

УДК 532.783+547

О. Б. Аكوпова¹, М. И. Ковалёва¹, Н. В. Усолицева¹, Т. С. Капралова², Л. А. Онучак²

ИСПОЛЬЗОВАНИЕ МОЛЕКУЛЯРНЫХ ПАРАМЕТРОВ В ПРОГНОЗИРОВАНИИ МЕЗОМОРФИЗМА ЗВЕЗДООБРАЗНЫХ ДИСКОТИЧЕСКИХ ПРОИЗВОДНЫХ ТРИФЕНИЛЕНА

¹НИИ Наноматериалов, Ивановский государственный университет,
ул. Ермака, 39, 153025 Иваново, Россия. E-mail: akopov@dsn.ru

²Самарский национальный исследовательский университет им. академика С. П. Королёва,
Московское шоссе, 34, 443086 Самара, Россия. E-mail: burta86@mail.ru

Две новые серии звездообразных дискотических соединений (ЗДС) производных трифенилена с установленным (I) и неизвестным (II) типом мезоморфизма исследованы с целью проверки на серии I модифицированного метода прогнозирования мезоморфизма, характерного для дискотических мезогенов, и дальнейшего конструирования новых производных трифенилена с прогнозируемым типом мезоморфизма (серия II). Показана применимость данного метода для I серии, включающей 42 соединения. Достоверность прогноза установлена в пределах 83 %. Основываясь на полученных данных, провели моделирование II серии звездообразных производных трифенилена с оксадиазольными и хиральными фрагментами и с неизвестным типом мезоморфизма (20 соединений). Для них выполнены расчет, анализ молекулярных параметров и прогноз мезоморфизма с использованием оригинальной программы SMP ChemCard. У 14 соединений преимущественно с оксадиазольными фрагментами обнаружен положительный прогноз по проявлению мезоморфизма. Обнаружена также склонность соединений с оксадиазольными фрагментами к формированию геликоидальных структур.

Ключевые слова: звездообразные соединения, производные трифенилена, прогноз мезоморфизма, дискотические мезогены, оксадиазолы, хиральные фрагменты.

DOI: 10.18083/LCAppl.2016.4.91

О. В. Аكوпова¹, М. И. Kovaleva¹, N. V. Usol'tseva¹, T. S. Kapralova², L. A. Onuchak²

USING MOLECULAR PARAMETERS IN FORECASTING THE MESOMORPHISM OF STAR-SHAPED DISCOTIC TRIPHENYLENE DERIVATIVES

¹Nanomaterials Research Institute, Ivanovo State University,
39 Ermak St., Ivanovo, 153025, Russia. E-mail: akopov@dsn.ru

²Samara National Research University,
34 Moscow Shosse, Samara, 443086, Russia. E-mail: burta86@mail.ru

Two new series of star-shaped discotic compounds derivatives of triphenylene with the known (I) and unknown (II) types of mesomorphism were investigated to verify the modified method of forecasting the mesomorphism, characteristic for the discotic mesogens (for the series I), and to design the new derivatives of triphenylene with the predictable type of mesomorphism (for the series II). The applicability of this method for the series I, consisting of 42 compounds, was shown. The accuracy of the forecast is estimated within 83%. Based on these data, the simulation of the star-II series of triphenylene derivatives and oxadiazole with chiral fragments with the unknown type of mesomorphism (20 compounds) was performed. The calculation, the analysis and the prognosis of mesomorphism were done for them using the original program SMP ChemCard. The positive outlook for the mesomorphism

manifestation was revealed for 14 compounds, predominantly with oxadiazole fragments. Also we detected a tendency for compounds with oxadiazole fragments to form helical structures.

Key words: star-shaped compounds, triphenylene derivatives, prognosis of mesomorphism, disc-like mesogens, oxadiazoles, chiral fragments.

Введение

В последние годы активно развивается область создания самоорганизующихся функциональных наноматериалов, к которым относятся и жидкокристаллические звездообразные производные трифенилена, особенно те, которые включают оксадиазольные и другие гетероциклические фрагменты [1–8]. Такие соединения имеют широкие перспективы применения в нанoeлектронике, фотoluminesцентных приборах, в светоизлучающих диодах, солнечных батареях, сенсорных системах, хроматографии и др. [9–13, 16]. Однако их создание связано с большим объемом синтетических работ. Поэтому актуальным остается прогностический подход к синтезу подобных соединений [14–16]. Анализ работ по прогнозу мезоморфизма показал [16], что ученые работают в различных направлениях моделирования мезоморфного состояния вещества. Зачастую модели, предлагаемые большинством из теорий и исследуемые численными методами, требуют значительных вычислительных затрат, оперируют большим числом эмпирических параметров, не всегда могут прогнозировать весь спектр фазовых переходов, практически не учитывают особенности молекулярного строения соединений. Безусловно, все это в определенной мере ограничивает их прогностическую способность и широкое применение. Для своих исследований нами выбрана модель прогнозирования мезоморфизма, которая исходит из особенностей строения единичных молекул [14–16]. Эта модель предполагает расчет и анализ молекулярных параметров (MP): K , K_c , K_p , K_a , K_s , M_m , M_r и прогноз мезоморфизма по ним с помощью оригинальной компьютерной программы [15]. Метод имеет ряд преимуществ перед известными способами, поскольку требует небольших затрат машинного времени при относительно высокой прогностической способности (от 70 до 90 % и выше) и простоте его использования. С помощью этого метода можно проводить поиск новых DM с различными типами мезоморфизма. В дальнейшем эта методика была частично модифицирована [17, 18] и использована

нами в прогнозе мезоморфизма у звездообразных дискотических соединений различного строения [19, 20]. В работе [17] было установлено, что для прогноза мезоморфизма у $ЗДС$ наиболее информативным является молекулярно-массовый параметр (M_m), который показывает соотношение масс центра и периферии молекулы. Кроме того, для достоверности прогноза был введен дополнительный молекулярный параметр, учитывающий длину спейсера, соединяющего центр с периферией молекулы [18].

Эксперимент

Испытуемая серия состояла из 42 соединений и включала 17 немезогенных веществ, 19 соединений с мезоморфизмом, характерным для дискотических мезогенов, и 6 – с мезоморфизмом, характерным для каламитных мезогенов – KM (1–35). Все соединения являлись звездообразными производными трифенилена с установленным типом мезоморфизма [2–8], часть из них имела в своей структуре гетероциклические фрагменты (рис. 1).

Как уже отмечалось выше, для исследований был выбран метод моделирования и прогнозирования мезоморфизма у дискотических соединений с помощью молекулярных параметров (MP) единичных молекул [11–13], рассчитываемых с использованием оригинальной программы *СМР ChemCard* [12]. Построение и оптимизацию геометрии молекул проводили с применением пакета программ *HyperChem* и метода молекулярной механики MM^+ . По условиям данного метода прогнозирования существенное отклонение хотя бы одного из расчетных значений MP от граничных значений классификационного ряда (1) свидетельствует о неспособности соединения к формированию мезофаз, характерных для DM . В случае незначительного отклонения расчетных значений MP можно ожидать проявления латентного мезоморфизма.

$$\begin{aligned} K &= 2,0-8,5; K_c = 1,0-2,6; K_p = 0,20-0,75; \\ K_s &= 0,25-1,00; M_m = 0,2-0,8; \\ M_r &= 0,15-0,80; K_{ar} = 0,08-0,30 \end{aligned} \quad (1)$$

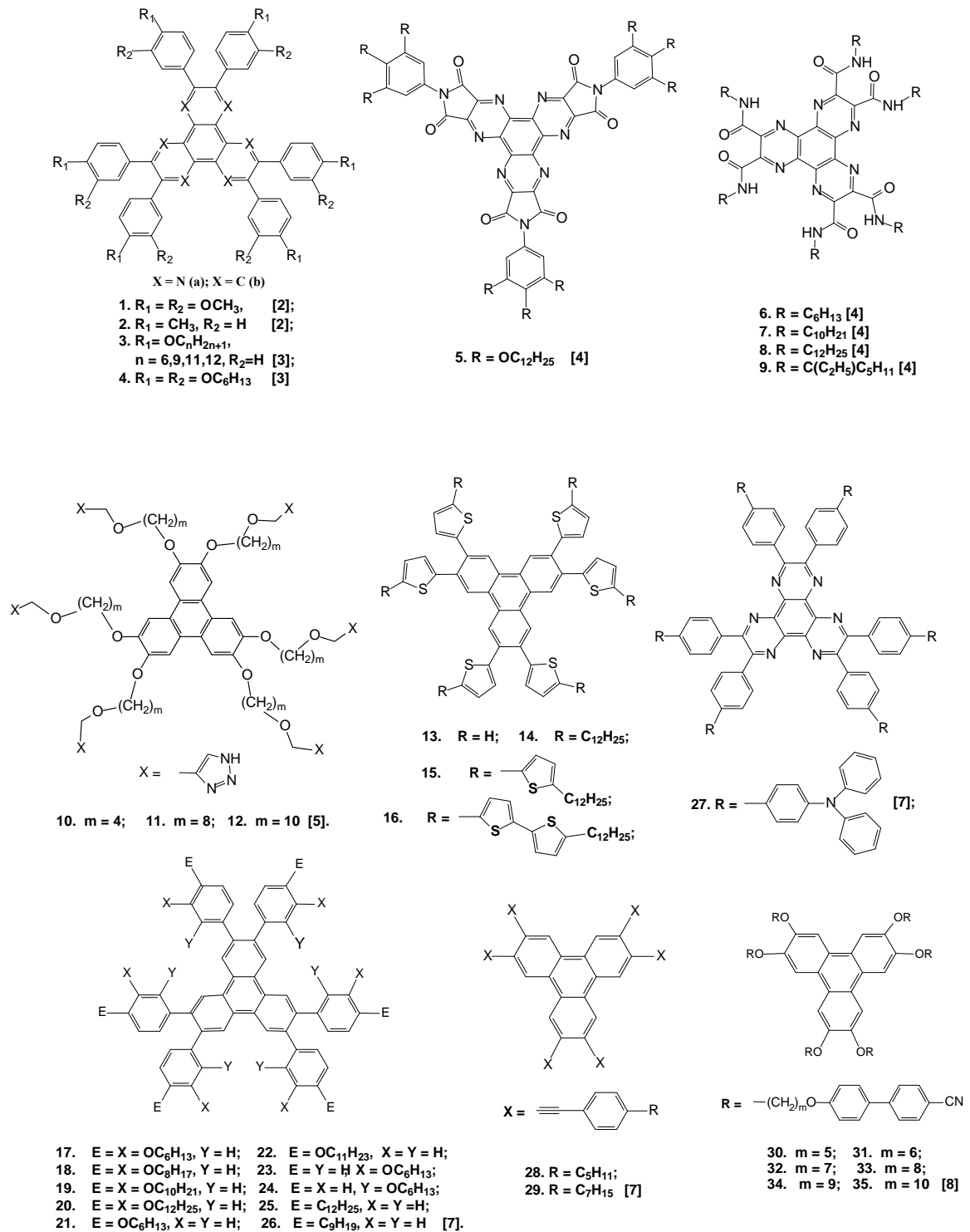


Рис. 1. Представители звездообразных производных трифенилена с установленным типом мезоморфизма

Исследовался один из алгоритмов деления молекулярной структуры звездообразного соединения, по которому в центральную часть (ЦЧ) включены гетероатомы и жесткие фрагменты

спейсеров, прилегающие к ЦЧ (рис. 2, а). Гибкие углеводородные цепочки и удаленные жесткие фрагменты спейсеров были включены в периферийную часть молекулы (рис. 2, б).

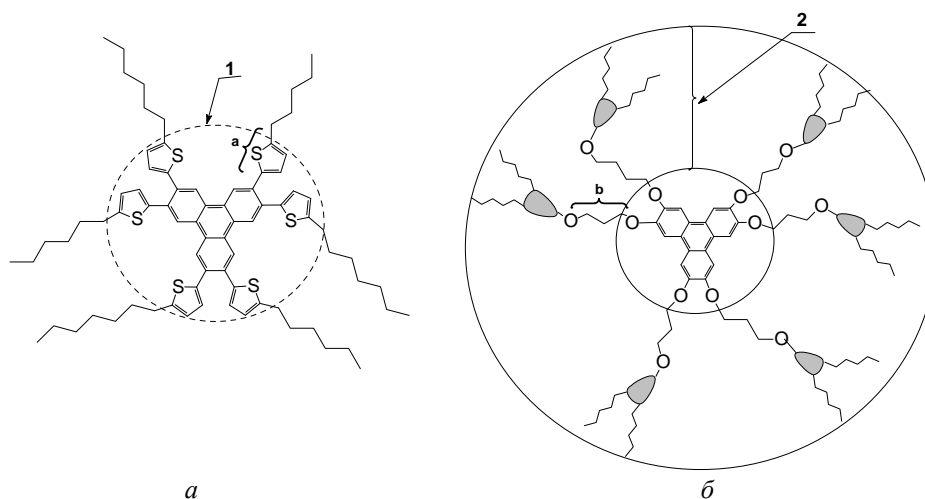


Рис. 2. Алгоритм деления звездообразных производных трифенилена на центр и периферию:
 а – 1 – жесткий фрагмент спейсера (а) включен в центральную часть,
 б – 2 – гибкий спейсер $-(CH_2)_m-O-$ (б) и жесткий фрагмент ◐ включены в периферийную часть

Расчет MP и прогноз мезоморфизма выполнялся с помощью оригинальной программы *СМР ChemCard*, которая позволяет в автоматическом режиме получать результаты прогноза мезоморфизма при введении молекулярных характеристик того или иного

соединения: массы центра и периферии, длины и ширины центрального фрагмента, длины периферийной части, максимальной длины молекулы и т. д. [15] На рис. 3 приведен пример результатов прогноза с использованием этой программы.

Библиография		Luo J., Zhao B., Sze on Chan H., Chi C. J.Mater. Chem. 2010. Vol. 20. P. 1932 - 1941.		Мезоморфизм:	
Название соединения		Производное олиготиофена и трифенилена		Да	
Краткое обозначение		Соединение (15)		Общий	
Брутто формула		C138H180S12; E=329.99 ккал/моль; Cr < Tr-Col - 85 I		Нематический	
Брутто формула ядра	C42H18S6	Mc	714.9823		
Брутто периферии	C96H162S6	Mp	1508.7035		
Длина центра - lc	15.19	Mm	0.4739		
Ширина центра - bc	15.12	Ml	0.2370		
Длина периферии - lp	19.99	Ks	0.5000		
Толщина молекулы - s	20.88	Kc	1.0046		
Lm	48.24	Kp	0.3799		
N	6	K	2.3103		
Nmax	12	Kar	0.1195		
N(pi+n)c		Ke			
N(pi+n)p					

Рис. 3. Пример расчета MP с помощью *СМР ChemCard* и результаты прогноза мезоморфизма для соединения 15

Результаты и обсуждение

Результаты расчета молекулярных параметров MP и прогноза мезоморфизма по ним

в сравнении с известными из литературы экспериментальными данными представлены в табл. 1.

Таблица 1. Молекулярные параметры и прогноз мезоморфизма звездообразных производных трифенилена (1–35) в сравнении с экспериментальными данными

№ п/п	Соединение	E_{opt}	M_m	M_r	K_p	K	K_{ar}	P	Ξ	[]	M_{Sps}
1	2	3	4	5	6	7	8	9	10	11	12
1	1a	113,15	4,82'	3,22'	4,44'	3,86	0,37'	–	–	[2]	0,52
2	1b	132,17	4,79'	3,20'	4,50'	3,93	0,36'	–	–	«--»	0,44
3	2a	93,19	6,39'	2,13'	4,44'	4,74	0,18	–	–	«--»	0,68
4	2b	111,07	7,52'	2,51'	0,17'	4,88	0,14	–	–	«--»	0,59
5	3a, n = 9	131,07	0,90'	0,30	0,66	2,17	0,17	–	–	[2,3]	0,32
6	3b, n = 6	133,85	1,33'	0,44	0,92'	3,18	0,18	–	–	[3]	0,38
7	3b, n = 9	152,38	0,89'	0,30	0,49	2,70	0,10	–	–	[2,3]	0,32
8	3b, n = 11	161,95	0,74	0,25	0,66	2,56	0,13	+	–	[3]	0,29
9	3b, n = 12	168,51	0,67	0,22	0,48	2,49	0,14	+	–	«--»	0,27
10	4a	136,78	0,85'	0,57	1,08'	2,67	0,32'	–	+	[2]	0,24
11	4b	166,25	0,84'	0,56	1,09'	2,33	0,32'	–	+	«--»	0,24
12	5	198,55	0,53	0,53	0,61	2,72	0,18	+	+	[4]	0,10''
13	6	63,82	0,67	0,67	0,52	4,38	0,21	+	+	«--»	0,23
14	7	86,01	0,57	0,57	0,42	3,10	0,17	+	+	«--»	0,17
15	8	97,90	0,47	0,47	0,35	2,50	0,16	+	+	«--»	0,15
16	9	86,76	0,71	0,71	0,66	2,92	0,28	+	+	«--»	0,19
17	10	155,94	0,34	0,17	0,43	3,87	0,18	+	+	[5]	0,27''
18	11	176,59	0,25	0,13	0,30	7,80	0,16	±	+	«--»	0,21
19	12	187,00	0,22	0,11	0,26	8,14	0,15	±	+	«--»	0,18
20	13	169,76	38,74'	19,37'	7,23'	5,49	0,34'	–	–	[6]	0,66
21	14	221,97	0,72	0,36	0,47	2,51	0,14	+	–	«--»	0,29
22	15	329,99	0,48	0,24	0,38	2,31	0,12	+	+	«--»	0,44''
23	16	439,51	0,36	0,18	0,32	2,85	0,10	+	+	«--»	0,54''
24	17	164,33	0,85'	0,56	0,92'	2,79	0,36'	–	+	[7]	0,24
25	18	82,87	0,64	0,42	0,83	5,13	0,30	±	+	«--»	0,20
26	19	96,05	0,51	0,34	0,68	2,60	0,28	+	+	«--»	0,18
27	20	109,20	0,43	0,28	0,57	3,63	0,26	+	+	«--»	0,16
28	21	135,90	1,52'	0,51	1,09'	3,97	0,16	–	–	«--»	0,36
29	22	80,27	0,83	0,28	0,62	7,13	0,13	±	–	«--»	0,27
30	23	133,47	1,52'	0,51	0,95'	1,51'	0,18	–	–	«--»	0,36
31	24	109,63	1,52'	0,51	1,05'	1,54'	0,16	–	–	«--»	0,36
32	25	76,74	0,67	0,22	0,48	3,50	0,14	+	–	«--»	0,27
33	26	59,95	0,89'	0,30	0,63	3,78	0,16	–	–	«--»	0,32
34	27	253,74	0,52	0,17	0,81	3,14	0,24	±	+	«--»	0,46''
35	28	94,77	0,42	0,21	0,76	7,15	0,20	+	+	«--»	0,48''
36	29	104,94	0,35	0,17	0,61	6,51	0,18	+	+	«--»	0,42''
37	30	170,20	0,20	0,10'	0,27	4,99	0,14	±	– ^{a)}	[8]	0,27
38	31	176,07	0,19'	0,10'	0,25	3,89	0,14	–	– ^{a)}	«--»	0,30
39	32	181,16	0,18'	0,09'	0,24	4,18	0,13	–	– ^{a)}	«--»	0,33
40	33	186,97	0,17'	0,09'	0,22	4,16	0,13	–	– ^{a)}	«--»	0,36
41	34	192,09	0,16'	0,08'	0,21	4,30	0,12	–	– ^{a)}	«--»	0,38
42	35	198,44	0,16'	0,08'	0,20	2,69	0,12	–	– ^{a)}	«--»	0,40

Примечание: $K_s = 0,33; 0,5$ или $1,0$; ' – штрихом отмечены MP , выходящие за границы классификационного ряда (1); ^{a)} – наблюдается нематический мезоморфизм, характерный для каламитных ЖК (N_K). Светло-серым выделены ячейки с совпадающими отрицательными данными по прогнозу и эксперименту; темно-серым – с совпадающими положительными данными по прогнозу и эксперименту. “ – выделены значения параметра M_{Sps} , выходящие за граничные значения его классификационной области

Анализ данных (табл. 1, колонки 9, 10) показывает, что в основном результаты прогноза хорошо коррелируют с экспериментом, что свидетельствует о правомерности примененного нами прогностического подхода к таким звездообразным соединениям. Достоверность прогноза находится на уровне 77 %. Для повышения достоверности прогноза мы рассчитали также дополнительный молекулярный параметр M_{Sps} , учитывающий вклад молекулярной массы всех спейсеров, соединяющих центр с периферией, в молекулярную массу молекулы в

целом (табл. 1, колонка 12). В работе [18] было определено, что он является наиболее информативным из двух рассматриваемых параметров для учета вклада спейсеров в возможность проявления колончатого мезоморфизма. Классификационная область находится в пределах от 0,15 до 0,25 {2}. Действительно, в нашем случае расчетные данные по параметру M_{Sps} привели к увеличению достоверности прогноза до 83 %. Полученные результаты позволяют провести поиск новых звездообразных производных трифенилена, проявляющих колончатый мезоморфизм и способность формировать геликоидальные структуры в мезофазе.

Во второй серии исследовались два новых типа производных трифенилена. Один тип включал звездообразные производные трифенилена только с хиральными фрагментами (36, шесть четных гомологов), другой – производные с оксадиазольными и хиральными фрагментами (37, тринадцать соединений) (рис. 4).

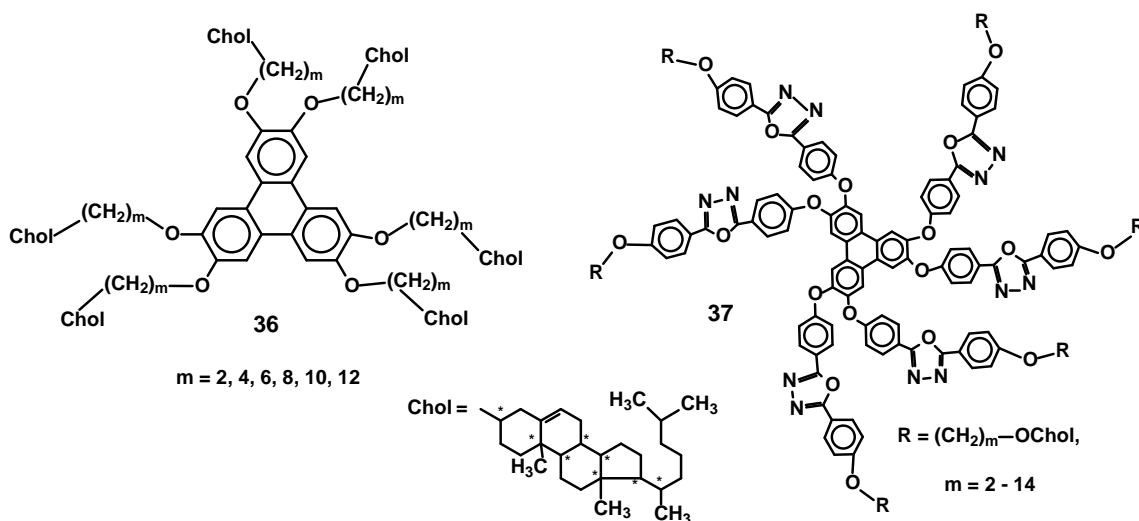


Рис. 4. Новые звездообразные производные трифенилена с неустановленным типом мезоморфизма: 36 – с хиральными фрагментами; 37 – с оксадиазольными и хиральными фрагментами

В табл. 2 и 3 приведены результаты расчета MP и прогноза по ним мезоморфизма звездообразных производных трифенилена 36 и 37. Как показал проведенный анализ данных табл. 2 и 3, у тринадцати соединений была выявлена вероятность к формированию колончатых мезофаз. Следует отметить также, что у большего числа членов гомологического ряда 37 обнаружена склонность к формированию колончатого мезомор-

физма. Предварительные расчеты и анализ MP , позволяющие определить склонность данных соединений к формированию геликоидальных структур, показали большую вероятность проявления таких свойств у производных трифенилена с оксадиазольными и хиральными фрагментами (37), чем у их аналогов без оксадиазольных фрагментов (36). Более подробно об этих результатах будет сообщено дополнительно.

Таблица 2. Молекулярные параметры и прогноз мезоморфизма, характерного для ДМ, звездообразных производных трифенилена (36)

<i>m</i>	$E_{\text{опт}}$, ккал/моль	M_m	M_r	K_p	K	K_{ar}	P
2	280,07	0,26	0,13	0,49	2,23	0,26	+
4	332,05	0,34	0,17	0,61	2,22	0,22	+
6	341,06	0,41	0,21	0,77	2,29	0,20	+
8	350,55	0,49	0,24	0,92	2,22	0,18	–
10	364,48	0,57	0,28	1,10	2,53	0,16	–
12	375,88	0,64	0,32	1,25	2,05	0,14	–

Таблица 3. Молекулярные параметры и прогноз мезоморфизма, характерного для ДМ, звездообразных производных трифенилена (37)

<i>m</i>	$E_{\text{опт}}$, ккал/моль	M_m	M_r	K_p	K	K_{ar}	P
2	583,99	0,76	0,38	0,79'	2,02	0,113	±
3	588,67	0,73	0,37	0,73	2,37	0,109	+
4	590,80	0,71	0,35	0,72	2,53	0,102	+
5	598,70	0,68	0,34	0,68	2,70	0,098	+
6	602,38	0,66	0,33	0,66	3,07	0,097	+
7	607,80	0,64	0,32	0,62	3,41	0,094	+
8	611,92	0,62	0,31	0,60	2,96	0,090	+
9	618,72	0,60	0,30	0,57	2,73	0,088	+
10	622,73	0,59	0,29	0,54	2,43	0,086	+
11	626,36	0,57	0,28	0,52	2,93	0,084	+
12	633,87	0,56	0,28	0,50	3,12	0,081	+
13	634,24	0,54	0,27	0,48	2,87	0,80	+
14	641,71	0,53	0,26	0,46	2,96	0,077'	±

Примечание: $K_s = 0,5$ – для всех соединений ряда. Параметр K_c изменяется от 1,0 до 1,04. ' – штрихом отмечены значения MP с незначительным их отклонением от граничных значений классификационного ряда

Заключение

Получены данные по прогнозу мезоморфизма для двух новых серий звездообразных дискотических производных трифенилена.

Для первой серии известных мезогенов (42 соединения) с использованием нового молекулярного параметра подтверждена применимость метода прогнозирования мезоморфизма, характерного для дискотических мезогенов, к звездообразным дискотическим производным трифенилена с достоверностью 83 %.

Для второй серии соединений получены данные по прогнозу мезоморфизма у новых звездообразных производных трифенилена с

оксадиазольными и хиральными фрагментами и неустановленным типом мезоморфизма (20 соединений). У 14 соединений преимущественно с оксадиазольными фрагментами по прогнозу обнаружена способность к проявлению колончатого мезоморфизма.

Работа поддержана грантом Минобрнауки РФ № 4.106.2014/К (проектная часть) и частично выполнена при финансовой поддержке РФФИ № 16-33-50069 мол_нр.

Список литературы / References

1. Wöhrle T., Wurzbach I., Kirres J., Kostidou A., Kapernaum N., Litterscheidt J., Haenle J. C., Sraffeld P., Baro A., Giesselmann F., Laschat S. Discotic Liquid

- Crystals. *Chem. Rev.*, 2016, **116** (3), 1139–1241. DOI: 10.1021/acs.chemrev.5b00190.
2. Arikainen E.O., Boden N., Bushby R.J., Lozman O.R., Vinter J.G., Wood A. Complimentary Polytopic Interactions. *Angew. Chem. Int. Ed.* 2000, **39** (13), 2333–2336.
 3. Boden N., Bushby R. J., Headdock G., Lozman O. R., Wood A. Syntheses of new «large core» discogens based on the triphenylene, azatriphenylene and hexabenztrinaphthylene nuclei. *Liq. Cryst.*, 2001, **28** (1), 139–144. DOI: 10.1080/026782901462472.
 4. Kayal H.S. Design and synthesis of novel discotic liquid crystals. *A Dissertation the Degree of Doctor of Philosophy*. University of Windsor, Ontario, Canada, 2012. 192 p.
 5. Basak D., Christensen S., Surampudi S.K., Versec C., Toscano D.T., Tuominen M.T., Hayward R.C. Proton conduction in discotic mesogens. *Chem. Commun.* 2011, **47**, 5566–5568. DOI: 10.1039/c1cc10509d.
 6. Luo J., Zhao B., Sze on Chan H., Chi C. Synthesis, physical properties and self-assembly of star-shaped oligothiophenes-substituted and fused triphenylenes. *J. Mater. Chem.* 2010, **20**, 1932–1941.
 7. Detert H., Lehmann M., Meier H. Star-shaped conjugated systems. *Materials*. 2010, **3**, 3218–3330. DOI: 10.3390/ma3053218.
 8. Imrrie C.T., Lu Z., Picken S.J., Yildirim Z. Oligomeric rod-disk nematic liquid crystals. *Chem. Commun.* 2007, 1245–1247.
 9. Соцкий В. В. Опыт применения графических контроллеров к решению задач молекулярной динамики // *Жидк. крист. и их практич. использ.* 2011. Вып. 3(37). С. 76–83. [Sotsky V. V. Experience in GPU applying to molecular dynam // *Zhidk. krist. ikh prakt. ispol'z. = Liq. Cryst. and their Appl.* 2011, 3, 76–83. (in Russ.)].
 10. Laschat S., Baro A., Steinke N., Giesselmann F., Hagele C., Scalia G., Judele R., Kapatsina E., Schreivogel A., Sauer S., Toson M. Discotic liquid crystals: from tailor-made synthesis to plastic electronics. *Angew. Chem. Intern. Ed.* 2007, **46** (26), 4832–4887. DOI: 10.1002/anie.200604203.
 11. Cristiano R., Oliveira Santos D.M.P.D., Gallardo H. Synthesis and characterization of low molecular mass luminescent liquid crystalline materials with 1,3,4-oxadiazole units. *Liq. Cryst.* 2005, **32** (1), 7–14.
 12. Wang Ch., Dong H., Hu W., Liu Y., Zhu D. Semiconducting π -conjugated systems in field-effect transistors: a material odyssey of organic electronics. *Chem. Rev.*, 2012, **112** (4), 2208–2267. DOI: 10.1021/cr100380z.
 13. Organic Optoelectronics / Ed. by Hu. Wenping. Wiley-VCH Verlag GmbH & Co. KGaA, Germany, 2013. 507 p.
 14. 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. [Акопова О.В., Pestov S.M. Progress in the design and synthesis of chiral discotic mesogens. *Zhidk. krist. ikh prakt. ispol'z. = Liq. Cryst. and their Appl.* 2012, 4, 20–33 (in Russ.)].
 15. Акопова О. Б., Акопов Д. А. Программа для ЭВМ «СМР ChemCard». № Гос. рег. 2012610165, 10.01.2012. [Акопова О.В., Акопов Д.А. Programme for IBM «СМР ChemCard». № Gos. Reg. 2012610165, 10.01.2012. (in Russ.)].
 16. Акопова О. Б., Ковалёва М. И. Молекулярный дизайн и синтез звездообразных дискотических мезогенов гетероциклической природы // *Жидк. крист. и их практич. использ.* 2014. Т. 14, № 2. С. 21–57. [Акопова О.В., Kovaleva M.I. Molecular design and synthesis of heterocyclic star-shaped discotic mesogens. *Zhidk. krist. ikh prakt. ispol'z. = Liq. Cryst. and their Appl.* 2014, **14** (2), 21–57 (in Russ.)].
 17. Ковалёва М. И., Акопова О. Б. Звездообразные дискотические мезогены // Матер. VII студ. Междунар. заочн. науч.-практ. конф. Новосибирск : Изд-во СибАК, 2013. С. 222–233. [Kovaleva M.I., Akopova O.B. Star-shaped discotic mesogens. *Materials VII stud. Intern. zaoch. scientific-practical. conf.* Novosibirsk, 2013, 222–233 (in Russ.)]. <http://www.sibac.info/>
 18. Ковалёва 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. [Kovaleva M.I., Akopova O.B. Application of molecular parameters in forecasting of mesomorphism of heterocyclic star-shaped discotic compounds. *Zhidk. krist. ikh prakt. ispol'z. = Liq. Cryst. and their Appl.* 2015, **15** (2), 94–101 (in Russ.)].
 19. Ковалёва М.И., Акопова О.Б. Вестник молодых ученых ИвГУ. Приложение к журналу «Вестник ИвГУ». 2015. Вып. 15. С. 5–8. [Kovaleva M.I., Akopova O.B. Bulletin of young scientists IvSU. Supplement to the journal «Bulletin of IvSU». 2015, 15, 5–8 (in Russ.)].
 20. Ковалёва М. И., Акопова О. Б., Груздев М. С. Конструирование, прогноз мезоморфизма и синтез звездообразных производных трифенилена // *Жидк. крист. и их практич. использ.* 2013. Вып. 4. С. 73–80. [Kovaleva M.I., Akopova O.B., Gruzdev M.S. Design, prognosis of mesomorphism and synthesis of star-shaped triphenylene derivatives. *Zhidk. krist. ikh prakt. ispol'z. = Liq. Cryst. and their Appl.* 2013, 4, 73–80 (in Russ.)].

Поступила в редакцию 20.10.2016 г.
Received 20 October 2016