

ISSN 1561-8331 (Print)  
ISSN 2524-2342 (Online)

**АРГАНІЧНАЯ ХІМІЯ**  
**ORGANIC CHEMISTRY**

УДК 547.576+547.786+547.788  
<https://doi.org/10.29235/1561-8331-2020-56-1-67-74>

Поступила в редакцию 15.01.2019  
Received 15.01.2019

**Е. А. Дикусар<sup>1</sup>, Л. Н. Филиппович<sup>1,2</sup>, С. Н. Шахаб<sup>1,2</sup>, С. К. Петкевич<sup>1</sup>, С. Г. Стёпин<sup>3</sup>**

<sup>1</sup>*Институт физико-органической химии Национальной академии наук Беларуси, Минск, Беларусь*

<sup>2</sup>*Институт химии новых материалов Национальной академии наук Беларуси, Минск, Беларусь*

<sup>3</sup>*Витебский государственный ордена Дружбы народов медицинский университет, Витебск, Беларусь*

**(E,E)-ДИАЗОМЕТИНЫ НА ОСНОВЕ НАФТАЛИН-1,5-ДИАМИНА  
И ИЗУЧЕНИЕ ИХ ПОЛЯРИЗАЦИОННЫХ СВОЙСТВ**

**Аннотация.** Жидкокристаллические устройства широко используются в измерительном приборостроении, бытовой и промышленной электронике, медицинской, научной и военной технике. Производство этих устройств является перспективной и развивающейся отраслью промышленности. Анализ рынка жидкокристаллических устройств позволяет утверждать, что спрос на пленочные поляризаторы пропускающего, отражающего и пропускающе-отражающего типов будет возрастать в связи с постоянным ростом выпуска жидкокристаллических индикаторов и расширением сфер их применения. Исследования, направленные на создание пленочных поляризаторов различного функционального назначения и на разработку технологий их изготовления, актуальны. Нафталин-1,5-диамин широко применяется в производстве сложных промежуточных полупродуктов, красителей, химических добавок к полимерам, фармацевтических препаратов, пестицидов и др. Нафталин-1,5-диамин является доступным исходным соединением для получения на его основе перспективных соединений при создании оптических материалов и биологически активных соединений. Взаимодействием нафталин-1,5-диамина с замещенными альдегидами или бензальдегидами ванилинового ряда в среде кипящего абсолютного метанола в присутствии каталитических количеств ледяной уксусной кислоты были синтезированы (E,E)-азометины с выходами 75–87 %.

**Ключевые слова:** нафталин-1,5-диамин, альдегиды, (E,E)-дiazометины, красители, квантово-химические расчеты, моделирование, жидкокристаллические индикаторы, поляризационные свойства

**Для цитирования.** (E,E)-дiazометины на основе нафталин-1,5-диамина и изучение их поляризационных свойств / Е. А. Дикусар [и др.] // Вест. Нац. акад. наук Беларусі. Сер. хім. навук. – 2020. – Т. 56, № 1. – С. 67–74. <https://doi.org/10.29235/1561-8331-2020-56-1-67-74>

**Evgenij A. Dikusar, Liudmila N. Filippovich, Siyamak N. Shahab, Sergey K. Petkevich, Svjatoslav G. Stepin**

<sup>1</sup>*Institute of Physical Organic Chemistry of the National Academy of Sciences of Belarus, Minsk, Belarus*

<sup>2</sup>*Institute of Chemistry of New Materials of the National Academy of Sciences of Belarus, Minsk, Belarus*

<sup>3</sup>*Vitebsk State Order of Peoples' Friendship Medical University, Vitebsk, Belarus*

**(E,E)-DIAZOMETHINES BASED ON NAPHTHALENE-1,5-DIAMINE  
AND THE STUDY OF THEIR POLARIZATION PROPERTIES**

**Abstract.** Liquid crystal devices are widely used in measuring instrumentation, consumer and industrial electronics, medical, scientific and military equipment. The production of these devices is a promising and developing industry. Analysis of the market of liquid crystal devices suggests that the demand for film polarizers of transmission, reflection and transmission-reflection types will increase due to the constant growth of production of liquid crystal indicators and the expansion of their applications. Studies aimed at the creation of film polarizers for various functional purposes and the development of technologies for their manufacture are relevant. Naphthalene-1,5-diamine widely used in the production of complex intermediate intermediates, dyes, chemical additives to polymers, pharmaceuticals, pesticides, etc. Naphthalene-1,5-diamine is an available starting compound for obtaining on its base promising substances for the development of optical materials and biologically active compounds. By interaction of naphthalene-1,5-diamine with substituted aldehydes or benzaldehydes of vanillin series in the medium of boiling absolute methanol in the presence of catalytic amounts of glacial acetic acid, (E,E)-diazomethines with yields of 75–87 % were synthesized.

**Keywords:** naphthalene-1,5-diamine, aldehydes, (*E,E*)-diazomethines, dyes, quantum-chemical calculations, simulation, liquid crystal displays, polarization properties

**For citation.** Dikusar E. A., Filippovich L. N., Shahab S. N., Petkevich S. K., Stepin S. G. (*E,E*)-diazomethines based on naphthalene-1,5-diamine and the study of their polarizability properties. *Vesti Natsyyanal'nai akademii navuk Belarusi. Seryya khimichnykh navuk = Proceedings of the National Academy of Sciences of Belarus. Chemical series*, 2020, vol. 56, no. 1, pp. 67–74 (in Russian). <https://doi.org/10.29235/1561-8331-2020-56-1-67-74>

Жидкокристаллические устройства широко используются в измерительном приборостроении, бытовой и промышленной электронике, медицинской, научной и военной технике. Производство этих устройств является перспективной и развивающейся отраслью промышленности. Анализ рынка жидкокристаллических устройств позволяет утверждать, что спрос на пленочные поляризаторы пропускающего, отражающего и пропускающе-отражающего типов будет возрастать в связи с постоянным ростом выпуска жидкокристаллических индикаторов и расширением сфер их применения. Исследования, направленные на создание пленочных поляризаторов различного функционального назначения, актуальны [1–8].

1,5-Диаминонафталин **1** широко применяется в производстве сложных промежуточных полупродуктов, красителей, химических добавок к полимерам, фармацевтических препаратов, пестицидов и др. Нафталин-1,5-диамин **1** служит доступным исходным соединением для получения на его основе перспективных соединений для создания оптических материалов и биологически активных соединений. Взаимодействием нафталин-1,5-диамин **1** с замещенными альдегидами или бензальдегидами ванилинового ряда в среде кипящего абсолютного метанола в присутствии каталитических количеств ледяной уксусной кислоты синтезированы (*E,E*)-азометины **2–21** с выходами 75–87 %.

Состав и строение соединений **2–21** были установлены на основании данных ИК-, хромато-масс-спектрометрии или элементного анализа, а также ЯМР  $^1\text{H}$ - и  $^{13}\text{C}$ -спектроскопии соединений **9**, **17**, **21**. (*E,E*)-Диазометины **2–21** обладают интенсивной желтой или оранжевой окраской, что позволяет применять эти соединения и пленки на их основе в качестве красителей и оптических фильтров [9].

Путем квантово-химических расчетов с использованием метода DFT с применением уровня теории B3LYP/MIDI и программного пакета GAMESS [10], базисного набора MIDI [11] были установлены наиболее термодинамически устойчивые изомеры соединений **2**, **5**, **8**, **11**, **13**, **18**. В процессе расчетов проводили полную оптимизацию всех геометрических параметров до достижения минимумов полных электронных энергий (*E,E*)-, (*E,Z*)- и (*Z,Z*)-дизометринов **2** (рис. 1) и **5**, **5**, **8**, **11**, **13**, **18**. Полные энергии систем (*E*, а.е.), вычисленные методом DFT, и дипольные моменты (*D*, Дб) приведены в таблице.

Квантово-химические расчеты показали, что наиболее термодинамически устойчивыми являются (*E,E*)-конфигурационные изомеры соединений **2**, **5**, **8**, **11**, **13**, **18**. (*E,E*)-изомеры на ~22,4–66,2 кДж/моль более устойчивы, чем их соответствующие (*Z,Z*)-изомеры, а (*E,E*)-конфигурации устойчивее, чем (*E,Z*)-конфигурации на ~11,5–43,2 кДж/моль. Данные по расчетам дипольных моментов демонстрируют закономерное увеличение полярности изомеров при переходе от (*E,E*)- к (*E,Z*)-конфигурациям.

Диазометинам **2–21** приписана (*E,E*)-конфигурация на основании анализа ЯМР  $^1\text{H}$  и  $^{13}\text{C}$ -спектров соединений на примере соединений **9**, **17**, **21** и сравнения полученных данных со спектрами других азометринов [12]. Возможность перехода (*E,E*)-дизометринов **2–21** в другие конфигурации (*E,Z*-, *Z,E*-, *Z,Z*-) позволяет использовать их для создания оптических материалов и сенсорных датчиков, обладающих термо- и фототропными свойствами [13].

Молекулы эффективных дихроичных красителей для поляризаторов обычно содержат достаточно длинную цепочку из сопряженных двойных ( $-\text{N}=\text{N}-$ ,  $>\text{C}=\text{C}<$ ,  $-\text{N}=\text{C}<$ ) связей, направленную вдоль молекулярной оси. От длины цепи сопряжения и наличия ауксохромных групп ( $-\text{OH}$ ,  $-\text{OAlk}$ ,  $-\text{NH}_2$ ,  $-\text{NO}_2$ ,  $-\text{COOH}$  и др), оказывающих поляризующее влияние на единую  $\pi$ -электронную систему, зависит энергия возбуждения молекулы и, как результат, интенсивность, и положение полосы длинноволнового поглощения [14]. Значительное влияние на поглощение света органическими соединениями оказывает пространственное расположение функциональных групп

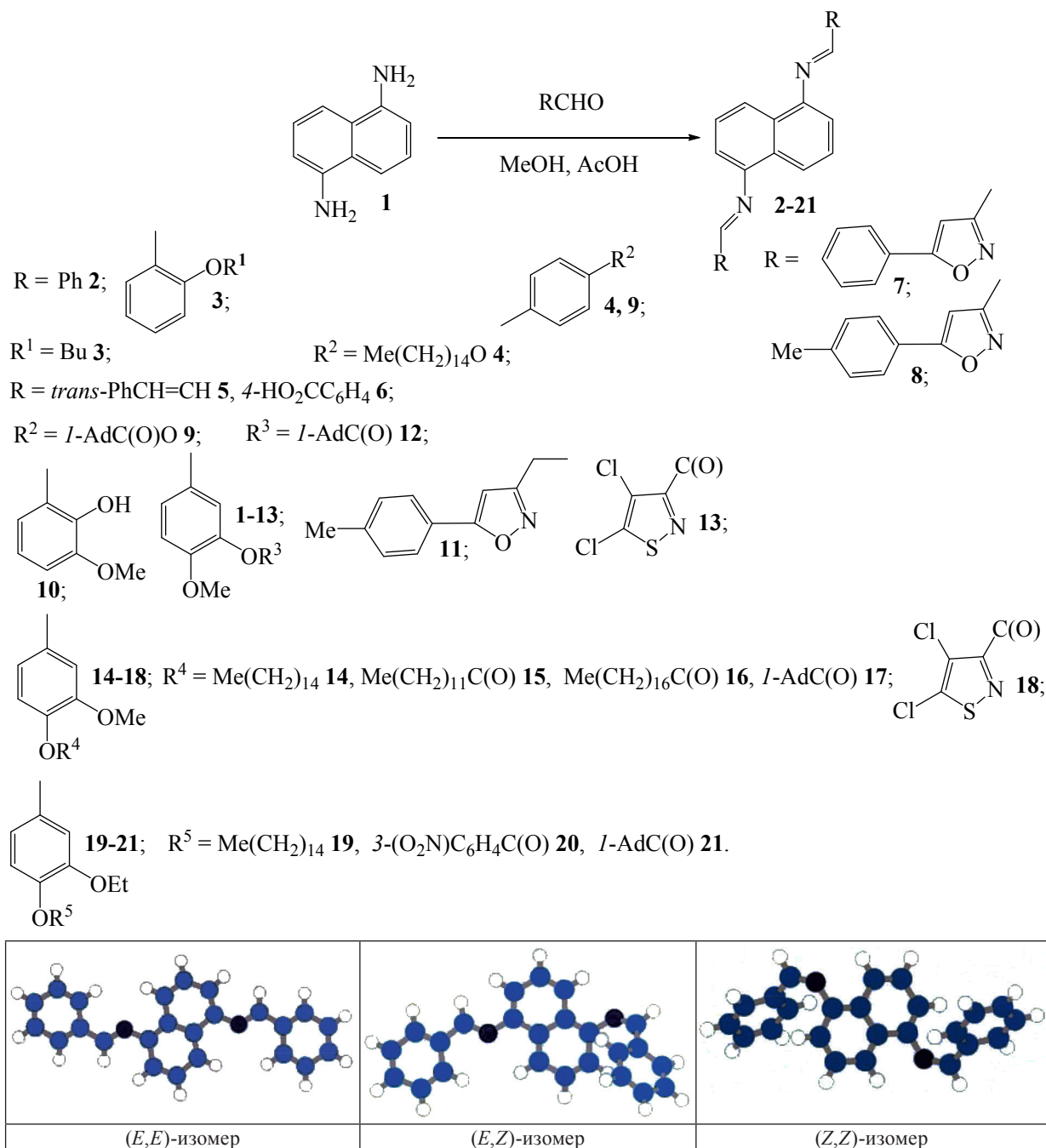


Рис. 1. Квантово-химические модели *(E,E)*-, *(E,Z)*- и *(Z,Z)*-конфигураций диазометина **2**  
 Fig. 1. Quantum-chemical models of *(E,E)*-, *(E,Z)*- and *(Z,Z)*-configurations of diazomethine **2**

в их молекулах. Если молекула расположена в одной плоскости (копланарно), то происходит перекрывание облаков  $\pi$ -электронов и облегчается их смещение по цепочке сопряженных двойных связей [15]. На рис. 2 представлены дихроичные спектры светопропускания ПВС-пленок, окрашенных соединениями **6**, **10**.

Пленки формировали из полимерных растворов, в которых оптимальное соотношение компонентов составляло (мас.%): 9–10 поливиниловый спирт (ПВС) (150 кДа, Mowiol 28–99, Германия), 4,0–4,5 ДМФА, 5,0–7,5  $\text{C}_2\text{H}_5\text{OH}$ , 0,05–0,10  $\text{H}_3\text{BO}_3$ , 2,8–3,0 глицерин, 0,04 краситель и до 100 %  $\text{H}_2\text{O}$ . Ориентацию пленок осуществляли путем их одноосной механической вытяжки в растворе борной кислоты. Из дихроичных спектров светопропускания окрашенных пленок была рассчитана их поляризующая способность (ПС). Наибольшая ПС, равная 68 % при 408 нм, наблюдалась

у пленки, окрашенной соединением **6**, а ПС пленки, окрашенной **10**, значительно ниже (16 % при 401 нм) (рис. 2, *a* и *b*). Этот факт обусловлен более упорядоченным распределением красителя в среде полимера [15], чему способствует межмолекулярное связывание ОН-групп красителя и ОН-групп ПВС с образованием водородных связей (для образца с красителем **6**), а причина низкой поляризующей способности ПВС-пленки, окрашенной **10**, по-видимому, в нарушении копланарности молекулы [16]. Пространственные затруднения в молекуле **10** привели к резкому падению поляризующей способности (рис. 2, *b*) у окрашенной им пленки по сравнению с соединением **6** (рис. 2, *a*).

Полные энергии систем и дипольные моменты (*E,E*)-, (*E,Z*)- (*Z,E*)- и (*Z,Z*)-изомеров диазометинов **2**, **5**, **8**, **11**, **13**, **18**

Total system energies and dipole moments of (*E,E*)-, (*E,Z*)- (*Z,E*)- and (*Z,Z*)-isomers of diazomethines **2**, **5**, **8**, **11**, **13**, **18**

|                 | Конфигурация          |                       |                       |
|-----------------|-----------------------|-----------------------|-----------------------|
|                 | ( <i>E,E</i> )-изомер | ( <i>E,Z</i> )-изомер | ( <i>Z,Z</i> )-изомер |
| <b>2</b>        |                       |                       |                       |
| <i>E</i> , а.е. | -1028,8371771811      | -1028,8273242770      | -1028,8161436917      |
| <i>D</i> , Дб   | 0,73                  | 1,60                  | 0,18                  |
| <b>5</b>        |                       |                       |                       |
| <i>E</i> , а.е. | -1491,0492044412      | -1491,0375067951      | -1491,0279667365      |
| <i>D</i> , Дб   | 0,84                  | 1,14                  | 0,40                  |
| <b>8</b>        |                       |                       |                       |
| <i>E</i> , а.е. | -1593,8043632599      | -1593,7999706552      | -1593,7958493552      |
| <i>D</i> , Дб   | 3,53                  | 3,54                  | 0,25                  |
| <b>11</b>       |                       |                       |                       |
| <i>E</i> , а.е. | -2508,6154753327      | -2508,6010951328      | -2508,5988380189      |
| <i>D</i> , Дб   | 5,08                  | 13,29                 | 1,61                  |
| <b>13</b>       |                       |                       |                       |
| <i>E</i> , а.е. | -4590,7505072275      | -4590,7340480782      | -4590,7252953498      |
| <i>D</i> , Дб   | 4,55                  | 7,41                  | 4,34                  |
| <b>18</b>       |                       |                       |                       |
| <i>E</i> , а.е. | -4590,7404702325      | -4590,7326426554      | -4590,7214399710      |
| <i>D</i> , Дб   | 2,73                  | 2,80                  | 0,52                  |

Примечание. 1 а.е. Хартри = 2625,5 кДж/моль.

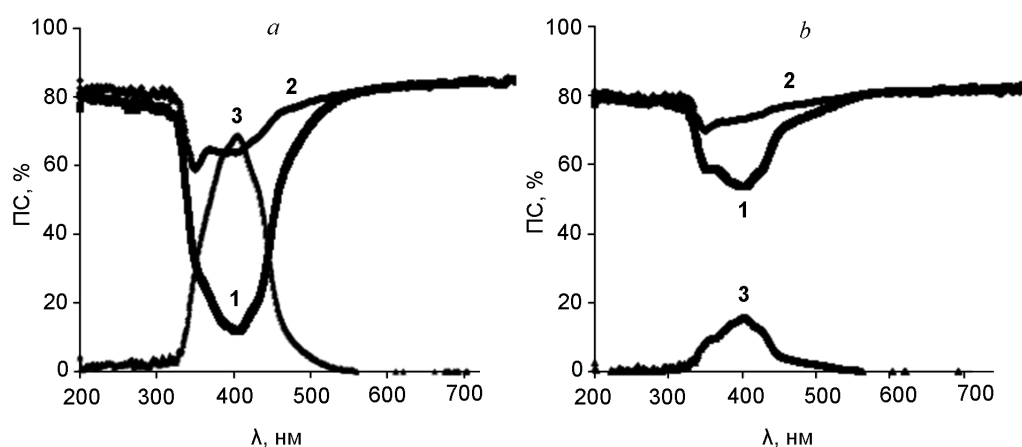


Рис. 2. Спектры пропускания (1, 2) и поляризующая способность (ПС) (3) ПВС-пленок, содержащих 0,4 мас.% красителей: *a* – **6**, *b* – **10**

Fig. 2. Transmission spectra (1, 2) and polarizing ability (ПС) (3) of PVA films containing 0.4 wt.% of dyes: *a* – **6**, *b* – **10**

**Экспериментальная частка.** ІК спектры злучэнняў **2–21** запісаны на Фур'е-спектрофотометры Protege-460 фірмы Nicolet з прыгатаваннем зразкаў у выглядзе таблетаў з КВг. Спектры ЯМР  $^1\text{H}$  і  $^{13}\text{C}$  злучэнняў запісаны на спектрометры Bruker Avance-500 у  $\text{CDCl}_3$ . Хімічныя зрушэнні вымераны адносна астаточных сігналаў дейтэрыраванага растваральніка ( $\text{CDCl}_3$ ,  $\delta_{\text{H}}$  7,26,  $\delta_{\text{C}}$  77,2 м.д.). Нафталін-1,5-діамін **1** меў чыстоту маркі «ч.» (змест асноўнага рэчыва – 97 %), т. пл. 185–187 °С.

**(E,E)-Діазометыны 2–21 (агульная метадыка).** К сумесі 1 ммоль нафталін-1,5-діаміна **1** і 2 ммоль адпаведнага альдэгіда ў 30 мл сухога метанала дадавалі 2 кроплі лёдавай укусунай кіслоты і кіпяцілі 1–2 г. Гарачы раствор ахладжалі і пакідалі на 10–15 г пры 0–5 °С. Выпаўшыя асады злучэнняў **2–21** аддзялялі фільтраваннем на шкляннаму порыстым фільтры, промывалі невялікім колькасцю (5–10 мл) халоднага метанала і сушылі на воздуху.

**(1E,1'E)-N,N'-(Нафталін-1,5-диил)бис(1-фенилметанимин) 2.** Выход 85 %, т. пл. 195–196 °С. ІК спектр,  $\nu$ ,  $\text{см}^{-1}$ : 1623, 1577, 1504, 1449, 1405, 1360, 1308, 1260, 975, 926, 793, 753, 705, 686, 651, 520, 477.  $\text{C}_{24}\text{H}_{18}\text{N}_2$ . *M* 334,42.

**(1E,1'E)-N,N'-(Нафталін-1,5-диил)бис[1-(2-бутоксифенил)метанимин] 3.** Выход 82 %, т. пл. 121–122 °С. ІК спектр,  $\nu$ ,  $\text{см}^{-1}$ : 1613, 1598, 1578, 1486, 1455, 1400, 1364, 1287, 1261, 1245, 1152, 783, 745.  $\text{C}_{32}\text{H}_{34}\text{N}_2\text{O}_2$ . *M* 478,64.

**(1E,1'E)-N,N'-(Нафталін-1,5-диил)бис[1-(4-пентадецилоксифенил)метанимин] 4.** Выход 82 %, т. пл. 97–98 °С. ІК спектр,  $\nu$ ,  $\text{см}^{-1}$ : 1618, 1606, 1575, 1512, 1474, 1423, 1395, 1304, 1245, 1169, 1104, 1031, 1015, 992, 980, 927, 833, 779, 721, 548, 527.  $\text{C}_{54}\text{H}_{78}\text{N}_2\text{O}_2$ . *M* 787,23.

**(1E,1'E,2E,2'E)-N,N'-(Нафталін-1,5-диил)бис(3-фенилпроп-2-ен-1-имин) 5.** Выход 75 %, т.пл. 174–176 °С. ІК спектр,  $\nu$ ,  $\text{см}^{-1}$ : 1629, 1605, 1593, 1578, 1523, 1499, 1449, 1403, 1261, 1148, 993, 960, 923, 785, 751, 694.  $\text{C}_{28}\text{H}_{22}\text{N}_2$ . *M* 386,50.

**4,4'-(1E,1'E)-Нафталін-1,5-диилбис(азанилиден)бис(метанилиден)добензойная кислота 6.** Выход 87 %, т. пл. >310 °С. ІК спектр,  $\nu$ ,  $\text{см}^{-1}$ : 1681 (C = O), 1619, 1597, 1500, 1426, 1358, 1318, 1292, 1222, 1173, 1127, 1016, 957, 926, 857, 799, 769, 700.  $\text{C}_{26}\text{H}_{18}\text{N}_2\text{O}_4$ . *M* 422,44.

**(1E,1'E)-N,N'-(Нафталін-1,5-диил)бис[1-(5-фенилизоксазол-3-ил)метанимин] 7.** Выход 76 %, т. пл. 272–274 °С. ІК спектр,  $\nu$ ,  $\text{см}^{-1}$ : 3140 ( $\text{CH}_{\text{изокс}}$ ), 1613, 1591, 1571, 1496, 1452, 1397, 1258, 947, 812, 784, 762, 689, 582.  $\text{C}_{30}\text{H}_{20}\text{N}_4\text{O}_2$ . *M* 468,52.

**(1E,1'E)-N,N'-(Нафталін-1,5-диил)бис[1-(5-р-толилизоксазол-3-ил)метанимин] 8.** Выход 79 %, т. пл. >300 °С. ІК спектр,  $\nu$ ,  $\text{см}^{-1}$ : 3124 ( $\text{CH}_{\text{изокс}}$ ), 1615, 1594, 1566, 1509, 1450, 1397, 1258, 1041, 965, 947, 939, 922, 814, 781, 505.  $\text{C}_{32}\text{H}_{24}\text{N}_4\text{O}_2$ . *M* 496,57.

**(1E,1'E)-Нафталін-1,5-диилбис(азанилиден)бис(метанилиден)бис(4,1-фенилен) бис(адамтан-1-карбоксилат) 9.** Выход 80 %, т. пл. >300 °С. ІК спектр,  $\nu$ ,  $\text{см}^{-1}$ : 1745 (C = O), 1622, 1601, 1584, 1508, 1451, 1418, 1404, 1344, 1323, 1297, 1218, 1196, 1181, 1158, 1099, 1051, 1015, 977, 927, 903, 856, 784, 676, 515. Спектр ЯМР  $^1\text{H}$  (500 МГц,  $\text{CDCl}_3$ ),  $\delta$ , м.д.: 1,79 уш.с (12H, 6 $\text{CH}_2$ ), 2,10 уш.с (18H, 6 $\text{CH}_2$  + 6CH), 7,10 д (2 $\text{H}_{\text{аром}}$ , *J* 7,2 Гц), 7,21 д (4 $\text{H}_{\text{аром}}$ , *J* 8,5 Гц), 7,49 т (2 $\text{H}_{\text{аром}}$ , *J* 7,8 Гц), 8,04 д (4 $\text{H}_{\text{аром}}$ , *J* 8,5 Гц), 8,22 д (2 $\text{H}_{\text{аром}}$ , *J* 8,4 Гц), 8,55 с (2H, 2CH = N). Спектр ЯМР  $^{13}\text{C}$  (125 МГц,  $\text{CDCl}_3$ ),  $\delta$ , м.д.: 28,08 (6CH), 36,62 (6 $\text{CH}_2$ ), 38,93 (6 $\text{CH}_2$ ), 113,54 (2 $\text{CH}_{\text{аром}}$ ), 122,08 (2 $\text{CH}_{\text{аром}}$ ), 122,31 (4 $\text{CH}_{\text{аром}}$ ), 126,08 (2 $\text{CH}_{\text{аром}}$ ), 130,29 (4 $\text{CH}_{\text{аром}}$ ), 159,40 (2CH = N), 41,34, 129,49, 134,07, 149,13, 153,85 (10 $\text{C}_{\text{четв}}$ ), 176,08 (2C = O).  $\text{C}_{46}\text{H}_{46}\text{N}_2\text{O}_4$ . *M* 690,88.

**6,6'-(1E,1'E)-Нафталін-1,5-диилбис(азанилиден)бис(метанилиден)бис(2-метоксифенол) 10.** Выход 81 %, т. пл. 223–224 °С. ІК спектр,  $\nu$ ,  $\text{см}^{-1}$ : 1060, 1582, 1462, 1441, 1408, 1250, 1171, 1086, 1077, 973, 930, 838, 780, 736, 536.  $\text{C}_{26}\text{H}_{22}\text{N}_2\text{O}_4$ . *M* 426,47.

**(1E,1'E)-N,N'-(Нафталін-1,5-диил)бис[1-[4-метокси-3-(5-р-толилизоксазол-3-ил)метоксифенил]метанимин] 11.** Выход 80 %, т. пл. 210–212 °С. ІК спектр,  $\nu$ ,  $\text{см}^{-1}$ : 3131 ( $\text{CH}_{\text{изокс}}$ ), 1619, 1598, 1581, 1516, 1461, 1442, 1329, 1269, 1240, 1170, 1127, 1027, 1014, 920, 870, 819, 797, 780, 498.  $\text{C}_{48}\text{H}_{40}\text{N}_4\text{O}_6$ . *M* 768,87.

**(1E,1'E)-Нафталін-1,5-диилбис(азанилиден)бис(метанилиден)бис(6-метокси-3,1-фенилен) бис(адамтан-1-карбоксилат) 12.** Выход 85 %, т. пл. 218–220 °С. ІК спектр,  $\nu$ ,  $\text{см}^{-1}$ : 1749 (C = O), 1608, 1578, 1510, 1452, 1439, 1306, 1275, 1255, 1205, 1178, 1161, 1111, 1053, 1020, 976, 927, 910, 780, 754.  $\text{C}_{48}\text{H}_{50}\text{N}_2\text{O}_6$ . *M* 750,94.

**(1E,1'E)-Нафталин-1,5-диилбис(азанилиден)бис(метанилиден)бис(6-метокси-3,1-фенилен) бис(4,5-дихлоризотиазол-3-карбоксилат) 13.** Выход 82 %, т. пл. 267–268 °С. ИК спектр,  $\nu$ ,  $\text{см}^{-1}$ : 1749 (C = O), 1607, 1576, 1514, 1456, 1397, 1360, 1307, 1278, 1256, 1208, 1197, 1107, 1070, 1022, 973, 945, 927, 860, 826, 780, 721, 498. Найдено, %: C 52,30; H 2,67; Cl 17,90; N 6,85; S 7,81.  $\text{C}_{34}\text{H}_{20}\text{Cl}_4\text{N}_4\text{O}_6\text{S}_2$ . Вычислено, %: C 51,92; H 2,56; Cl 18,03; N 7,12; S 8,15. *M* 786,48.

**(1E,1'E)-N,N'-(Нафталин-1,5-диил)бис[1-(3-метокси-4-пентадецилоксифенил)метанимин] 14.** Выход 80 %, т. пл. 110–112 °С. ИК спектр,  $\nu$ ,  $\text{см}^{-1}$ : 1617, 1599, 1580, 1511, 1471, 1420, 1393, 1274, 1253, 1231, 1142, 1037, 980, 915, 866, 807, 776, 760, 710.  $\text{C}_{56}\text{H}_{82}\text{N}_2\text{O}_4$ . *M* 847,28.

**(1E,1'E)-Нафталин-1,5-диилбис(азанилиден)бис(метанилиден)бис(2-метокси-4,1-фенилен) ди(тридеcanoат) 15.** Выход 80 %, т. пл. 118–120 °С. ИК спектр,  $\nu$ ,  $\text{см}^{-1}$ : 1758 (C = O), 1622, 1596, 1505, 1462, 1596, 1505, 1462, 1418, 1277, 1197, 1143, 1120, 1035, 864, 835, 779, 760, 720.  $\text{C}_{52}\text{H}_{70}\text{N}_2\text{O}_6$ . *M* 819,14.

**(1E,1'E)-Нафталин-1,5-диилбис(азанилиден)бис(метанилиден)бис(2-метокси-4,1-фенилен) дистеарат 16.** Выход 82 %, т. пл. 104–106 °С. ИК спектр,  $\nu$ ,  $\text{см}^{-1}$ : 1760 (C = O), 1622, 1595, 1506, 1471, 1418, 1405, 1383, 1367, 1277, 1265, 1254, 1197, 1144, 1121, 1035, 920, 865, 840, 780, 760, 715.  $\text{C}_{62}\text{H}_{90}\text{N}_2\text{O}_6$ . *M* 959,41.

**(1E,1'E)-Нафталин-1,5-диилбис(азанилиден)бис(метанилиден)бис(2-метокси-4,1-фенилен) бис(адамантан-1-карбоксилат) 17.** Выход 85 %, т. пл. 270–272 °С. ИК спектр,  $\nu$ ,  $\text{см}^{-1}$ : 1748 (C = O), 1625, 1600, 1586, 1514, 1466, 1451, 1418, 1401, 1345, 1315, 1291, 1257, 1219, 1198, 1180, 1164, 1112, 1053, 1036, 975, 929, 901, 860, 845, 784, 678. Спектр ЯМР  $^1\text{H}$  (500 МГц,  $\text{CDCl}_3$ ),  $\delta$ , м.д.: 1,79 уш.с (12H, 6CH<sub>2</sub>), 2,12 уш.с (18H, 6CH<sub>2</sub> + 6CH), 3,95 с (6H, 2OMe), 7,09 д (2H<sub>аром</sub>, *J* 7,0 Гц), 7,13 д (2H<sub>аром</sub>, *J* 8,0 Гц), 7,45 дд (2H<sub>аром</sub>, *J* 8,0, 1,6 Гц), 7,50 т (2H<sub>аром</sub>, *J* 7,8 Гц), 7,79 д (2H<sub>аром</sub>, *J* 1,6 Гц), 8,20 д (2H<sub>аром</sub>, *J* 8,5 Гц), 8,50 с (2H, 2CH = N). Спектр ЯМР  $^{13}\text{C}$  (125 МГц,  $\text{CDCl}_3$ ),  $\delta$ , м.д.: 28,13 (6CH), 36,66 (6CH<sub>2</sub>), 39,00 (6CH<sub>2</sub>), 56,34 (2OMe), 111,00 (2CH<sub>аром</sub>), 113,70 (2CH<sub>аром</sub>), 122,00 (2CH<sub>аром</sub>), 123,25 (2CH<sub>аром</sub>), 123,39 (2CH<sub>аром</sub>), 126,10 (2CH<sub>аром</sub>), 159,88 (2CH = N), 41,35, 129,37, 135,21, 143,39, 149,17, 151,98 (12C<sub>четв</sub>), 175,74 (2C = O).  $[M+H]^+$  751,40.  $\text{C}_{48}\text{H}_{50}\text{N}_2\text{O}_6$ . *M* 750,94.

**(1E,1'E)-Нафталин-1,5-диилбис(азанилиден)бис(метанилиден)бис(2-метокси-4,1-фенилен) бис(4,5-дихлоризотиазол-3-карбоксилат) 18.** Выход 80 %, т. пл. 294–296 °С. ИК спектр,  $\nu$ ,  $\text{см}^{-1}$ : 1749 (C = O), 1626, 1602, 1589, 1510, 1465, 1420, 1399, 1350, 1313, 1294, 1256, 1207, 1161, 1111, 1070, 1031, 963, 920, 875, 860, 820, 799, 786, 760, 623. Найдено, %: C 52,33; H 2,60; Cl 17,76; N 6,81; S 7,76.  $\text{C}_{34}\text{H}_{20}\text{Cl}_4\text{N}_4\text{O}_6\text{S}_2$ . Вычислено, %: C 51,92; H 2,56; Cl 18,03; N 7,12; S 8,15. *M* 786,48.

**(1E,1'E)-N,N'-(Нафталин-1,5-диил)бис[1-(4-пентадецилокси-3-этоксифенил)метанимин] 19.** Выход 83 %, т. пл. 127–129 °С. ИК спектр,  $\nu$ ,  $\text{см}^{-1}$ : 1618, 1597, 1579, 1511, 1471, 1433, 1400, 1393, 1333, 1269, 1229, 1180, 1138, 1045, 1013, 983, 927, 870, 850, 820, 810, 790, 776, 721.  $[M+H]^+$  876,10.  $\text{C}_{58}\text{H}_{86}\text{N}_2\text{O}_4$ . *M* 875,34.

**(1E,1'E)-Нафталин-1,5-диилбис(азанилиден)бис(метанилиден)бис(2-этокси-4,1-фенилен) бис(3-нитробензоат) 20.** Выход 82 %, т. пл. 235–237 °С. ИК спектр,  $\nu$ ,  $\text{см}^{-1}$ : 1742 (C = O), 1625, 1600, 1586, 1528 (NO<sub>2</sub>), 1510, 1478, 1429, 1401, 1349 (NO<sub>2</sub>), 1299, 1290, 1253, 1160, 1200, 1171, 1159, 1117, 1060, 1043, 929, 860, 813, 784, 714. Найдено, %: C 67,29; H 4,37; N 7,19;  $\text{C}_{42}\text{H}_{32}\text{N}_4\text{O}_{10}$ . Вычислено, %: C 67,02; H 4,29; N 7,44. *M* 752,74.

**(1E,1'E)-Нафталин-1,5-диилбис(азанилиден)бис(метанилиден)бис(2-этокси-4,1-фенилен) бис(адамантан-1-карбоксилат) 21.** Выход 87 %, т. пл. 236–238 °С. ИК спектр,  $\nu$ ,  $\text{см}^{-1}$ : 1746 (C = O), 1624, 1600, 1585, 1513, 1480, 1451, 1430, 1398, 1315, 1294, 1258, 1220, 1203, 1180, 1170, 1117, 1103, 1053, 1042, 976, 929, 901, 868, 849, 802, 784, 720, 676, 620. Спектр ЯМР  $^1\text{H}$  (500 МГц,  $\text{CDCl}_3$ ),  $\delta$ , м.д.: 1,45 т (6H, 2Me, *J* 6,9 Гц), 1,80 уш.с (12H, 6CH<sub>2</sub>), 2,12 уш.с (18H, 6CH<sub>2</sub> + 6CH), 4,19 к (4H, 2OCH<sub>2</sub>Me, *J* 6,9 Гц), 7,08 д (2H<sub>аром</sub>, *J* 7,1 Гц), 7,13 д (2H<sub>аром</sub>, *J* 8,0 Гц), 7,44 дд (2H<sub>аром</sub>, *J* 8,0, 1,6 Гц), 7,49 т (2H<sub>аром</sub>, *J* 7,8 Гц), 7,76 д (2H<sub>аром</sub>, *J* 1,6 Гц), 8,19 д (2H<sub>аром</sub>, *J* 8,5 Гц), 8,49 с (2H, 2CH = N). Спектр ЯМР  $^{13}\text{C}$  (125 МГц,  $\text{CDCl}_3$ ),  $\delta$ , м.д.: 14,99 (2Me), 28,14 (6CH), 36,68 (6CH<sub>2</sub>), 39,07 (6CH<sub>2</sub>), 64,66 (2OCH<sub>2</sub>Me), 111,81 (2CH<sub>аром</sub>), 113,65 (2CH<sub>аром</sub>), 121,98 (2CH<sub>аром</sub>), 123,17 (2CH<sub>аром</sub>), 123,19 (2CH<sub>аром</sub>), 126,07 (2CH<sub>аром</sub>), 159,89 (2CH = N), 41,26, 129,38, 135,16, 143,45, 149,19, 151,33 (12C<sub>четв</sub>), 175,61 (2C = O).  $\text{C}_{50}\text{H}_{54}\text{N}_2\text{O}_6$ . *M* 778,99.

**Благодарность.** Работа выполнена при финансовой поддержке Белорусского республиканского фонда фундаментальных исследований (грант X16-021).

**Acknowledgements.** This work has been performed with a financial support of Belarusian Republican Foundation for Fundamental Research (Grant № X16-021).

## СПИСОК ИСПОЛЬЗОВАННЫХ ИСТОЧНИКОВ

1. Филиппович, Л. Н. Спектральные характеристики пленок на основе поливинилового спирта, содержащих диазокрасители из группы азобензолазофталина / Л. Н. Филиппович // Вест. Нац. акад. наук Беларусі. Сер. хім. навук. – 2005. – № 5. – С. 112–115.
2. Quantum chemical modeling of new derivatives of (*E,E*)-azomethines: Synthesis, spectroscopic (FT-IR, UV/Vis, polarization) and thermophysical investigations / S. Shahab [at al.] // J. Mol. Struct. – 2017. – Vol. 1137. – P. 335–348. <https://doi.org/10.1016/j.molstruc.2017.02.056>
3. Polarization, excited states, *trans-cis* properties and anisotropy of thermal and electrical conductivity of the 4-(phenyldiazenyl)aniline in PVA matrix / S. Shahab [at al.] // J. Mol. Struct. – 2017. – Vol. 1141. – P. 703–709. <https://doi.org/10.1016/j.molstruc.2017.04.014>
4. Synthesis, geometry optimization, spectroscopic investigation (UV/Vis, excited states, FT-IR) and application of new azomethine dyes / S. Shahab [at al.] // J. Mol. Struct. – 2017. – Vol. 1148. – P. 134–149. <https://doi.org/10.1016/j.molstruc.2017.07.036>
5. New derivatives of (*E,E*)-azomethines: Design, quantum chemical modeling, spectroscopic (FT-IR, UV/Vis, polarization) studies, synthesis and their application: Experimental and theoretical investigation / M. Sheikhi [at al.] // J. Mol. Struct. – 2018. – Vol. 1152. – P. 368–385. <https://doi.org/10.1016/j.molstruc.2017.09.108>
6. Anisotropy (optical, electrical and thermal conductivity) in thin polarizing films for UV/Vis regions of spectrum: experimental and theoretical investigations / H. Yahyaei [at al.] // Spectrochimica Acta. Part A. Molecular and Biomolecular Spectroscopy. – 2018. – Vol. 192. – P. 343–360. <https://doi.org/10.1016/j.saa.2017.11.029>
7. Design of geometry, synthesis, spectroscopic (FT-IR, UV/Vis, excited state, polarization) and anisotropy (thermal conductivity and electrical) properties of new synthesized derivatives of (*E,E*)-azomethines in colored stretched poly (vinyl alcohol)matrix / S. Shahab [et al.] // J. Mol. Struct. – 2018. – Vol. 1157. – P. 536–550. <https://doi.org/10.1016/j.molstruc.2017.12.094>
8. DFT Investigation (Geometry Optimization, UV/Vis, FT-IR, NMR, HOMO-LUMO, FMO, MEP, NBO, Excited States) and the Syntheses of New Pyrimidine Dyes / M. Sheikhi [at al.] // Chinese J. Struct. Chem. – 2018. – Vol. 37, N 8. – P. 1201–1222.
9. Пленкообразующие, термо- и светочувствительные свойства ароматических азометинов ванилинового ряда / В. А. Азарко [и др.] // Оптика неоднородных структур – 2007: материалы международной научно-практической конференции (2–3 октября 2007 г.). – Могилев: МГУ им. А. А. Кулешова, 2007. – С. 27–30.
10. General Atomic and Molecular Electronic-Structure System / M. W. Schmidt [et al.] // J. Comput. Chem. – 1993. – Vol. 14, N 7. – P. 1347–1363.
11. Huzinaga, S. Gaussian Basis Sets for Molecular Calculations / S. Huzinaga, J. M. Andzelm, M. Klobukowski – Amsterdam: Elsevier, 1984. <https://doi.org/10.1016/c2009-0-07152-9>
12. Saleem L. M. N. *Trans-cis* isomerization of Schiff's bases (*N*-benzylideneanilines) on addition of lanthanide shift reagents / L. M. N. Saleem // Organic Magnetic Resonance. – 1982. – Vol. 19, N 1. – P. 176–180. <https://doi.org/10.1002/mrc.1270190403>
13. Степанов, Б. И. Введение в химию и технологию органических красителей / Б. И. Степанов. – М.: Химия, 1971. – 447 с.
14. Алмодарресие, Х. А. Поляризационные пленки широкого спектрального диапазона на основе поливинилового спирта, дихроичных красителей и наночастиц: автореф. дис. ... канд. хим. наук: 02.00.04 / Х. А. Алмодарресие. – Минск, 2014.
15. Han, S. E. Modeling of the optical anisotropy of a dye polarizer / S. E. Han, I. S. Hwang // J. Polym. Sci. : Polym. Phys. – 2002. – Vol. 40, № 13. – P. 1363–1370. <https://doi.org/10.1002/polb.10198>
16. Киприанов, А. И. Цвет красителей и пространственные помехи в их молекулах / А. И. Киприанов, Г. Г. Дядюша, Ф. А. Михайленко // Успехи химии. – 1966. – Т. 35, № 5. – С. 823–852.

## References

1. Filippovich L. N. Spectral characteristics of polyvinyl alcohol-based films containing diazo dyes from the azobenzonaphthalene group. *Vestsi Natsyyanal'nai akademii navuk Belarusi. Seryya khimichnykh navuk = Proceedings of the National Academy of Sciences of Belarus. Chemical series*, 2005, no. 5, pp. 112–115 (in Russian).
2. Shahab S., Sheikhi M., Filippovich L., Dikumar E. A., Yahyaei H. Quantum chemical modeling of new derivatives of (*E,E*)-azomethines: Synthesis, spectroscopic (FT-IR, UV/Vis, polarization) and thermophysical investigations. *Journal of Molecular Structure*, 2017, vol. 1137, pp. 335–348. <https://doi.org/10.1016/j.molstruc.2017.02.056>
3. Shahab S., Filippovich L., Sheikhi M., Kumar R., Dikumar E., Yahyaei H., Muravsky A. Polarization, excited states, *trans-cis* properties and anisotropy of thermal and electrical conductivity of the 4-(phenyldiazenyl)aniline in PVA matrix. *Journal of Molecular Structure*, 2017, vol. 1141, pp. 703–709. <https://doi.org/10.1016/j.molstruc.2017.04.014>
4. Shahab S., Sheikhi M., Filippovich L., Kumar R., Dikumar E., Yahyaei H., Khaleghian M. Synthesis, geometry optimization, spectroscopic investigation (UV/Vis, excited states, FT-IR) and application of new azomethine dyes. *Journal of Molecular Structure*, 2017, vol. 1148, pp. 134–149. <https://doi.org/10.1016/j.molstruc.2017.07.036>
5. Sheikhi M., Shahab S., Filippovich L., Yahyaei H., Dikumar E., Khaleghian M. New derivatives of (*E,E*)-azomethines: Design, quantum chemical modeling, spectroscopic (FT-IR, UV/Vis, polarization) studies, synthesis and their application: Experimental and theoretical investigation. *Journal of Molecular Structure*, 2018, vol. 1152, pp. 368–385. <https://doi.org/10.1016/j.molstruc.2017.09.108>

6. Yahyaei H., Shahab S., Sheikhi M., Filippovich L., Almodarresiyeh H. A., Kumar R., Dikumar E., Borzehandani M. Y., Alnajjar R. Anisotropy (optical, electrical and thermal conductivity) in thin polarizing films for UV/Vis regions of spectrum: experimental and theoretical investigations. *Spectrochimica Acta Part A: Molecular and Biomolecular Spectroscopy*, 2018, vol. 192, pp. 343–360. <https://doi.org/10.1016/j.saa.2017.11.029>

7. Shahab S., Sheikhi M., Filippovich L., Dikumar E., Yahyaei H., Kumar R., Khaleghian M. Design of geometry, synthesis, spectroscopic (FT-IR, UV/Vis, excited state, polarization) and anisotropy (thermal conductivity and electrical) properties of new synthesized derivatives of (*E,E*)-azomethines in colored stretched poly (vinyl alcohol)matrix. *Journal of Molecular Structure*, 2018, vol. 1157, pp. 536–550. <https://doi.org/10.1016/j.molstruc.2017.12.094>

8. Sheikhi M., Shahab S., Filippovich L., Dikumar E., Mehrnoosh K. DFT Investigation (Geometry Optimization, UV/Vis, FT-IR, NMR, HOMO-LUMO, FMO, MEP, NBO, Excited States) and the Syntheses of New Pyrimidine Dyes. *Chinese Journal of Structural Chemistry*, 2018, vol. 37, no. 8, pp. 1201–1222.

9. Azarko V. A., Dikumar E. A., Potkin V. I., Kozlov N. G., Yuvchenko A. P. Film-forming, thermo- and photosensitive properties of vanillin aromatic azomethines. *Optika neodnorodnykh struktur – 2007: materialy mezhdunarodnoi nauchno-prakticheskoi konferentsii (2–3 oktyabrya 2007 g.)* [Optics of Inhomogeneous Structures – 2007: Materials of international scientific-practical Conf., October 2–3, 2007]. Mogilev, A. A. Kuleshov MSU, 2007, pp. 27–30 (in Russian)

10. Schmidt M. W., Baldrige K. K., Boatz J. A., Elbert S. T., Gordon M. S., Jensen J. H., Koseki S., Matsunaga N., Nguyen K. A., Su S. J., Midus T. L., Dupnis M., Montgomery J. A. General Atomic and Molecular Electronic-Structure System *Journal of Computational Chemistry*, 1993, vol. 14, no. 7, pp. 1347–1363.

11. Huzinaga S., Andzelm J. M., Klobukowski M. *Gaussian Basis Sets for Molecular Calculations*. Amsterdam: Elsevier, 1984. <https://doi.org/10.1016/c2009-0-07152-9>

12. Saleem L. M. N. *Trans-cis* isomerization of Schiff's bases (*N*-benzylideneanilines) on addition of lanthanide shift reagents. *Organic Magnetic Resonance*, 1982, vol. 19, no. 1, pp. 176–180. <https://doi.org/10.1002/mrc.1270190403>

13. Stepanov B. I. *Introduction to chemistry and technology of organic dyes*. Moscow, Khimiya Publ., 1971. 447 p. (in Russian).

14. Almodarresie H. A. *Polarizing films of a wide spectral range based on polyvinyl alcohol, dichroic dyes and nanoparticles*. Minsk, 2014 (in Russian).

15. Han S. E., Hwang I. S. Modeling of the optical anisotropy of a dye polarizer. *Journal of Polymer Science Part B: Polymer Physics*, 2002, vol. 40, no. 13, pp. 1363–1370. <https://doi.org/10.1002/polb.10198>

16. Kiprianov A.I., Dyadyusha G.G., Mikhailenko F.A. Color of dyes and spatial noise in their molecules. *Russian Chemical Reviews*, 1966, vol. 35, no. 5, pp. 823–852. <https://doi.org/10.1070/rc1966v035n05abeh001477>

## Информация об авторах

*Дикусар Евгений Анатольевич* – канд. хим. наук, ст. науч. сотрудник. Институт физико-органической химии, Национальная академия наук Беларуси (ул. Сурганова, 13, 220072, Минск, Республика Беларусь). E-mail: [dikumar@ifoch.bas-net.by](mailto:dikumar@ifoch.bas-net.by)

*Филиппович Людмила Николаевна* – канд. хим. наук, науч. сотрудник. Институт физико-органической химии, Национальная академия наук Беларуси (ул. Сурганова, 13, 220072, Минск, Республика Беларусь). E-mail: [luda1977@list.ru](mailto:luda1977@list.ru)

*Шахаб Сиямак Насер* – канд. хим. наук, профессор Рос. акад. естествознания, вед. науч. сотрудник. Институт физико-органической химии, Национальная академия наук Беларуси (ул. Сурганова, 13, 220072, Минск, Республика Беларусь). E-mail: [siyamak@tut.by](mailto:siyamak@tut.by)

*Петкевич Сергей Константинович* – канд. хим. наук, ст. науч. сотрудник. Институт физико-органической химии, Национальная академия наук Беларуси (ул. Сурганова, 13, 220072, Минск, Республика Беларусь). E-mail: [petkevich@ifoch.bas-net.by](mailto:petkevich@ifoch.bas-net.by)

*Стёпин Святослав Генрихович* – канд. хим. наук, доцент. Витебский государственный ордена Дружбы народов медицинский университет (пр-т Фрунзе, 27, 210023, Витебск, Республика Беларусь). E-mail: [stepins@tut.by](mailto:stepins@tut.by)

## Information about the authors

*Evgenij A. Dikumar* – Ph. D. (Chemistry), Senior Researcher. Institute of Physical Organic Chemistry, National Academy of Sciences of Belarus (13, Surganov Str., 220072, Minsk, Republic of Belarus). E-mail: [dikumar@ifoch.bas-net.by](mailto:dikumar@ifoch.bas-net.by)

*Liudmila N. Filippovich* – Ph. D. (Chemistry), Researcher, Institute of Physical Organic Chemistry, National Academy of Sciences of Belarus (13, Surganov Str., 220072, Minsk, Republic of Belarus). E-mail: [luda1977@list.ru](mailto:luda1977@list.ru)

*Siyamak N. Shahab* – Ph. D. (Chemistry), Senior Researcher, Professor. Institute of Physical Organic Chemistry. National Academy of Sciences of Belarus (13, Surganov Str., 220072, Minsk, Republic of Belarus). E-mail: [siyamak@tut.by](mailto:siyamak@tut.by)

*Sergey K. Petkevich* – Ph. D. (Chemistry), Senior Researcher. Institute of Physical Organic Chemistry, National Academy of Sciences of Belarus (13, Surganov Str., 220072, Minsk, Republic of Belarus). E-mail: [petkevich@ifoch.bas-net.by](mailto:petkevich@ifoch.bas-net.by)

*Svjatoslav G. Stepin* – Ph. D. (Chemistry), Associate Professor. Vitebsk State Order of Peoples' Friendship Medical University (17, Frunze Ave., 210023, Vitebsk, Republic of Belarus). E-mail: [stepins@tut.by](mailto:stepins@tut.by)