0,19*	2,45	0,29	0,220	±
12	226,53	0,18*	2,46	0,27	0,216	±
13	237,24	0,17'	2,35	0,25	0,210	—
14	248,29	0,16'	2,37	0,24	0,205	—
15	259,07	0,15'	2,27	0,23	0,200	—
16	269,86	0,14'	2,29	0,22	0,195	—
17	280,66	0,13'	2,21	0,21	0,191	—
18	291,37	0,13'	2,23	0,20	0,186	—

Примечание: *M_m* = *M_r*, *K_s* = 1,00; *K_c* = 1,38. Расшифровку остальных обозначений смотри в примечании к табл. 1.

Таблица 4. Данные по *MP* и прогнозу мезоморфизма производных азо-диорто- (Xb-d) и азо-димета- (XIb-d) фталевых кислотTable 4. *MPs* and mesomorphism prognosis data for azo-diortho- (Xb-d) and azo-dimetaphthalic acids derivatives (XIb-d)

n гомолога	E_{opt}	Значения молекулярных параметров				P
		M_m	K	K_p	K_{ar}	
	для X					
b	115,39	0,75	3,87	0,669	0,127	+
c	137,14	0,51	3,24	0,668	0,196	+
d	155,87	0,38	2,99	0,671	0,264	+
	для XI					
b	106,19	0,75	3,85	0,572	0,139	+
c	127,72	0,51	3,57	0,573	0,215	+
d	150.60	0.38	3.42	0.570	0.289	+

Примечание: $M_m = M_r$, $K_s = 1,00$; $K_c = 2,49$ для **Xb-d**; $M_m = M_r$, $K_s = 1,00$; $K_c = 1,37$ для **XIb**

Полученные данные по прогнозу мезоморфизма у производных азо-диорто- (**X**) и азо-диметафталевых кислот (**XI**) с фрагментами оксадиазола показывают, что введение по периферии молекулы дополнительно четырех углеводородных радикалов (12 периферийных заместителей) приводит к уменьшению числа гомологов с потенциальным проявлением колончатого мезоморфизма по сравнению с восемью замещенными структурами **IIb** и **IIIb** (см. табл. 1 (колонки 4, 7) и табл. 2), но возможность проявления мезоморфизма начинается с более короткого члена ($n = 2$) гомологического ряда у производных орто-изомерных кислот **Xa** и остается неизменной у мета-производных – **XIa**. Разветвление периферии у **IIa-b** и **IIIa-b** при введении изобутильного радикала не вносит изменений в результаты прогноза такого типа мезоморфизма (сравни данные табл. 1, строка 4, столбцы 6, 7, 9, 10 с данными табл. 4). Таким образом, для повышения плотности периферийного окружения гидрофобными заместителями при модификации звездообразных соединений на основе азо-диорто- (**X**) и азо-диметафталевых кислот (**XI**) с фрагментами оксадиазола можно использовать разветвленные углеводородные радикалы типа третичного изобутильного фрагмента.

Выводы

Выполнено моделирование с помощью программы *HyperChem*, рассчитаны и проанализированы *MP*, получены данные прогноза с применением программного продукта *CMP «ChemCard»* для 42 соединений двух новых, сконструированных нами серий звездообразных соединений –

производных дифталевых кислот с фрагментами оксадиазола, из которых одна серия состоит из 18 структур с максимальным числом гидрофобных заместителей и трех структур с изобутильным фрагментом, а другая – аналогичная, но периферийные фрагменты прикреплены к центру в мета-положениях в отличие от орто- в первой серии.

Установлено, что наличие в периферийных фенильных кольцах трех углеводородных радикалов у производных азо-диорто- (**X**) и азо-диметафталевых кислот (**XI**) с фрагментами оксадиазола ухудшает возможности потенциального проявления колончатого мезоморфизма по сравнению с соединениями с меньшим числом таких заместителей.

Показано, что при введении разветвленного изобутильного радикала наблюдается положительный прогноз мезоморфизма, так же как и при наличии радикалов линейного строения.

Работа поддержана грантом Министерства образования и науки РФ №16.1037.2017/4.6.

Список литературы / References

- Devadiga D., Ahipa T.N. Recent synthetic advances in pyridine-based thermotropic mesogens. *RSC Advances*, 2019, **9** (40), 23161–23228.
DOI: 10.1039/c9ra04389f.
- Devi S., Bala I., Gupta S.P., Kumar P., Pal S.K., Venkataramani S. Reversibly photo switchable alkoxy azo-benzenes connected benzenetricarboxamide discotic liquid crystals with perpetual long range columnar assembly. *Org. Biomol. Chem.*, 2019, **17**, 1947–1954.
DOI: 10.1039/c8ob01579a.

3. Gupta M., Gupta S.P., Mohapatra S.S., Dhara S., Pal S.K. Room-Temperature Oligomeric Discotic Nematic Liquid Crystals over a Wide Temperature Range: Structure-Property Relationships. *Chem. Eur. J.*, 2017, **23** (44), 10626–10631. DOI: 10.1002/chem.201701578.
4. Gupta M., Gupta S.P., Pal S.K. TNF Induced Switching of Columnar Rectangular to Hexagonal Assemblies in a New Class of Triphenylene-Based Room Temperature Discotic Liquid Crystals. *J. Phys. Chem. B*, 2017, **121** (36), 8593–8602. DOI: 10.1021/acs.jpcc.7b06737.
5. Gupta M., Pal V., Pal S.K. Photo-responsive liquid crystals derived from azobenzene centered cholesterol-tetramers. *New J. Chem.*, 2018, **42** (11), 8765–8772. DOI: 10.1039/c7nj05142e.
6. Свидетельство о гос. регистрации базы данных № 2017620388. Звездобразные дискотические соединения / Усольцева Н. В., Аكوпова О. Б., Жарникова Н. В., Смирнова А. И., Бумбина Н. В., Ковалева М. И.; Заявка № 2016621622, поступ. 7 декабря 2016 г.; Государственная регистрация в Реестре базы данных 6 апреля 2017 г.; правообладатель – Ивановский государственный университет. [Certificate of state registration of database № 2017620388. Star-shaped discotic compounds / Usolt'seva N.V., Akopova O.B., Zharnikova N.V., Smirnova A.I., Bumbina N.V., Kovaleva M.I.; Zayavka № 2016621622, postup. 7 dekabrya 2016; Gos. Registratsiya v Reestre bazy dannykh 6 aprelya 2017; pravoobladatel' – Ivanovo State University (in Russ.)].
7. Setia S., Sidiq S., De J., Pani I., Pal S.K. Applications of liquid crystals in biosensing and organic light-emitting devices: future aspects. *Liq. Cryst.*, 2016, **43** (13–15), 2009–2050. DOI: 10.1080/02678292.2016.1213002.
8. Paraschivescu C.C., Paun A., Matache M.A. Journey through the oxadiazole-based compounds: from synthesis to applications. *Targets in heterocyclic systems. Chemistry and Properties*, 2016, **20** (7), 174–196. DOI: 10.17374/targets.2017.20.174.
9. Han J. 1,3,4-Oxadiazole based Liquid Crystals. *J. Mater. Chem. C*, 2013, **1**, 7779–7797. DOI: 10.1039/C3TC31458H.
10. Girotto E., Eccher J., Vieira A.A., Bechtold I.H., Gallardo H. Luminescent columnar liquid crystals based on 1,3,4-oxadiazole. *Tetrahedron*, 2014, **70** (20), 3355–3360. DOI: 10.1016/j.tet.2013.09.079.
11. Yelamagad C.V., Achalkumar A.S., Rao D.S.S., Prasad S.K. Luminescent, Liquid Crystalline Tris(N-salicylideneaniline)s: Synthesis and characterization. *J. Org. Chem.*, 2009, **74** (8), 3168–3171. DOI: 10.1021/jo9001933.
12. Zhang Y.-D., Jespersen K.G., Kempe M., Kornfield J.A., Barlow S., Kippelen B., Marder S.R. Columnar Discotic Liquid-Crystalline Oxadiazoles as Electron-Transport Materials. *Langmuir*, 2003, **19** (16), 6534–6536. DOI: 10.1021/la0341456.
13. Wang Y., Shi J., Chen J., Zhu W., Baranoff E. Recent progress in luminescent liquid crystal materials: design, properties and application for linearly polarized emission. *J. Mater. Chem. C*, 2015, **3** (31), 7993–8005. DOI: 10.1039/c5tc01565k.
14. De J., Gupta S.P., Swayamprabha S.S., Dubey D.K., Bala I., Sarkar I., Dey G., Jou J.-H., Ghosh S., Pal S.K. Blue Luminescent OLED Devices of a New Class of Star-Shaped Columnar Mesogens Exhibiting π - π Driven Supergelation. *J. Phys. Chem. C*, 2018, **122** (41), 23659–23674. DOI: 10.1021/acs.jpcc.8b05811.
15. Аكوпова О. Б., Ковалева М. И. Молекулярный дизайн и синтез звездобразных дискотических мезогенов гетероциклической природы // *Жидк. крист. их практич. использ.* 2014. Т. 14, № 2. С. 21–57. [Akopova O.B., Kovaleva M.I. Molecular design and synthesis of star-shaped discotic mesogens of heterocyclic nature. *Liq. Cryst. and their Appl.*, 2014, **14** (2), 21–57 (in Russ.)].
16. Усольцева Н. В., Аكوпова О. Б., Быкова В. В., Смирнова А. И., Пикин С. А. Жидкие кристаллы: дискотические мезогены. Иваново : Иван. гос. ун-т, 2004. 546 с. [Usolt'seva N.V., Akopova O.B., Bykova V.V., Smirnova A.I., Pikin S.A. Liquid crystals: discotic mesogens. Ivanovo : Ivan. gos. un-t, 2004. 546 p. (in Russ.)].
17. Свидетельство о гос. регистрации программы для ЭВМ № 2012610165. CMP ChemCard / Аكوпова О. Б., Аков Д. А.; Заявка № 2011616958. Дата поступления 19 сентября 2011 г. Зарегистрировано в Реестре программ для ЭВМ 10 января 2012 г. [Certificate of State. registration of computer program № 2012610165. CMP ChemCard / Akopova O.B., Akopov D.A.; request № 2011616958. The date of receipt is September 19, 2011. It is registered in the Register of Computer Programs on January 10, 2012. (in Russ.)].
18. Ковалева М. И., Аكوпова О. Б. Звездобразные дискотические мезогены // *Материалы VII студ. Междунар. заочн. научн.-практ. конф. «Научное сообщество студентов XXI столетия»: Технические науки*. Новосибирск, 2013. С. 222–233. [Kovaleva M.I., Akopova O.B. Star-shaped discotic mesogens. *Proceedings of VII International virtual scientific-practical conference “Scientific community of the XXI century students”. Technical Sciences*. Novosibirsk, 2013, 222–233 (in Russ.)]. <http://www.sibac.info/>
19. Ковалева М. И., Аكوпова О. Б. Применение молекулярных параметров в прогнозировании мезоморфизма гетероциклических звездобразных дискотических соединений // *Жидк. крист. и их практич. использ.* 2015. Т. 15, № 2. С. 94–101. [Kovaleva M.I., Akopova O.B. Application of molecular pa-

- rameters in forecasting of mesomorphism of heterocyclic starshaped discotic compounds. *Liq. Cryst. and their Appl.*, 2015, **15** (2), 94–101 (in Russ.)).
20. Ковалева М. И. Поиск информативных молекулярных параметров для прогноза мезоморфизма у звездообразных гетероциклических дискотических соединений // *Вестн. молодых ученых ИвГУ*. 2015. Вып. 15. С. 5–8. [Kovaleva M.I. Search for informative molecular parameters for prediction of mesomorphism in star-shaped heterocyclic discotic compounds. *Vestn. young scientist. IvGU*, 2015, 15, 5–8 (in Russ.)].
21. Акопова О. Б., Ковалева М. И., Усольцева Н. В., Капралова Т. С., Онучак Л. А. Использование молекулярных параметров в прогнозировании мезоморфизма звездообразных дискотических производных трифенилена // *Жидк. крист. и их практич. использ.* 2016. Т. 16, № 4. С. 91–98. [Akopova O.B., Kovaleva M.I., Usol'tseva N.V., Kapralova T.S., Onuchak L.A. Using molecular parameters in forecasting the mesomorphism of star-shaped discotic triphenylene derivatives. *Liq. Cryst. and their Appl.*, 2016, **16** (4), 91–98 (in Russ.). DOI: 10.18083/LCAppl.2016.4.91].
22. Usol'tseva N.V., Akopova O.B., Smirnova A.I., Kovaleva M.I., Bumbina N.V., Zharnikova N.V. Star-shaped discotic compounds with aryltetrazole and oxadiazole fragments. *Phase Transitions*, 2017, **90** (8), 800–807. DOI: 10.1080/01411594.2017.1309405.
23. Акопова О. Б., Бумбина Н. В., Жарникова Н. В., Смирнова А. И., Усольцева Н. В. Моделирование звездообразных производных тристриазолотриазина и прогноз их колончатого мезоморфизма // *Жидк. крист. и их практич. использ.* 2019. Т. 19, № 1. С. 33–41. [Akopova O.B., Bumbina N.V., Zharnikova N.V., Smirnova A.I., Usol'tseva N.V. Modeling of known and new star-shaped derivatives of tris-triazolotriazine and prediction of their columnar mesomorphism. *Liq. Cryst. and their Appl.*, 2019, **19** (1), 33–41 (in Russ.). DOI: 10.18083/LCAppl.2019.1.33].
24. Акопова О. Б., Ковалева М. И., Бумбина Н. В., Жарникова Н. В., Смирнова А. И., Казак А. В., Усольцева Н. В., Капралова Т. С., Онучак Л. А. Звездообразные наноматериалы на основе многоосновных кислот с гетероциклическими хиральными фрагментами. Конструирование, моделирование и прогноз мезоморфизма // *Материалы 26-й Междунар. Крымск. конф. «СВЧ-техника и телекоммуникационные технологии» (КрыМиКо'2016)*, 4–10 сентября 2016. Севастополь, 2016. Т. 7. С. 1619–1625. [Akopova O.B., Kovaleva M.I., Bumbina N.V., Zharnikova N.V., Smirnova A.I., Kazak A.V., Usol'tseva N.V., Kapralova T.S., Onuchak L.A. Star-shaped nanomaterials based on polybasic acids with heterocyclic and chiral fragments. Design, modeling and mesomorphism prediction. *Proceeding of the 26th International Conference "Microwave & Telecommunication Technology"* (CrimCo'2016). Sevastopol, September 4–10, 2016, **7**, 1619–1625 (in Russ.)].
25. Акопова О. Б., Жарникова Н. В., Бумбина Н. В., Смирнова А. И., Усольцева Н. В. Прогноз, синтез и самоорганизация гетероциклических звездообразных дискотических соединений // *Органические и гибридные наноматериалы: получение и перспективы применения: монография* / под ред. В. Ф. Разумова и М. В. Ключева. Иваново : Иван. гос. ун-т, 2017. Гл. 9. С. 259–322. [Akopova O.B., Zharnikova N.V., Bumbina N.V., Smirnova A.I., Usol'tseva N.V. Prediction, synthesis and self-organization of heterocyclic star-shaped discotic compounds. *Organic and hybrid nanomaterials: production (creature) and application prospects: monograph* / ed. V.F. Razumova and M.V. Klyueva. Ivanovo : IvSU, 2017, Ch. 9, 259–322 (in Russ.)].
26. Акопова О. Б., Смирнова А. И., Жарникова Н. В., Бумбина Н. В., Усольцева Н. В. Создание новых звездообразных и поликатенарных соединений с прогнозируемым типом мезоморфизма и чувствительностью к световым воздействиям // *Органические и гибридные наноматериалы: получение и перспективы применения: монография* / под ред. В. Ф. Разумова и М. В. Ключева. Иваново : Иван. гос. ун-т, 2019. Гл. 5. С. 112–151. [Akopova O.B., Smirnova A.I., Zharnikova N.V., Bumbina N.V., Usol'tseva N.V. Creation of new star-shaped and polycatenar compounds with predicted mesomorphism type and sensitivity to light influences. *Organic and hybrid nanomaterials: production (creature) and application prospects* / ed. V.F. Razumov, M.V. Klyuev. Ivanovo : IvSU, 2019, Ch. 5, 112–151 (in Russ.)].
27. Акопова О. Б., Пестов С. М. Успехи в конструировании и синтезе хиральных дискотических мезогенов // *Жидк. крист. и их практич. использ.* 2012. Вып. 4. С. 20–33 [Akopova O.B., Pestov S.M. Progress in the design and synthesis of chiral discotic mesogens. *Liq. Cryst. and their Appl.*, 2012, **4**, 20–33 (in Russ.)].

Поступила в редакцию 28.08.2019 г.
Received 28 August 2019