

Научная статья

УДК 541.4/41+544.25+547.7

ИСПОЛЬЗОВАНИЕ МЕТОДА МОЛЕКУЛЯРНЫХ ПАРАМЕТРОВ ДЛЯ ПРОГНОЗА КОЛОНЧАТОГО МЕЗОМОРФИЗМА У ТРИСТРИАЗОЛОТРИАЗИНОВ

О. Б. Аكوпова*, Н. В. Жарникова, Н. В. Бумбина, А. И. Смирнова, А. С. Кашицын, Н. В. Усолицева

НИИ наноматериалов, Ивановский государственный университет, Иваново, Россия

ИНФОРМАЦИЯ

История статьи:

Поступила 4.10.2022

Одобрена 24.10.2022

Принята 31.10.2022

Ключевые слова:

тристриазолотриазины,
звездообразные структуры,
колончатый мезоморфизм,
прогноз,
молекулярные параметры

АННОТАЦИЯ

Проанализирована возможность использования метода молекулярных параметров, разработанного ранее для прогноза колончатого мезоморфизма у дискотических соединений, в приложении к звездообразным производным тристриазолотриазина (ТТТ). Для анализа использованы две серии производных ТТТ различного изомерного строения с тангенциальным *t*-ТТТ (79 структур) и радиальным *r*-ТТТ (22 структуры) положением фенильных колец. Мезоморфизм этих соединений был известен из литературных источников. Проведены моделирование и оптимизация 101 структуры и получены данные прогноза колончатого мезоморфизма с помощью программного продукта «СМР ChemCard». Высокая достоверность прогноза доказана только для *t*-изомерных производных ТТТ (совпадение с экспериментом – 80,4 %). Для *r*-изомеров достоверность прогноза составила 52,3 %. По результатам прогноза предполагается возможность формирования колончатой мезофазы у 29 структур производных *t*-ТТТ, для которых ранее надмолекулярная структура мезофазы не была идентифицирована.

DOI:

10.18083/LCAppl.2022.4.16

Для цитирования:

Акопова О. Б., Жарникова Н. В., Бумбина Н. В., Смирнова А. И., Кашицын А. С., Усолицева Н. В. Использование метода молекулярных параметров для прогноза колончатого мезоморфизма у тристриазолотриазиннов // *Жидк. крист. и их практич. использ.* 2022. Т. 22, № 4. С. 16–26.

*Адрес для переписки: ob_akorova@mail.ru

© Аكوпова О. Б., Жарникова Н. В., Бумбина Н. В., Смирнова А. И., Кашицын А. С., Усолицева Н. В., 2022

Original Article

**METHOD OF MOLECULAR PARAMETERS FOR COLUMNAR MESOMORPHISM
PREDICTION OF TRISTIAZOLOTRIAZINES**

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

Nanomaterials Research Institute, Ivanovo State University, Ivanovo, Russia

ARTICLE INFO:

Article history:

Received 4 October 2022
Approved 24 October 2022
Accepted 31 October 2022

Key words:

tristiazolotriazines,
star-shaped structures,
columnar mesomorphism,
prediction,
molecular parameters.

ABSTRACT

The possibility of using the method of molecular parameters, developed earlier for the prediction of columnar mesomorphism in discotic compounds, was analyzed as applied to star-shaped derivatives of tristiazolotriazine (TTT). Two series of TTT derivatives of different isomeric structures with tangential *t*-TTT (79 structures) and radial *r*-TTT (22 structures) positions of phenyl rings were used for analysis. The mesomorphism of these compounds was known from the literature data. Modeling and optimization of 101 structures were carried out and data on the prediction of columnar mesomorphism were obtained using the “CMP ChemCard” software product. The high reliability of the prediction was proved only for *t*-isomer derivatives of TTT (coincidence with the experiment – 80.4%). For *r*-isomers, the reliability of the prediction was 52.3%. Based on the prediction results, it is assumed that 29 mesogenic structures of *t*-TTT series, for which the supramolecular structure of the mesophase has not been previously identified, form mesophase of columnar type.

DOI:

10.18083/LCAppl.2022.4.16

For citation:

Akopova O. B., Zharnikova N. V., Bumbina N. V., Smirnova A. I., Kashitsyn A.S., Usol'tseva N. V. Method of molecular parameters for columnar mesomorphism prediction of tristiazolotriazines. *Liq. Cryst. and their Appl.*, 2022, **22** (4), 16–26 (in Russ.).

*Corresponding author: ob_akopova@mail.ru

© Akopova O. B., Zharnikova N. V., Bumbina N. V., Smirnova A. I., Kashitsyn A. S., Usol'tseva N. V., 2022

Введение

Создание новых наноматериалов на основе жидких кристаллов (ЖК) для электронных и оптоэлектронных устройств (солнечных батарей, полевых транзисторов, светодиодов, дисплейной оптики, квантовых компьютеров и др.) является актуальной областью исследований для более эффективного практического использования [1–5]. Если каламитные ЖК уже нашли достаточно широкое применение в современных нанотехнологиях, являясь, например, ключевыми элементами ЖК-дисплеев [6–8], то использование дискотических мезогенов (ДМ) в этой области все еще находится на начальной стадии развития [9–12]. Большинство ДМ состоит из ароматического ядра, например, трифенилена, коронена, труксена, перилена и т.д., часто включая богатые электронами фрагменты по периферии центра, такие как алкоксибензолы, тиофены и др. [10, 11, 13]. В последние годы более активно исследуются мезогенные гетероциклические структуры с дефицитом электронов и фотолюминесценцией, такие как триазины, тристриазолотриазины, оксадиазолы, пиримидины и др. [13–15]. Их особенностями являются самосборка в мезофазе в колончатые структуры (самоорганизация), что обеспечивает возможность одномерного переноса заряда за счет перекрывания ароматических π -орбиталей (« π -стекинг») [16–18], усиление флуоресценции в тонких пленках, вызванное агрегацией [19, 20], способность проявлять свойства молекулярных роторов [21, 22]. Не меньший интерес представляют полядерные сопряженные гетероциклы тристриазолотриазинового типа с трехкратным фенильным замещением [23, 24], которые относятся к небольшой еще пока подгруппе звездообразных ДМ с электронодефицитным ядром [25, 26]. В поведении производных тристриазолотриазина (ТТТ) имеются некоторые особенности [23, 24]. Они претерпевают изомеризацию и могут существовать в двух C_3 -симметричных формах: одна – в виде структуры с тремя фенильными заместителями («лопастями») в тангенциальных положениях (*t*-ТТТ, рис. 1), другая – в форме пропеллера с радиальным положением фенильных колец (*r*-ТТТ, рис. 1). Из данных работы [24] следует, что число, позиция и длина алкоксильных заместителей у таких структур оказывают существенное влияние на проявление мезоморфных свойств. В целом *t*-изомеры более склонны к мезоморфизму, чем *r*-изомеры [24]. Часто синтез по-

добных соединений является многостадийным, достаточно сложным в исполнении и затратным по ресурсам. Для уменьшения токсичного воздействия на экосистему при выполнении сложных многостадийных синтезов, а также сокращения трудовых и материальных затрат при создании новых наноматериалов с мезогенными свойствами обычно к их поиску и получению применяют прогностические подходы, прибегая к модельным представлениям [12, 27–34].

Ранее для прогноза мезоморфизма у вновь синтезируемых веществ успешно использовался разработанный нами метод молекулярных параметров (ММП), который был разработан для дискотических соединений [12, 33–35]. Впоследствии метод был адаптирован для прогноза колончатого (Col) мезоморфизма у звездообразных и поликатенарных органических соединений [34]. Было показано, что он может быть использован для этих целей с достаточно высокой степенью достоверности ($\geq 0,75$) [34]. Суть метода состоит в построении и оптимизации молекулярных моделей исследуемых соединений в пакете программ *HyperChem*, ММ⁺; расчете и анализе набора молекулярных параметров (MP) в программе «*CMP ChemCard*» [35] путем их сравнения со значениями классификационного ряда (1):

$$\begin{aligned} K &= 2,0-8,5; K_c = 1,0-2,6; K_p = 0,2-0,7; \\ K_s &= 0,25-1,0; M_m = 0,2-0,8; M_r = 0,15-0,8; \\ K_{ar} &= 0,08-0,3, \end{aligned} \quad (1)$$

где параметр K характеризует анизотрию молекулы в целом; K_c и K_p – анизотрию центра и периферии, соответственно; K_s показывает 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.

Прогноз мезоморфизма считается положительным, когда все семь параметров классификационного ряда (1) входят в его граничные значения. Если хотя бы один из параметров находится за границами ряда (1), то прогноз – отрицательный. Наличие расчетных значений MP вблизи границ классификационного ряда (1) предполагает равновероятный прогноз. В этом случае не исключена возможность проявления скрытой (латентной)

мезофазы. С целью распространения данного метода на более широкий диапазон молекулярных структур звездообразных соединений нами выполнено исследование производных ТТТ [24] различного изомерного строения *t*-ТТТ и *r*-ТТТ (рис. 1), включающих как мезогенные, так и немезогенные структуры.

Экспериментальная часть

Для достижения поставленной цели был использован метод, кратко изложенный во введении и подробно – в работах [12, 15, 31, 33, 34]. Объектами служили звездообразные производные тристриазолотриазина: изомеры с тангенциальным положением фенильных колец *t*-ТТТ (79 структур) и изомеры с радиальным положением фенильных колец *r*-ТТТ (22 структуры) (рис. 1). Мезоморфизм их идентифицирован экспериментально, данные приведены в обзорной статье [24]. Всего изучена 101 молекулярная структура, состоящая из 54 мезогенных и 47 немезогенных соединений.

Результаты и обсуждение

В работе [32] частично приведены данные по МР и прогнозу мезоморфизма для 37 соединений

серии *t*-ТТТ. В работе [32] также было изучено влияние на достоверность прогноза Col-мезоморфизма трех различных алгоритмов деления молекулярной структуры производных ТТТ на центр и периферию. По *алгоритму 1* в центральный фрагмент было включено только жесткое тристриазолотриазинное ядро, по *алгоритму 2* в центр дополнительно входили фенильные кольца, а по *алгоритму 3* в центральный фрагмент были включены и примыкающие к ним гетероатомы. Было установлено, что *алгоритмы 2* и *3* равнодостоверны, информативность прогноза по ним достигает 80 % [32].

Применение нами большего числа производных ТТТ с известным типом мезоморфизма с учетом их изомерного строения (рис. 1), актуально для оптимизации достоверности прогностического метода, используемого для априорного предсказания возможности проявления мезоморфизма у такого класса соединений.

В серию *t*-ТТТ вошло 33 немезогенных соединения, 17 структур с установленным типом мезоморфизма (Col-мезофаза) и 29 структур с мезоморфизмом неустановленного типа. Серия *r*-ТТТ состояла из 14 немезогенов и 8 мезогенов, у двух из которых тип мезоморфизма не определен.

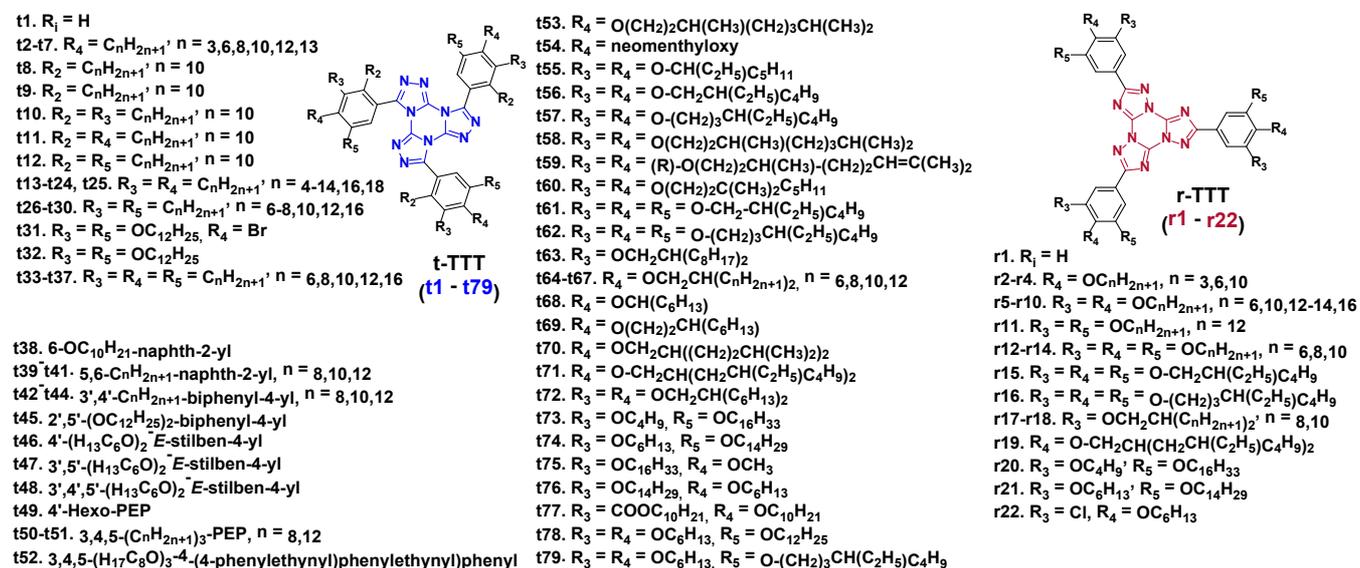


Рис. 1. Производные тристриазолотриазина с известным типом мезоморфизма [24], где **t1-t79** – структуры с фенильными заместителями в тангенциальных положениях; **r1-r22** – структуры с радиальным положением фенильных заместителей

Fig. 1. Tristriazolotriazine derivatives with known type of mesomorphism [24], where **t1-t79** – structures with phenyl substituents in tangential positions; **r1-r22** – structures with radial position of phenyl substituents

Используя ММП, были проведены моделирование и оптимизация моделей в программе *HyperChem*, ММ⁺ 101 структуры ТТТ: 79 представителей серии *t*-ТТТ и 22 – серии *r*-ТТТ (рис. 2). Данные по моделированию были использованы для расчета *MP*: M_m , M_r , K , K_c , K_p , K_{ar} , K_s (табл. 1, 2) и прогнозу мезоморфизма с помощью программы «*CMP ChemCard*» [35] (рис. 3). Для расчета *MP*

применяли только *алгоритм 3*, поскольку он отвечает условиям разработанного нами метода [34] и показывает высокую сходимость результатов прогноза с экспериментальными данными для структур подобного строения [32]. Результаты расчета *MP* и прогноза мезоморфизма для этих серий соединений суммированы в таблицах 1, 2.

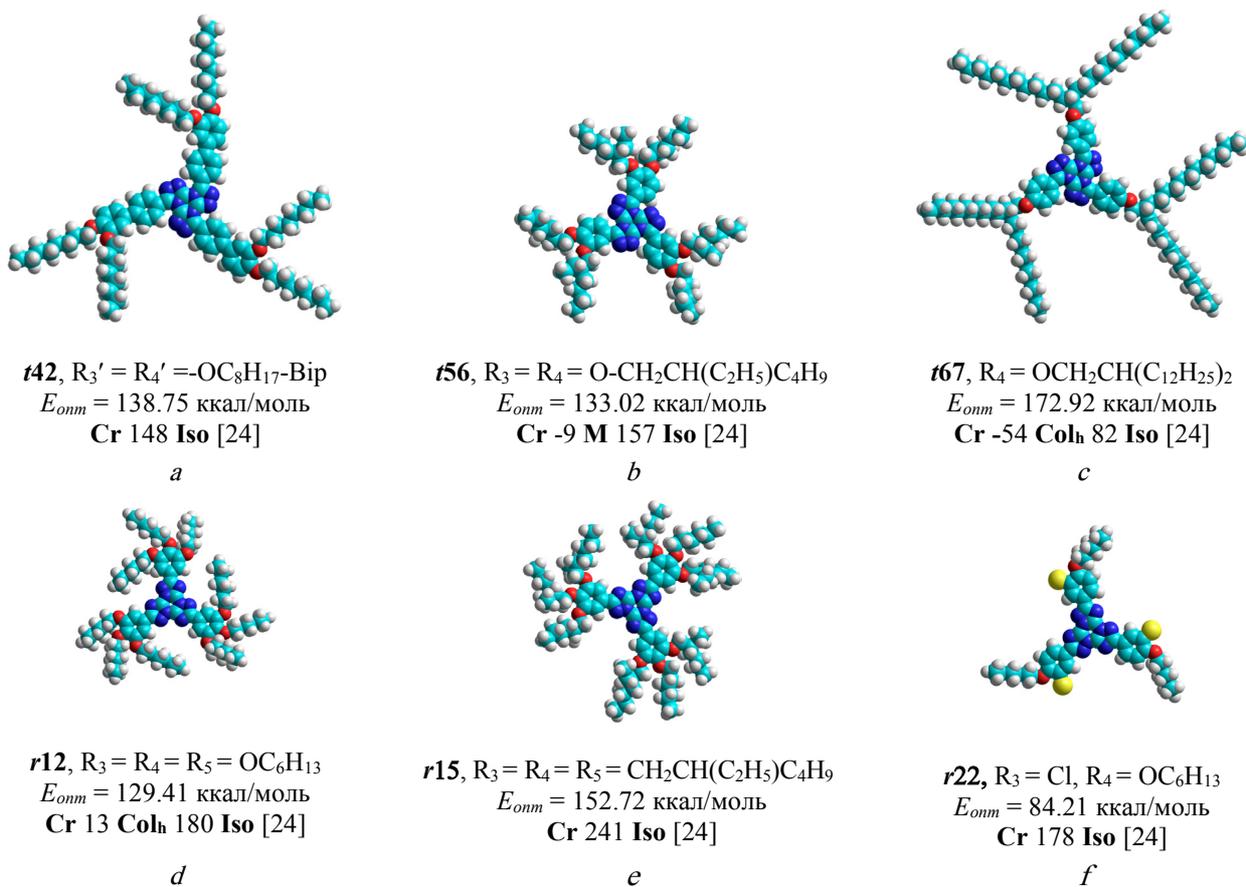


Рис. 2. Примеры оптимизированных моделей изомерных структур серии *t*-ТТТ (*a–c*) и серии *r*-ТТТ (*d–f*)

Fig. 2. Optimized models examples of isomeric structures of the *t*-ТТТ series (*a–c*) and *r*-ТТТ series (*d–f*)

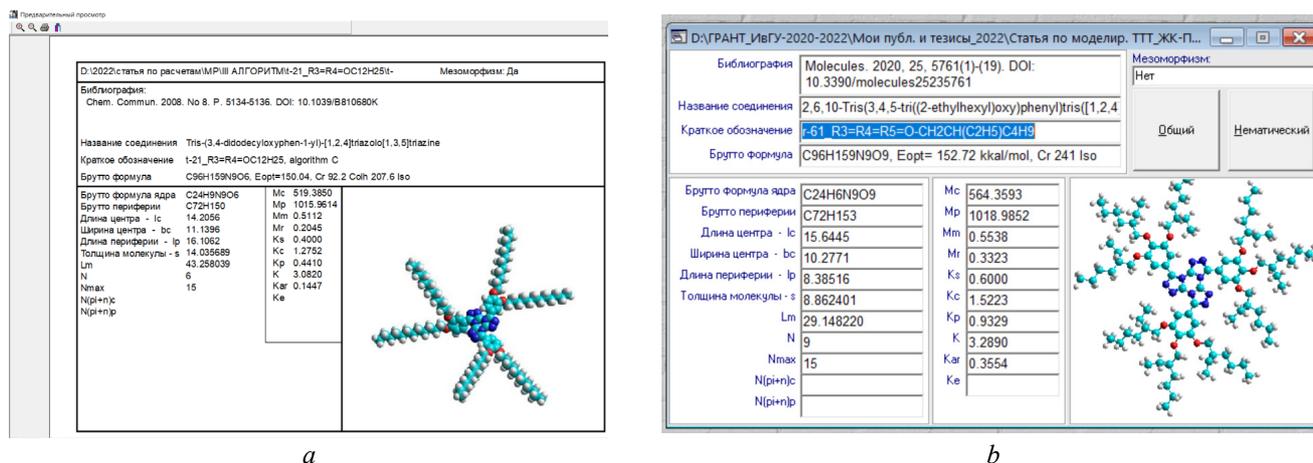


Рис. 3. Пример расчета MP и прогноза мезоморфизма для **t21** (a) и **r15** (b) по алгоритму 3

Fig. 3. An example of calculating MP and mesomorphism prediction for **t21** (a) and **r15** (b) using algorithm 3

Таблица 1. Данные по MP и прогнозу мезоморфизма для **t-TTT**

Table 1. Data on MP and mesomorphism prediction for **t-TTT**

t-TTT	E_{opt} , ккал/моль	MP					P	ΔT , °C
		K 2,0–8,5	K_p 0,2–0,7	M_m 0,2–0,85	M_r 0,15–0,8	K_{ar} 0,08–0,30		
t1	24,18	11,46	0,51	0,87	0,87	0,168	–	0
t2	76,16	9,63	1,50	3,67	0,73	0,116	–	0
t3	81,89	11,37	0,81	1,86	0,37	0,098	–	0
t4	85,71	12,65	0,62	1,40	0,28	0,088	–	0
t5	89,66	11,03	0,51	1,12	0,22	0,081	–	0
t6	93,51	11,24	0,43	0,93	0,19	0,074	–	0
t7	95,42	17,90	0,39	0,86	0,17	0,069	–	0
t8	84,26	7,22	0,47	1,12	0,22	0,084	–	0
t9	109,11	2,21	0,26	1,12	0,22	0,109	–	0
t10	157,94	4,01'	0,52'	0,61'	0,24'	0,165'	+	0
t11	144,58	2,64'	0,50'	0,61'	0,24'	0,161'	+	0
t12	135,99	2,29	0,48	0,61	0,24	0,164	+	0
t13	95,75	6,21	1,22	1,52	0,61	0,216	–	0
t14	99,74	5,13	1,01	1,22'	0,49	0,200	–	99*
t15	105,24	3,58	0,81	1,02'	0,41	0,189	–	134*
t16	110,97	6,58	0,74	0,87''	0,35	0,180	±	125*
t17	116,36	7,32	0,67	0,76	0,31	0,171	+	126*
t18	123,14	2,07	0,57	0,68	0,27	0,164	+	121*
t19	127,11	7,00	0,53	0,61	0,24	0,156	+	118
t20	132,45	6,45	0,49	0,56	0,22	0,150	+	119*
t21	150,04	3,08	0,44	0,51	0,20	0,145	+	115
t22	155,40	2,93	0,41	0,47	0,19	0,139	+	101*
t23	160,77	2,95	0,38	0,44	0,17	0,134	+	192
t24	171,28	2,90	0,33	0,38	0,15	0,124	+	152*
t25	182,02	2,89	0,30	0,34	0,14	0,116	+	124*
t26	114,01	2,11	0,79	1,02'	0,41	0,197	–	51*
t27	119,74	2,18	0,69	0,87''	0,35	0,188	±	57
t28	125,09	2,13	0,61	0,76	0,31	0,178	+	60*
t29	136,29	2,07	0,49	0,61	0,24	0,162	+	74*
t30	147,01	2,02	0,41	0,51	0,20	0,149	+	69
t31	157,54	2,78	0,46	0,75	0,45	0,142	+	62*

Продолжение таблицы 1

t32	168,00	2,28	0,33	0,38	0,15	0,125	+	45*
t33	129,41	2,24	0,84'	0,74	0,44	0,286	–	68
t34	154,61	2,92	0,65	0,55	0,33	0,258	+	58
t35	179,92	2,64	0,53	0,44	0,27	0,235	+	39
t36	186,39	2,28	0,45	0,37	0,22	0,216	+	25
t37	220,08	2,55	0,34	0,26	0,16	0,189	+	20*
t38	131,71	3,42	1,41	0,21	0,53	0,079	–	0
t39	153,90	2,44	0,62	0,99'	0,28	0,172	–	85
t40	166,33	2,67	0,51	0,79	0,23	0,161	+	134*
t41	182,64	2,49	0,47	0,66	0,19	0,147	+	130
t42	138,73	4,58	0,94	0,99	0,22	0,132	–	0
t43	148,03	4,41	0,77	0,88	0,20	0,124	–	0
t44	170,13	1,94	0,67	0,74	0,16	0,118	–	110*
t45	171,49	1,51	0,59	0,74	0,16	0,126	–	0
t46	118,47	7,01	1,44	3,06	0,34	0,061	–	0
t47	138,66	2,31	1,40'	1,62'	0,36	0,124	–	0
t48	154,29	2,50	1,42'	1,14'	0,38	0,184	–	25*
t49	105,40	9,51	1,16	3,03	0,34	0,054	–	0
t50	154,28	2,30	1,17	0,90	0,30	0,195	–	0
t51	180,30	1,58	0,74	0,57	0,19	0,165	–	0
t52	144,97	3,44	1,68'	1,14'	0,38	0,137	–	45*
t53	116,56	6,80	0,63	1,12	0,22	0,111	–	0
t54	110,28	2,91	1,32	1,01	0,20	0,266	–	0
t55	131,55	2,83	0,78''	0,76	0,31	0,243	±	>158
t56	133,02	3,79	0,86'	0,76	0,31	0,255	–	166*
t57	156,58	3,86	0,62	0,61	0,24	0,220	+	110*
t58	146,96	3,10	0,61	0,61	0,24	0,224	+	131*
t59	142,08	3,35	0,64	0,62	0,25	0,217	+	126
t60	171,02	3,66	0,60	0,61	0,24	0,224	+	98
t61	162,80	3,44	0,85	0,55	0,33	0,373	–	0
t62	199,74	1,87	0,65	0,44	0,27	0,330	–	0
t63	127,14	1,70	0,48	0,62	0,25	0,148	–	0
t64	142,97	2,05	0,63	0,80	0,32	0,155	+	51
t65	151,65	3,31	0,52	0,62	0,25	0,147	+	116*
t66	162,49	3,04	0,44	0,51	0,20	0,138	+	155
t67	173,97	2,51	0,38	0,43	0,17	0,128	+	136
t68	130,35	1,84	0,72	0,86	0,34	0,169	–	0
t69	137,43	1,90	0,55	0,75	0,30	0,135	–	0
t70	129,55	2,78	0,86	0,93	0,19	0,207	–	0
t71	163,02	2,41	0,64	0,62	0,25	0,208	+	45*
t72	157,16	3,15	0,69	0,44	0,18	0,319''	±	0
t73	125,26	4,48	0,31	0,61	0,24	0,081	+	44*
t74	125,03	3,66	0,36	0,61	0,24	0,100	+	73*
t75	117,30	6,25	0,34	0,72	0,29	0,067''	±	0
t76	122,39	5,65	0,38	0,61	0,24	0,096	+	80*
t77	134,80	3,76'	0,47'	0,64'	0,26'	0,135'	+	0
t78	142,78	3,86	0,44	0,55	0,33	0,146	+	31*
t79	155,22	3,54	0,54	0,60	0,36	0,179	+	56

Примечание. P – прогноз мезоморфизма; K_c – для **t1–t7** и **t53–t79** изменяется от 1,00 до 1,43; K_c – для **t8–t52** изменяется от 1,00 до 1,04; K_s – от 0,20 до 1,00 – для **t1–t7** и **t53–t79**; K_s – для **t8–t52** изменяется от 0,11 до 0,33; ' – штрихом обозначены те значения MP, по которым соединения отнесены к немезогенам или мезогенам, но прогноз не совпадает с экспериментом. * – тип мезофазы не установлен [24], в остальных случаях указан температурный интервал существования (ΔT , °C) Col-мезофазы или его отсутствие (0) [24]. Зеленым цветом выделены ячейки с равновероятным прогнозом, а желтым – несоответствие данных прогноза с экспериментом

Анализ данных для *t*-ТТТ (табл. 1, рис. 4, *a*) показывает, что прогноз мезоморфизма для этих соединений совпадает с экспериментом на 80,4 %, а для *r*-изомеров (табл. 2, рис. 4, *b*) – на 52,3 %.

Таким образом, из рис. 4 следует, что ММП можно применять с высокой достоверностью прогноза колончатого мезоморфизма только для

t-изомеров ТТТ. Низкая достоверность прогноза для серии *r*-изомеров, возможно, связана с небольшим числом изученных структур и требует дальнейшего исследования. Также для пяти из 79 соединений серии *t*-ТТТ прогноз определен как равновероятный, что свидетельствует о возможности формирования ими латентных мезофаз.

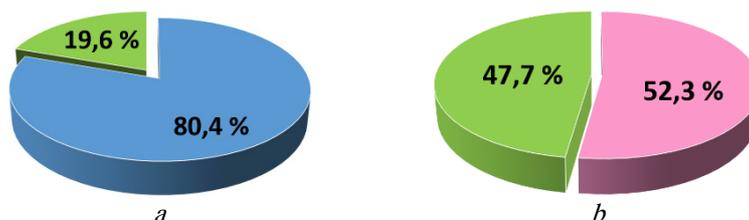


Рис. 4. Сходимость данных прогноза с экспериментом у известных производных ТТТ: *a* – для *t*-ТТТ; *b* – для *r*-ТТТ

Fig. 4. Convergence of prediction data with experiment for known TTT derivatives: *a* – *t*-ТТТ; *b* – *r*-ТТТ

Таблица 2. Данные по МР и прогнозу мезоморфизма для *r*-ТТТ

Table 2. Data on МР and mesomorphism prediction for *r*-ТТТ

r-ТТТ	E_{opt} , ккал/моль	Значения МР					P	ΔT , °C
		K 2,0–8,5	K_p 0,2–0,7	M_m 0,2–0,85	M_r 0,15–0,8	K_{ar} 0,08–0,30		
r1	24,18	11,46	0,51	0,87	0,87	0,168	–	0
r2	76,16	9,63	1,50	3,67	0,73	0,116	–	0
r3	81,89	11,37	0,81	1,86	0,37	0,098	–	0
r4	85,71	12,65	0,62	1,40	0,28	0,088	–	0
r5	89,66	11,03	0,51	1,12	0,22	0,081	–	0
r6	93,51	11,24	0,43	0,93	0,19	0,074	–	0
r7	95,42	17,90	0,39	0,86	0,17	0,069	–	0
r8	84,26	7,22	0,47	1,12	0,22	0,084	–	25*
r9	109,11	2,21	0,26	1,12	0,22	0,109	–	8
r10	157,94	4,01'	0,52'	0,61'	0,24'	0,165'	+	96
r11	144,58	2,64'	0,50'	0,61'	0,24'	0,161'	+	0
r12	135,99	2,29	0,48	0,61	0,24	0,164	+	167
r13	95,75	6,21	1,22	1,52	0,61	0,216	–	170
r14	99,74	5,13	1,01	1,22'	0,49	0,200	–	60
r15	105,24	3,58	0,81	1,02'	0,41	0,189	–	0
r16	110,97	6,58	0,74	0,87''	0,35	0,180	±	132
r17	116,36	7,32	0,67	0,76	0,31	0,171	+	0
r18	123,14	2,07	0,57	0,68	0,27	0,164	+	0
r19	127,11	7,00	0,53	0,61	0,24	0,156	+	0
r20	132,45	6,45	0,49	0,56	0,22	0,150	+	0
r21	150,04	3,08	0,44	0,51	0,20	0,145	+	57*
r22	155,40	2,93	0,41	0,47	0,19	0,139	+	0

Примечание: K_s – для *r*-ТТТ изменяется от 1,00 до 1,02; K_s – от 0,2 до 1,0; расшифровку остальных обозначений см. в примечании к таблице 1

По результатам выполненного прогноза (табл. 1, 2) с большой долей вероятности можно ожидать, что те мезогенные *t*-изомеры, для которых тип мезофазы был не установлен в [24], и для которых прогноз мезоморфизма положительный, вероятно формируют мезофазу колончатого типа.

При учете совпадений только положительного прогноза мезоморфизма с имеющимися экспериментальными данными (54 мезогена) достоверность выполненного прогноза составляет 74,1 %.

Заключение

Проведены моделирование и оптимизация 101 молекулярной структуры производных тристриазолотриазина, рассчитаны и проанализированы их молекулярные параметры и осуществлен прогноз колончатого мезоморфизма. Выполненные исследования указывают на возможность использования метода молекулярных параметров для прогноза колончатого мезоморфизма у звездообразных *t*-изомеров класса тристриазолотриазинов. Такой вывод доказывается высокой схожимостью результатов прогноза с экспериментальными данными о мезоморфизме 79 производных *t*-ТТТ. Но для *r*-изомеров ТТТ требуются дополнительные исследования. Кроме того, используемый нами метод позволяет выявлять латентный мезоморфизм у подобных структур. Полученные данные будут способствовать повышению эффективности поиска новых мезогенных структур из класса производных ТТТ и других звездообразных соединений, снижению временных, материальных и трудовых затрат при синтезе новых мезогенных производных ТТТ, проявляющих колончатый мезоморфизм.

Благодарность: работа выполнена в рамках государственного задания Минобрнауки РФ для Ивановского государственного университета на 2020–2022 (Грант № FZZM-2020-0006).

Acknowledgment: the work was carried out within the framework of the state task of the Ministry of Education and Science of the Russian Federation for the Ivanovo State University for 2020–2022 (Grant No. FZZM-2020-0006).

Список источников / References

- Nandi R., Pal S.K. Liquid crystal based sensing device using a smartphone. *Analyst.*, 2018, **143** (5), 1046–1052. DOI: 10.1039/C7AN01987d.
- 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.
- Shen Y., Dierking I. Perspectives in liquid-crystal-aided nanotechnology and nanoscience. *Appl. Sci.*, 2019, **9** (12), 2512–2559. DOI: 10.3390/app9122512.
- Hähsler M., Appel I., Behrens S. Magnetic hybrid materials in liquid crystals. *Physical Sciences Reviews*, 2022, **7** (9), 1009–1032. DOI: 10.1515/psr-2019-0090.
- Wang Y.J., Lin Y.H. Liquid crystal technology forvergence-accommodation conflicts in augmented reality and virtual reality systems: a review. *Liq. Cryst. Rev.*, 2021, **9** (1), 35–64. DOI: 10.1080/21680396.2021.1948927.
- Gray G.W., Kelly S.M. Liquid crystals for twisted nematic display devices. *J. Mater. Chem.*, 1999, **9** (9), 2037–2050. DOI: 10.1039/A902682G.
- Martin S. Nematic liquid crystals and twisted-nematic LCDs. *Liq. Cryst.*, 2015, **42** (5–6), 646–652. DOI: 10.1080/02678292.2015.1021597.
- Munna M., Anwar F., Coutu R.A. Nematic liquid crystal composite materials for DC and RF switching. *Technologies*, 2019, **7** (2), 32–60. DOI: 10.3390/technologies7020032.
- Kaafarani B.R. Discotic liquid crystals for optoelectronic applications. *Chem. Mater.*, 2011, **23** (3), 378–396. DOI: 10.1021/cm102117c.
- Vadivel M., Kumar I.S., Swamynathan K., Raghunathan V.A., Kumar S. Novel annulated triphenylene discotic liquid crystals generated by pictet-spengler cyclization. *Chemistry Select*, 2018, **3** (30), 8763–8769. DOI: 10.1002/slct.201801738.
- Wöhrle T., Wurzbach I., Kirres J., Kostidou A., Kapernaum N., Litterscheidt J., Haenle J.C., Staffeld P., Baro A., Giesselmann F., Laschat S. Discotic liquid crystals. *Chem. Rev.*, 2016, **116** (3), 1139–1241. DOI: 10.1021/acs.chemrev.5b00190.
- 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. [Usol'tseva N.V., Akopova O.B., Bykova V.V., Smirnova A.I., Pikin S.A. Liquid crystals: discotic mesogens / ed. by N.V. Usol'tseva. Ivanovo : Ivanovo State University, 2004, 546 p. (in Russ.)].
- Свидетельство о гос. регистрации базы данных № 2017620388. Звездообразные дискотические соединения / Н. В. Усольцева, О. Б. Аكوпова, Н. В. Жарникова, А. И. Смирнова, Н. В. Бумбина, М. И. Ковалева; Заявка № 2016621622, поступ. 7.12.2016 г.; Государственная регистрация в Реестре базы данных 6.04.2017 г.; правообладатель – Ивановский государственный университет. [Certificate of state registration of database № 2017620388. Star-shaped

- discotic compounds / N.V. Usol'tseva, O.B. Akopova, N.V. Zharnikova, A.I. Smirnova, N.V. Bumbina, M.I. Kovaleva; Zayavka № 2016621622, postup. 7.12.2016; Gos. Registratsiya v Reestre bazy dannykh 6.04.2017; pravoobladatel' – Ivanovo State University (in Russ)].
14. Santos G.S., Westphal E. Photoisomerizable azobenzene star-shaped liquid crystals: bypassing the absence of hydrogen bonding. *New J. Chem.*, 2022, **46** (16), 7334–7345. DOI: 10.1039/D2NJ00456A.
 15. 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.
 16. Sergeev S., Pisula W., Geerts Y.H. Discotic liquid crystals: a new generation of organic semiconductors. *Chem. Soc. Rev.*, 2007, **36** (12), 1902–1929. DOI: 10.1039/B417320.
 17. Staffeld P., Kaller M., Ehni P., Ebert M., Laschat S., Giesselmann F. Improved electronic transport in ion complexes of crown ether based columnar liquid crystals. *Crystals*, 2019, **9** (2), 74–92. DOI: 10.3390/cryst9020074.
 18. Feng H., Geng X., Lin J., Guo H., Yang F. Novel fluorescent liquid crystals: synthesis, mesomorphism and fluorescence of triphenylene-Bodipy derivatives based on 1,3,5-triazine core. *Liq. Cryst.*, 2018, **45** (10), 1470–1476. DOI: 10.1080/02678292.2018.1446554.
 19. Guo H., Zheng S., Chen S., Hana C., Yang F. A first porphyrin liquid crystal with strong fluorescence in both solution and aggregated states based on the AIE-FRET effect. *Soft Matter*, 2019, **15** (41), 8329–8337. DOI: 10.1039/C9SM01174A.
 20. De J., M.M. A.H., Yadav R.A.K., Gupta S.P., Bala I., Chawla P., Kesavan K.K., Jou J.H., Pal S.K. AIE-Active mechanoluminescent discotic liquid crystals for applications in OLEDs and bio-imaging. *Chem. Commun.*, 2020, **56** (91), 14279–14282. DOI: 10.1039/D0CC05813K.
 21. Kimura R., Kitakado H., Yamakado T., Yoshida H., Saito S. Probing a microviscosity change at the nematic–isotropic liquid crystal phase transition by a ratio-metric flapping fluorophore. *Chem. Commun.*, 2022, **58** (13), 2128–2131. DOI: 10.1039/D1CC06111A.
 22. Ibarra-Rodriguez M., Muñoz-Flores B.M., Rasika Dias H.V., Sánchez M., Gomez-Treviño A., Santillan R., Farfán N., Jiménez-Pérez V.M. Fluorescent molecular rotors of organoboron compounds from schiff bases: Synthesis, viscosity, reversible thermochromism, cytotoxicity and bioimaging cells. *J. Org. Chem.*, 2017, **82** (5), 2375–2385. DOI: 10.1021/acs.joc.6b02802.
 23. Dal-Bó A.G., Cisneros G.G.L., Cercena R., Mendes J., Matos de Silveira L., Zapp E., Dominicano K.G., da Costa Duarte R., Rodembusch F.S., Allievi Frizon T.E. Synthesis, electrochemical, thermal and photophysical characterization of photoactive discotic dyes based on the tris-[1,2,4]-triazolo-[1,3,5]-triazine core. *Dyes Pigm.*, 2016, **135**, 49–56. DOI: 10.1016/j.dyepig.2016.06.041.
 24. Rieth T., Tober N., Limbach D., Haspel T., Sperner M., Schupp N., Wicker P., Glang S., Lehmann M., Detert H. Impact of substitution pattern and chain length on the thermotropic properties of alkoxy-substituted triphenyl-tristriazolotriazines. *Molecules*, 2020, **25** (23), 5761–5779. DOI: 10.3390/molecules25235761.
 25. Pathak S.K., Xiang Y., Huang M., Huang T., Cao X., Liu H., Xie G., Yang C. Fused tetracyclic tris[1,2,4]triazolo[1,3,5]triazine as a novel rigid electron acceptor for efficient thermally activated delayed fluorescence emitters. *RSC Adv.*, 2020, **10** (26), 15523–15529. DOI: 10.1039/D0RA01925A.
 26. Pradhan B., Pathak S.K., Gupta R.K., Gupta M., Pal S.K., Achalkumar A.S. Star-shaped fluorescent liquid crystals derived from s-triazine and 1,3,4-oxadiazole moieties. *J. Mater. Chem. C*, 2016, **4** (25), 6117–6130. DOI: 10.1039/C6TC01260D.
 27. Care C.M., Cleaver D.J. Computer simulation of liquid crystals. *Rep. Prog. Phys.*, 2005, **68** (11), 2665–2700. DOI: 10.1088/0034-4885/68/11/R04.
 28. Said S.M., Mahmood M.S., Daud M.N., Mohd Sabri M.F., Sair N.A. Structure-electronics relations of discotic liquid crystals from a molecular modelling perspective. *Liq. Cryst.*, 2016, **43** (13–15), 2092–2113. DOI: 10.1080/02678292.2016.1209792.
 29. Orlandi S., Zannoni C. Molecular organizations of conical mesogenic fullerenes. *Soft Matter*, 2018, **14** (19), 3882–3888. DOI: 10.1039/c7sm02459b.
 30. Ricci M., Roscioni O.M., Querciagrossa L., Zannoni C. MOLC. A reversible coarse grained approach using anisotropic beads for the modelling of organic functional materials. *Phys. Chem. Chem. Phys.*, 2019, **21**, 26195–26211. DOI: 10.1039/c9cp04120f.
 31. Акопова О. Б., Ковалева М. И. Молекулярный дизайн и синтез звездообразных дискотических мезо-генов гетероциклической природы // *Жидк. крист. и их практич. использ.* 2014. Т. 14, № 2. С. 21–57. [Акопова О.Б., 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.)].
 32. Жарникова Н. В., Акопова О. Б., Бумбина Н. В., Смирнова А. И., Усольцева Н. В. Применимость метода молекулярных параметров для прогноза мезоморфизма у звездообразных тристриазолотриазин-ов // *Сборник научн. статей X Всероссийской конференции «Квантово-химические расчеты: структура и реакционная способность органических и неорганических молекул»*. Иваново, 23–25 марта 2022. С. 68–71. [Zharnikova N.V., Akopova O.B., Bumbina N.V., Smirnova A.I., Usol'tseva N.V. Applicability of the molecular parameters method for the prediction of mesomorphism in star-shaped

- tristriazolotriazines. *Proceedings IX All-Russ. conf. "Quantum-chemical calculations: structure and reactivity of organic and inorganic molecules"*. Ivanovo, 2022, 68–71 (in Russ.).
33. Акопова О. Б., Курбатова Е. В., Груздев М. С. Синтез и исследование дискотических производных трифенилена с донорными и акцепторными группами и прогнозируемым типом мезоморфизма // *ЖОХ*. 2008. Т. 78, № 10. С. 1665–1672. [Акопова О.В., Kurbatova E.V., Gruzdev M.S. Synthesis and investigation of triphenylene discotic derivatives with donor and acceptor groups and with predictable type of mesomorphism. *Russ. J. General Chem.*, 2008, **78** (10), 1902–1909 (in Russ.)].
34. Акопова О. Б., Жарникова Н. В., Смирнова А. И., Бумбина Н. В., Усольцева Н. В. Эффективный прогноз колончатого мезоморфизма у дискотических, звездообразных и поликатенарных органических соединений на основе расчета молекулярных параметров // *Международн. научно-исслед. конкурс «Научные достижения высшей школы»*: сб. научн. ст. Петрозаводск, 25 января 2021. С. 83–96. [Акопова О.В., Zharnikova N.V., Smirnova A.I., Bumbina N.V., Usol'tseva N.V. Efficient prognosis of columnar mesomorphism in discotic, star-shaped and polycatenary organic compounds based on the calculation of molecular parameters. *Proceedings International Scientific Research Competition «Scientific achievements of the higher school»*. Petrozavodsk, 2021, 83–96 (in Russ.)].
35. Свидетельство о гос. регистрации программы для ЭВМ № 2012610165. СМР ChemCard / О. Б. Акопова, Д. А. Акопов; Заявка № 2011616958. Поступило 19.09.2011; Зарегистрировано в Реестре программ для ЭВМ 10.01.2012. [Certificate of State registration of computer program № 2012610165. СМР ChemCard / O.V. Akopova, D.A. Akopov; request № 2011616958; received 19.09.2011. It is registered in the Register of Computer Programs 10.01.2012. (in Russ.)].

Вклад авторов:

¹Акопова О. Б. – разработка концепции научной работы и постановка задачи, получение расчетных данных и анализ результатов, написание текста статьи и создание графического реферата к ней.

²Жарникова Н. В. – получение расчетных данных, участие в обсуждении результатов, оформление и редактирование статьи, а также иллюстраций к ней.

³Бумбина Н. В. – получение расчетных данных, участие в обсуждении результатов, редактирование списка литературы.

⁴Смирнова А. И. – участие в обсуждении результатов, редактирование текста статьи.

⁵Кашицын А. С. – участие в обсуждении результатов.

⁶Усольцева Н. В. – грантовое обеспечение, общее руководство работой, анализ и обсуждение содержания статьи, редактирование текста статьи.

Contribution of the authors:

¹Akopova O. B. – development of the concept of scientific work and statement of the problem, obtaining calculated data and analyzing the results, writing the text of the article and creating a graphic abstract for it.

²Zharnikova N. V. – obtaining calculated data, participating in the discussion of the results, designing and editing the article, as well as illustrations for it.

³Bumbina N. V. – obtaining calculated data, participating in the discussion of the results, editing the list of references.

⁴Smirnova A. I. – participation in the discussion of the results, editing the text of the article in Russian and English.

⁵Kashitsyn A. S. – participating in the discussion of the results.

⁶Usol'tseva N. V. – funding and general management of the work, analysis and discussion of the content of the article, editing the text of the article.

Авторы заявляют об отсутствии конфликта интересов.

The authors declare no conflicts of interests.

¹<https://orcid.org/0000-0002-0413-022X>

²<https://orcid.org/0000-0002-8308-3029>

³<https://orcid.org/0000-0001-7352-9421>

⁴<https://orcid.org/0000-0002-5234-1283>

⁵orcid – отсутствующим

⁶<https://orcid.org/0000-0001-8963-8024>

Поступила 4.10.2022, одобрена 24.10.2022, принята 31.10.2022
Received 4.10.2022, approved 24.10.2022, accepted 31.10.2022