

УДК 532.783

**О. Б. Аكوпова, Н. В. Бумбина, Н. В. Жарникова, А. И. Смирнова, Н. В. Усольева**

**МОДЕЛИРОВАНИЕ ЗВЕЗДООБРАЗНЫХ ПРОИЗВОДНЫХ  
ТРИСТРИАЗОЛОТРИАЗИНА И ПРОГНОЗ ИХ КОЛОНЧАТОГО МЕЗОМОРФИЗМА**

Ивановский государственный университет, НИИ наноматериалов,  
ул. Ермака, 39, 153025 Иваново, Россия. E-mail: ob\_akopova@mail.ru

*Проведено моделирование известных и новых звездообразных производных тристриазолотриазина и выполнен прогноз мезоморфизма, присущего дискотическим мезогенам, с использованием пакета программ HyperChem и СМР ChemCard. На примере серии соединений с известным типом мезоморфизма изучено влияние на результаты прогноза трех алгоритмов деления структуры молекулы на центр и периферию. Определены алгоритмы, повышающие достоверность прогноза до 81,2 %. С их использованием выполнен прогноз мезоморфизма для 16 новых производных тристриазолотриазина и выявлено четыре соединения с положительным прогнозом колончатого мезоморфизма и четыре соединения – с равновероятным, которые предполагается синтезировать и исследовать их мезоморфные свойства.*

**Ключевые слова:** моделирование, прогноз мезоморфизма, дискотические мезогены, звездообразные гетероциклы, тристриазолотриазины.

**DOI:** 10.18083/LCAppl.2019.1.33

**O. B. Akopova, N. V. Bumbina, N. V. Zharnikova, A. I. Smirnova, N. V. Usol'tseva**

**MODELING OF KNOWN AND NEW STAR-SHAPED DERIVATIVES  
OF TRISTRIAZOLOTRIASINE AND PREDICTION OF THEIR COLUMNAR MESOMORPHISM**

Ivanovo State University, Nanomaterials Research Institute,  
39 Ermak St., Ivanovo, 153025, Russia. E-mail: ob\_akopova@mail.ru

*Modeling of the known and new star-shaped derivatives of tristriazolotriazine was carried out and the mesomorphism prediction characteristic of discotic mesogens was performed for these compounds using the HyperChem and СМР ChemCard software. On example of the compounds with a known type of mesomorphism, three algorithms for dividing the structure of a molecule into a center and periphery were applied and their influence on the prediction results were analyzed. The algorithms that increase the reliability of prognosis to 81.2% have been determined. With their use, a mesomorphism prediction was made for 16 new tristriazolotriazine derivatives. Among them, four compounds with a positive forecast of columnar mesomorphism and four compounds with equiprobable were revealed, which are supposed to be synthesized and investigated their mesomorphic properties.*

**Key words:** modeling, prediction of mesomorphism, discotic mesogens, star-shaped heterocycles, tristriazolotriazines.

## Введение

Поиск новых гетероциклических звездообразных дискотических мезогенов (*ГЗДМ*), обладающих высокой термостабильностью и способных проявлять колончатый мезоморфизм при температурах, близких к комнатной, а также имеющих высокую тенденцию к формированию ориентированных монодоменов, до сих пор остается актуальным при разработке новых интеллектуальных наноматериалов [1–4]. Хорошо известны преимущества этих материалов, такие как самосборка на большие расстояния (порядка  $\sim 100$  нм), самовосстановление структурных дефектов, высокая растворимость в органических растворителях и мобильность носителей заряда ( $0,1\text{--}1,3 \text{ см}^2 \cdot \text{В}^{-1} \cdot \text{с}^{-1}$ ) [4–6]. Особый интерес представляют люминесцентные жидкие кристаллы (*ЖК*). Это связано с линейно поляризованным излучением, для которого благоприятна комбинация ориентационной упорядоченности *ЖК* с наличием у них люминесцентных свойств. Такие материалы являются ключевыми при создании новых электронных и оптоэлектронных устройств. Так, соединения на основе *1,3,4-оксадиазола* и *тристриазолотриазино* находят широкое применение при разработке электронно-транспортных/дырочно-блокирующих материалов, которые

служат светоизлучателями в электролюминесцентных диодах [7–10].

Ранее нами в работе [1] и в ряде других публикаций [2–6] были отражены исследования, проведенные в русле активно развивающегося направления по созданию и применению *ГЗДМ*, а также их аналогов с люминесцентными и другими практически значимыми свойствами. Был осуществлен молекулярный дизайн и выполнен синтез различных звездообразных производных гетероциклической природы с прогнозируемым типом мезоморфизма. На основании данных прогноза был выявлен ряд закономерностей по влиянию модификации структуры соединений с *оксадиазольными* фрагментами на проявление ими мезоморфизма. С этой точки зрения были определены наиболее перспективные представители, из которых некоторые были синтезированы, и изучены их физико-химические свойства [1, 11–13].

Цель настоящей работы – поиск новых потенциальных мезогенов звездообразной природы и их аналогов, способных проявлять мезоморфизм, характерный для дискотических мезогенов (*ДМ*), и обладающих практически значимыми свойствами (люминесценцией, одномерной проводимостью, чувствительностью к световым воздействиям и т. д.) путем конструирования и модификации молекул с *тристриазолотриазиновым* остовом 1–7 (рис. 1).

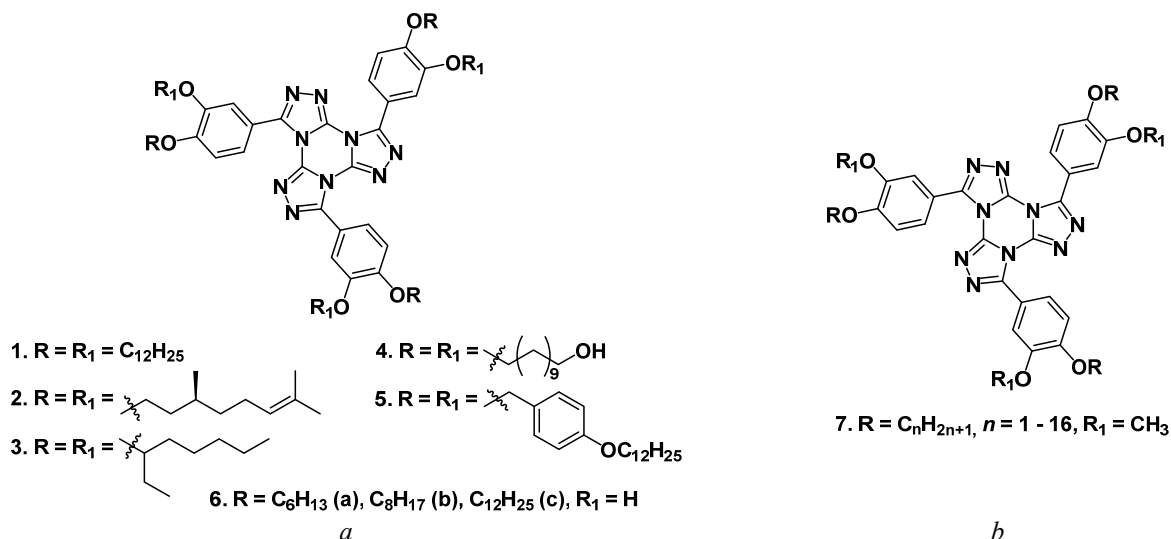


Рис. 1. Производные тристриазолотриазина:

a – структуры 1–6 с известным типом мезоморфизма [5, 18],

b – сконструированные нами структуры 7, мезоморфизм которых необходимо установить из данных прогноза

Fig. 1. Tristriazolotriazine derivatives:

a – structures 1–6 with known type of mesomorphism [5, 18],

b – structures 7 were constructed by us, their mesomorphism has to be established by prediction

## Экспериментальная часть

### Методы

Поскольку синтез подобных материалов требует значительных материальных затрат, может наносить вред здоровью человека и окружающей среде, то значительные усилия ученых направлены на развитие подходов априорного поиска новых соединений-мезогенов с требуемыми свойствами. С этой целью, в частности, была создана программа *ChemCard* [14] для расчета и анализа молекулярных параметров (*MP*), которая позволяет на молекулярном уровне прогнозировать надмолекулярную организацию у дископодобных соединений, что позволяет сократить объемы синтетических работ [15]. Эта программа была адаптирована нами для прогноза мезоморфизма у ГЗДС [11, 12, 16]. Суть метода заключается в построении молекулярных моделей соединений, расчете и анализе их *MP* путем сравнения расчетных значений с классификационным рядом {1} в программе *ChemCard*.

Для достижения поставленной цели с помощью пакета программ *HyperChem* нами проведено построение моделей испытуемых ГЗДС 1–7 (рис. 1) и выполнен прогноз их мезоморфизма с использованием различных алгоритмов деления молекулярной структуры на центральную и периферийную части (рис. 2) и компьютерной программы *СМР*

«*ChemCard*». Модели молекул построены с учетом чередования углеводородных радикалов над и под плоскостью центрального ядра молекулы. Радикалы находятся в устойчивой *транс*-конформации. Оптимизация молекул проводилась методом молекулярной механики, ММ+ (рис. 3). Из оптимизированных молекулярных моделей извлекались их геометрические характеристики, которые затем использовались для расчета *MP* и прогноза мезоморфизма в программе *СМР* «*ChemCard*». В данной программе были рассчитаны семь молекулярных параметров:  $M_m$ ,  $M_r$ ,  $K$ ,  $K_c$ ,  $K_p$ ,  $K_s$ ,  $K_{ar}$ , сравнение которых с классификационным рядом {1} в автоматическом режиме выводит на экран результаты прогноза мезоморфизма (рис. 4).

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 используются следующие параметры:  $K$  – характеризует анизотрию молекулы в целом, а  $K_c$  и  $K_p$  – центра и периферии, соответственно,  $K_s$  – степень замещенности центрального фрагмента периферийными заместителями,  $M_m$  – учитывает соотношение масс центральной и периферийной частей,  $M_r$  – учитывает степень окружения центрального ядра молекулы-дискогена периферийными заместителями,  $K_{ar}$  – предложен с целью учета плотности упаковки периферийных заместителей.

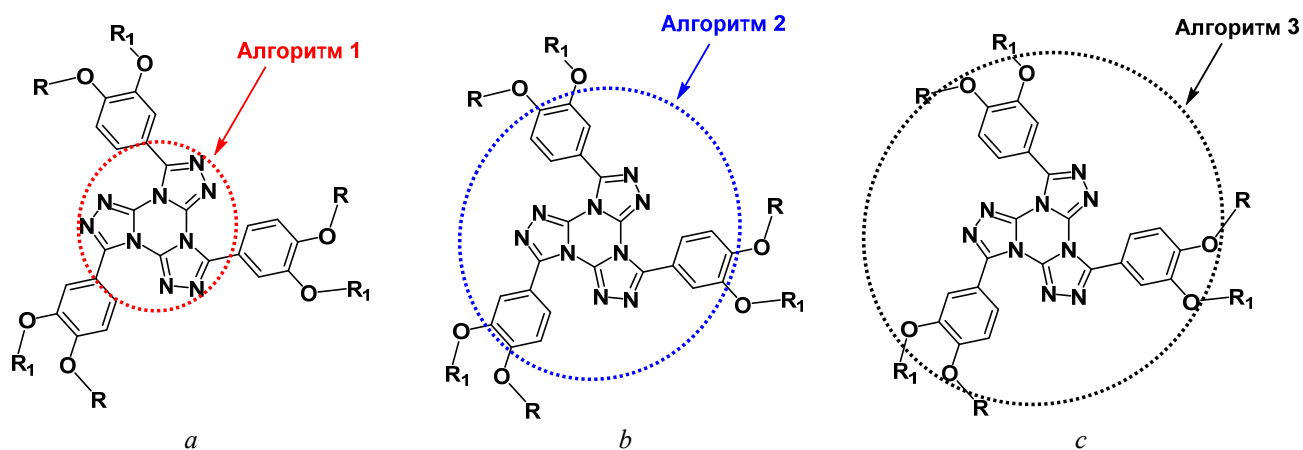


Рис. 2. Алгоритмы деления молекулярных структур 1–7 на центральную и периферийную части: а – алгоритм 1; б – алгоритм 2; с – алгоритм 3

Fig. 2. Algorithms for dividing the molecular structures 1–7 into the central and peripheral parts: а – algorithm 1; б – algorithm 2; с – algorithm 3

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 дискотических мезогенов. Достоверность прогноза данного метода обычно достигает  $\geq 70\%$ , а с учетом скрытых мезофаз доходит до 80–95%. Более подробное описание метода и расчетные формулы *MP* можно найти в работах [13, 15, 17].

На рисунке 2 приведены алгоритмы деления исследуемых молекулярных структур 1–7 на цент-

ральную и периферийную части, с учетом которых проводились расчеты *MP* и дальнейший анализ прогноза мезоморфизма.

По алгоритму 1 в центральный фрагмент включено только жесткое *тристриазолотриазино-вое* ядро, по алгоритму 2 – в центр дополнительно входят бензольные кольца, а по алгоритму 3 – в центральный фрагмент также включены и гетероатомы кислорода, а периферия полностью гидрофобна (рис. 2). В качестве примера на рис. 3 приведены молекулярные модели представителей серий 1–7 в одной из устойчивых конформаций.

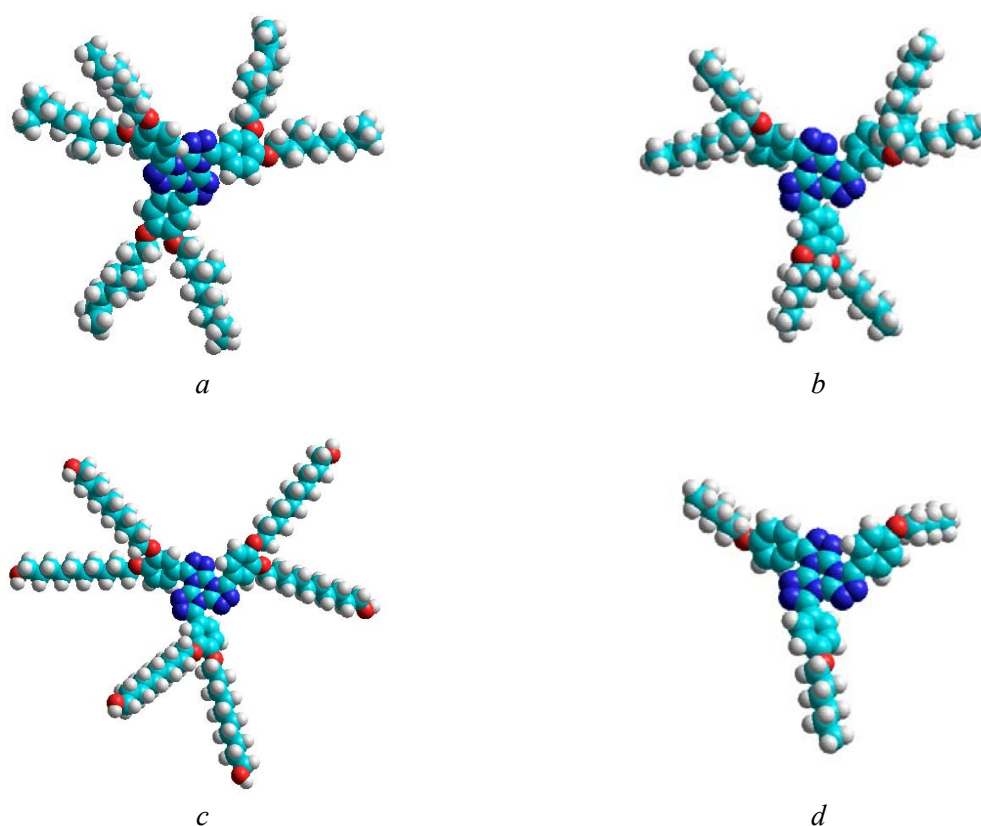


Рис. 3. Модели молекул, оптимизированные в одной из устойчивых конформаций: *a* – соединение 2, *b* – соединение 3, *c* – соединение 4, *d* – соединение 6a

Fig. 3. Molecular models optimized in one of the stable conformations: *a* – compound 2, *b* – compound 3, *c* – compound 4, *d* – compound 6a

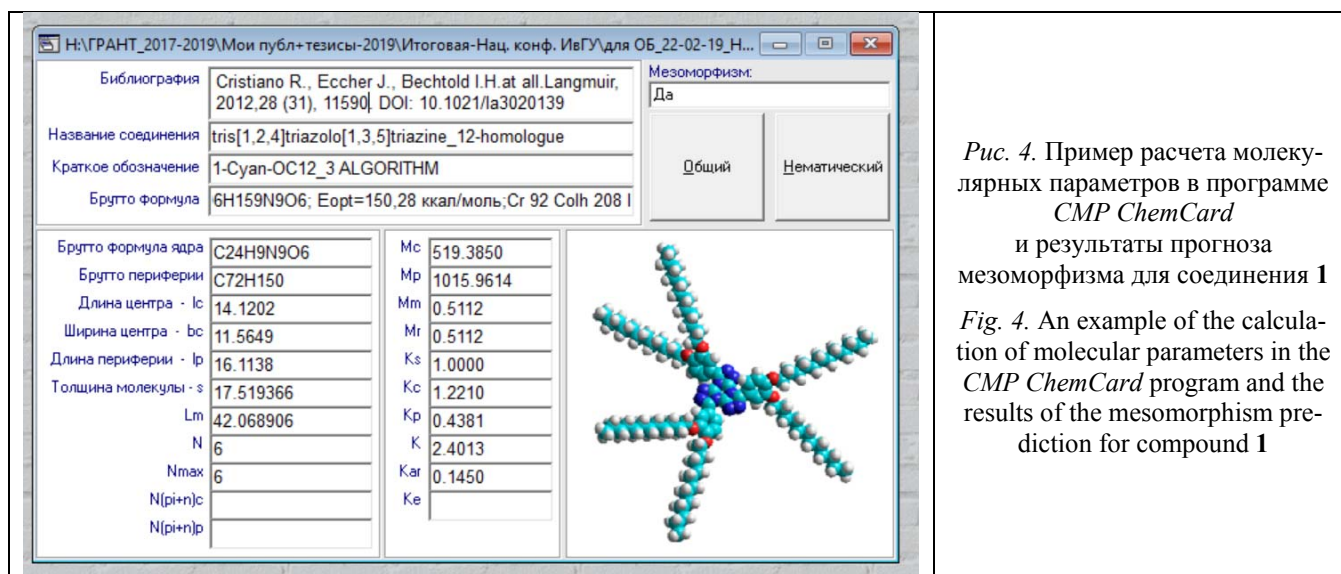


Рис. 4. Пример расчета молекулярных параметров в программе CMP ChemCard и результаты прогноза мезоморфизма для соединения 1

Fig. 4. An example of the calculation of molecular parameters in the CMP ChemCard program and the results of the mesomorphism prediction for compound 1

### Результаты и их обсуждение

В таблицах 1–3 приведены данные по молекулярным параметрам и прогнозу мезоморфизма производных тристриазолотриазина 1–6 известного строения и известным типом мезоморфизма с использованием различных алгоритмов расчета *MP*.

Данные таблицы 1 показывают, что прогноз мезоморфизма по алгоритму 1 для всех соединений отрицательный, тогда как согласно эксперименту – 50 % соединений этой серии мезоморфны и формируют в мезофазе колончатые структуры [5, 18].

Таблица 1. Молекулярные параметры и прогноз мезоморфизма производных тристриазолотриазина 1–6 с установленным типом мезоморфизма по алгоритму 1

Table 1. Molecular parameters and prediction of mesomorphism of tristriazolotriazine derivatives 1–6 with the known type of mesomorphism, according to algorithm 1

Соединение	$E_{opt}$ , ккал/моль	$M_m=M_r$	$K$	$K_p$	$K_{ar}$	$P$	$\Xi$
1	150,25	0,06'	2,40	0,11'	0,140	–	+
2	163,09	0,07'	2,21	0,14'	0,200	–	+
3	132,06	0,08'	3,52	0,17'	0,230	–	+
4	142,99	0,06'	2,52	0,12'	0,160	–	–
5	199,32	0,04'	3,85	0,08'	0,110	–	+
6a	99,72	0,37	2,89	0,17'	0,109	–	–
6b	105,11	0,32	3,06	0,14'	0,106	–	–
6c	117,08	0,25	3,47	0,12'	0,091	–	–

Примечание:  $E_{opt}$  – энергия оптимизации,  $K_s = 1$ ,  $K_c = 1,0-1,02$ ;  $P$  – прогноз мезоморфизма, характерного для ДМ;  $\Xi$  – экспериментальные данные по мезоморфизму [5, 18]: «+» – соединение мезогенно; «–» – соединение не мезогенно; ' – штрихом отмечены значения *MP*, выходящие за границы классификационного ряда {1}.

Таблица 2. Молекулярные параметры и прогноз мезоморфизма производных *тристриазолотриазина* 1–6 с установленным типом мезоморфизма по алгоритму 2Table 2. Molecular parameters and prediction of mesomorphism of *tristriazolotriazine* derivatives 1–6 with the known type of mesomorphism, according to algorithm 2

Соединение	$E_{opt}$ ккал/моль	$M_m$	$M_r$	$K$	$K_p$	$K_{ar}$	$P$	Э
1	150,25	0,38	0,25	2,40	0,33	0,140	+	+
2	163,09	0,46	0,30	2,21	0,48	0,200	+	+
3	132,06	0,55	0,36	3,52	0,60	0,230	+	+
4	142,99	0,38	0,25	2,52	0,36	0,160	+	–
5	199,32	0,24*	0,16	3,85	0,25	0,110	±	+
6a	99,72	1,41'	0,46	2,89	0,27	0,109	–	–
6b	105,11	1,23'	0,41	3,06	0,46	0,106	–	–
6c	117,08	0,77'	0,25	3,47	0,33	0,091	–	–

Примечание: см. обозначения к табл. 1. «±» – прогноз равновероятный. Э – экспериментальные данные по мезоморфизму [5, 18], \* – значения параметра, близкое к границам классификационного ряда 1

Таблица 3. Молекулярные параметры и прогноз мезоморфизма производных *тристриазолотриазина* 1–6 с установленным типом мезоморфизма по алгоритму 3Table 3. Molecular parameters and prediction of mesomorphism of *tristriazolotriazine* derivatives 1–6 with the known type of mesomorphism, according to algorithm 3

Соединение	$E_{opt}$ ккал/моль	$M_m=M_r$	$K$	$K_p$	$K_{ar}$	$P$	Э
1	150,25	0,51	2,40	0,44	0,145	+	+
2	163,09	0,62	2,21	0,66	0,209	+	+
3	132,06	0,77'	3,52	0,84*	0,250	±	+
4	142,99	0,51	2,52	0,48	0,160	+	–
5	199,32	0,31	3,85	0,32	0,121	+	+
6a	99,72	1,86'	7,25	0,81'	0,097	–	–
6b	105,11	1,59'	6,50	0,63	0,078'	–	–
6c	117,08	0,93'	5,15	0,43	0,073'	–	–

Примечание: см. обозначения к табл. 1 и 2

Сравнительный анализ данных прогноза для соединений 1–6 (табл. 4) показывает, что алгоритмы 2 и 3 являются более информативными при

прогнозе мезоморфизма у подобных соединений, поскольку достигается лучшая сходимость результатов прогноза с экспериментом.

Таблица 4. Сравнительные данные прогноза мезоморфизма у соединений 1–6 и сходимость результатов прогноза с экспериментом в зависимости от используемого алгоритма выделения центрального фрагмента молекулы

Table. 4. Prediction of mesomorphism for compounds 1–6 and the convergence of the prediction results with the experiment depending on the algorithm used to allocate the central fragment of the molecule

№ алгоритма	Соединение									Сходимость с экспериментом, %
	1	2	3	4	5	6a	6b	6c		
1	–	–	–	–	–	–	–	–	–	50,0
2	+	+	+	+	±	–	–	–	–	81,2
3	+	+	±	+	+	–	–	–	–	81,2
Э [5, 18]	+	+	+	–	+	–	–	–	–	

Поскольку сходимость результатов прогноза с экспериментом при расчетах по второму и третьему алгоритмам совпадает, то для новой серии производных *тристриазолотриазина 7* был проведен расчет *MP* и выполнен прогноз мезоморфизма, характерного для *ДМ*, именно по этим двум алгоритмам (табл. 5). Согласно данным таблицы, по алгоритму 2 среди новых соединений серии 7 выявлено четыре производных *тристриазолотриазина*

( $n = 9–12$ ) с положительным и четыре ( $n = 8, 13–15$ ) – с равновероятным прогнозом мезоморфизма. При расчете и анализе *MP* по алгоритму 3 только у трех соединений с  $n = 13–15$  с равной вероятностью следует ожидать как проявления мезоморфизма, так и его отсутствие. Для подтверждения результатов данного прогноза необходим синтез перечисленных гомологов.

Таблица 5. Данные прогноза мезоморфизма новой серии производных *тристриазолотриазина 7*

Table. 5. Prediction of mesomorphism for compounds of a new series of *tristriazolotriazine* derivatives 7

№ алгоритма	Номер гомолога ( $n$ )															
	1	2	3	4	5	6	7	8	9	10	11	12	13	14	15	16
2	–	–	–	–	–	–	–	±	+	+	+	+	±	±	±	–
3	–	–	–	–	–	–	–	–	–	–	–	–	±	±	±	–

Следует отметить, что в отличие от немезогенных производных *тристриазолотриазина 6b* и *6c*, у которых на периферии имеются только три гидрофобных заместителя, соединение 7 с  $n = 12$  по прогнозу уже способно проявлять мезоморфизм, а у его гомолога с  $n = 8$  вероятно проявление латентного мезоморфизма. Таким образом, введение трех коротких радикалов ( $–OCH_3$ ) в *тристриазолотриазинный* остов может способствовать формированию колончатых мезофаз.

На основании полученных результатов поставлена задача синтеза новых соединений серии 7 (от 8-го до 13-го гомологов) и изучения их жидко-

кристаллических свойств с целью подтверждения результатов прогноза и дальнейшего исследования практически значимых свойств.

### Выводы

Выполнено моделирование с помощью программы *HyperChem* и получены данные прогноза с применением программы *СМР ChemCard* для 24 соединений двух серий производных *тристриазолотриазина*: одна серия состоит из структур с известным типом мезоморфизма (8 производных), другая – из 16 соединений, сконструи-

рованных нами, с неизвестным проявлением ЖК-свойств. Для соединений с известным типом мезоморфизма данные прогноза получены с использованием 3-х различных алгоритмов деления молекулярной структуры на центр и периферию. Установлено, что в случае применения второго и третьего алгоритма наблюдается одинаково высокая сходимость результатов прогноза с экспериментом (81,2 %).

С использованием наиболее достоверных второго и третьего алгоритмов получены данные по прогнозу для 16-ти новых сконструированных нами производных *тристриазолотриазина* 7. Прогноз дает основание рекомендовать для дальнейшего синтеза и исследования мезоморфных и других практически значимых свойств пять гомологов этой серии с  $n = 8-13$ .

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

#### Список литературы/ References

1. 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. Глава 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 : Ivan. gos. un-t, 2017, Ch. 9, 259–322 (in Russ.)].
2. Акопова О. Б., Ковалева М. И. Молекулярный дизайн и синтез звездообразных дискотических мезогенов гетероциклической природы // *Жидк. крист. и 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.)].
3. *Свидетельство о гос. регистрации базы данных № 2017620388*. Звездообразные дискотические соединения / Усольцева Н. В., Акопова 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 / Usol'tseva N.V., Akopova O.B., Zharnikova N.V., Smirnova A.I., Bumbina N.V., Kovaleva M.I.; Zayavka № 2016621622, postup. 7 dekabr'ya 2016; Gos. Registratsiya v Reestre bazy dannykh 6 aprelya 2017; pravoobladatel' – Ivanovo State University (in Russ.)].
4. Kaafarani B.R. Discotic Liquid Crystals for Opto-Electronic Applications. *Chem. Mater.*, 2011, **23** (3), 378–396. DOI: 10.1021/cm102117c.
5. Cristiano R., Eccher J., Bechtold I.H., Tironi C.N., Vieira A., Molin F., Gallardo H. Luminescent Columnar Liquid Crystals Based on Tristriazolotriazine. *Langmuir*, 2012, **28** (31), 11590–11598. DOI: 10.1021/la3020139.
6. Serrano J.L., Concellon A., Termine R., Golemme A., Romero P., Marcos M. High charge mobility and light-harvesting in discotic nematic dendrimers prepared via “click” chemistry. *J. Mater. Chem. C*, 2019, 10 p. DOI: 10.1039/c8tc06142d.
7. Roy B., De N., Majumdar K.C. Advances in metal-free heterocycle-based columnar liquid crystals. *Chem. Eur. J.*, 2012, **18** (46), 14560–14588. DOI: 10.1002/chem.201200483.
8. Pathak S.K., Pradhan B., Gupta R.K., Gupta M., Pal S.K., Achalkumar A.S. Aromatic  $\pi$ - $\pi$  driven supergelation, aggregation induced emission and columnar self-assembly of star-shaped 1,2,4-oxadiazole derivatives. *J. Mater. Chem. C*, 2016, **4** (27), 6546–6561. DOI: 10.1039/C6TC01939K.
9. Shilpa Setia, Sumyra Sidiq, Joydip De, Ipsita Pani, Santanu Kumar Pal. 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.
10. Glang S., Borchmann D., Rieth T., Detert H. Tristriazolotriazines with  $\pi$ -conjugated segments: star-shaped fluorophores and discotic liquid crystals. *Advances in Science and Technology*, 2013, **77**, 118–123. DOI: 10.4028/www.scientific.net/AST.77.118.
11. Ковалева М. И., Акопова О. Б. Применение молекулярных параметров в прогнозировании мезоморфизма гетероциклических звездообразных дискотических соединений // *Жидк. крист. и их практич. использ.* 2015. Т. 15, № 2, С. 94–101. [Akopova O.B., Kovaleva M.I. Application of molecular parameters in forecasting of mesomorphism of heterocyclic star-shaped discotic compounds. *Liq. Cryst. and their Appl.*, 2015, **15** (2), 94–101 (in Russ.)].
12. Акопова О. Б., Ковалёва 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].
13. 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.
  14. Свидетельство о гос. регистрации программы для ЭВМ № 2012610165. СМР ChemCard / Акопова О.Б., Акопов 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. СМР 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.)].
  15. Усольцева Н.В., Акопова О.Б., Быкова В.В., Смирнова А.И., Пикин С.А. Жидкие кристаллы: дискотические мезогены. Иваново : Иван. гос. ун-т, 2004. 546 с. [Usol'tseva 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.)].
  16. 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.)].
  17. 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.)].
  18. Cristiano R., Gallardo H., Bortoluzzi A.J., Bechtold I.H., Campos C.E.M., Longo R.L. Tristriazolotriazines: a core for luminescent discotic liquid crystals. *Chem. Commun.* 2008, 41, 5134–5136. DOI: 10.1039/b810680k.

Поступила в редакцию 25.02.2019 г.  
Received 25 February 2019