

## ФИЗИЧЕСКАЯ ХИМИЯ

КВАНТОВО-ХИМИЧЕСКИЕ СВОЙСТВА СИНТЕЗИРОВАННЫХ СОЛЕЙ  
ЧЕТВЕРТИЧНОГО АММОНИЯ**Бурихонов Бахтиёр Холмирзаевич**

д-р философии по химии,  
Каршинский государственный университет,  
Республика Узбекистана, г. Карши  
E-mail: [borixonov90@mail.ru](mailto:borixonov90@mail.ru)

**Холиқов Турсинали Суюнович**

д-р хим наук, доцент,  
Национальный университет Узбекистана им. Мирзо Улугбека,  
Республика Узбекистана, г. Ташкент  
E-mail: [tursunali72@mail.ru](mailto:tursunali72@mail.ru)

**Тажимухамедов Хабибулла Сайфуллаевич**

канд.хим. наук, доцент,  
Национальный университет Узбекистана им. Мирзо Улугбека,  
Республика Узбекистана, г. Ташкент

QUANTUM-CHEMICAL PROPERTIES OF SYNTHESIZED SALTS  
OF QUATERNARY AMMONIUM**Bakhtiyor Burikhonov**

Doctor of Philosophy in Chemistry  
Karshi State University,  
Republic of Uzbekistan, Karshi

**Tursinali Kholikov**

Doctor of Chemical Sciences, Professor  
National Uzbekistan named after Mirzo Ulugbek,  
Republic of Uzbekistan, Tashkent

**Khabibulla Tadjimukhamedov**

Candidat of chemical Sciences, assistant professor  
National Uzbekistan named after Mirzo Ulugbek,  
Republic of Uzbekistan, Tashkent

## АННОТАЦИЯ

Квантово-химические свойства новых солей четвертичного аммония, синтезированных на основе N-бутилморфолина, рассчитаны с использованием метода B3LYP и 6-311G (d, p) сет. Были идентифицированы некоторые квантовые свойства молекул, такие как химическая твердость, электроотрицательность, электронный химический потенциал, электрофильность и химическая мягкость. Из результатов видно, что полученные соли четвертичного аммония можно использовать в качестве катализаторов.

## ABSTRACT

The quantum-chemical properties of new quaternary ammonium salts synthesized on the basis of N-butylmorpholine were calculated using the B3LYP and 6-311G (d, p) set method. Several quantum properties of molecules have been identified, such as chemical hardness, electronegativity, electronic chemical potential, electrophilicity, and chemical softness. It can be seen from the results obtained that the obtained quaternary ammonium salts can be used as catalysts.

**Ключевые слова:** ион, энтропия, химическая связь, электронная активность, потенциал, ионизация, орбитали, квантово-химические теории.

**Keywords:** ion, entropy, chemical bond, electronic activity, potential, ionization, orbitals, quantum chemical theories.

Соли четвертичного аммония сегодня широко используются во многих областях, включая диамины геминальной структуры. [1; 630-638 с], триамины [2; 506–516 с], азофенотиазины [2; 774-806 с.], тетрагидропиридины [3; 97-106 с], □-карболины [4; 447-461 с] показано, что полученные на их основе соли четвертичного аммония могут применяться против различных заболеваний и патогенных микроорганизмов. Полученные четвертичные аммониевые соли бензалкония представляют собой биоциды, детергенты и межфазные катализаторы по Grillitschet et al. [5; 11-118 с.], гидрофобные и гидрофильные агенты [6; 313–320 с.], А Дебрецем и Местян используют эти соли в качестве консервантов, офтальмологических, назальных и внутривенных препаратов [7; С. 313-320].

### Результаты и их анализ

Мы пронумеровали соединения, проанализированные квантово-химическими методами, в следующем порядке.

$$\text{Химическая связь, } \eta \text{ (eV)} = \frac{E_{\text{Энергия связывающих орбиталей(LUMO)}(\text{eV}) - E_{\text{НОМО}}(\text{eV})}{2} \quad (1)$$

$$\text{Электронная активность, } \chi \text{ (eV)} = \frac{-(E_{\text{LUMO}}(\text{eV}) - E_{\text{НОМО}}(\text{eV}))}{2} \quad (2)$$

$$\text{Химический электронный потенциал, } \mu \text{ (eV)} = \frac{E_{\text{LUMO}}(\text{eV}) + E_{\text{НОМО}}(\text{eV})}{2} \quad (3)$$

$$\text{Глобальный индекс электрофильности, } \omega \text{ (eV)} = \frac{\mu^2(\text{eV})}{2\eta(\text{eV})} \quad (4)$$

$$\text{Химическая Мягкость, } s(\text{eV}) = \frac{1}{2\eta(\text{eV})} \quad (5)$$

В квантово-химических теориях энергия связывающих орбиталей (HUMO) указывает на склонность электронно-склонных молекул.

Энергия релаксирующих орбиталей (НОМОs) объясняет обратное. В результате теоретических расчетов (2-6) было обнаружено, что соединения имеют относительно высокое сродство к электрону по сравнению с другими соединениями и были расположены в порядке  $2 > 6 > 5 > 1 > 3 > 4$ . (2-6) можно объяснить тем, что сродство к электрону в соединениях увеличивает сродство к электрону за счет групп  $\text{COO}^-$ ,  $-\text{C}_6\text{H}_5$ .

При анализе результатов установлено, что потенциалы ионизации располагались в следующем порядке:  $2 > 1 > 3 > 4 > 6 > 5$ . Было обнаружено, что соединения (2-1) имеют более высокий потенциал ионизации, чем другие соединения, из-за сильных ионизационных радикалов  $\text{C}_4\text{H}_9$ ,  $\text{C}_6\text{H}_5$ .

Согласно квантово-химическим теориям, меньшее значение разницы между энергией связывающих орбиталей (LUMO) и энергией высвобождающихся орбиталей (HUMO) представляет стабильность и нестабильность молекул. То есть, чем меньше разница, тем стабильнее молекула и ниже ее реакционная способность. В противном случае реактивность будет высокой. В целом результаты полученных соединений показали, что все молекулы обладают высокой реакционной способностью, поскольку разница энергий между молекулами оказалась меньше 0,3 эВ,

1.4-Бутил-4- (2- (нонилокси) -2оксоэтил) морфолин-4-аммоний хлорид

2.4-(2-(Бензилокси)-2-оксоэтил)-4-бутилморфолин-4-аммоний хлорид

3.4-Бутил-4-(2-оксо-2-(пентан-2-илокси)этил) морфолин-4-аммоний хлорид

4.1-(2-(Нонилокси)-2-оксоэтил)пиридин-1-аммоний хлорид

5.1-(2-Оксо-3-фенилпропил)пиридинаммоний хлорид

6.1-(2-Оксо-2-(пентан-2-илокси)этил)пиридин-1-аммоний хлорид

Перед началом квантово-химических расчетов изучаемые вещества были оптимизированы, и значения квантово-химических свойств были найдены с использованием энергий связывания (LUMOs) и разрыхления (НОМОs) орбиталей. Полученные результаты были выражены следующими формулами (1-5) и представлены в таблице 1.1.

и результаты были расположены в следующем порядке:  $2 < 1 < 3 < 5 < 6 < 4$  При связывании с атомом N радикалами  $\text{CH}_2$  электроноакцепторные группы частично заряжают молекулу отрицательно. Теория связывающих орбиталей (LUMO) и теория свободной орбиты (НОМОs) интерпретируется рисунками 1–10 ниже. Как видно из этих изображений, связывающие орбитали (HUMO) описывают электроноакцепторные валентные электроны. **Химическая твердость и химическая мягкость.**

Химическая твердость и химическая мягкость показывают химическую стойкость молекулы к изменению деформации. Химическая мягкость показывает обратное. Из полученных результатов известно, что все синтезированные соли четвертичного аммония являются химически мягкими молекулами, т.е. обладают высокой деформирующей способностью.

**Электрофильность.** Электрофильность полученных соединений указывает на кислотность по Льюису. Когда он изучал зависимость физико-химических свойств от структуры молекул, то есть, момента депо, поляризационных свойств и растворимости, было обнаружено, что все синтезированные соединения имели значения электрофильности менее 0,3 эВ. Таким образом, эти соединения оказались слабыми литическими кислотами и были расположены в следующем порядке в зависимости от уровня силы  $3 > 6 > 5 > 1 > 4 > 2$ .

Теоретические термодинамические свойства – в которых полярность дипольного момента определяет тепловую энергию, теплоемкость и энтропию. Результаты показали, что все соли имеют хорошую полярность с дипольным эффектом на молекулу. Мы разместили полярности в следующей последовательности: 6,8 (2) > 3,8 (4) > 3,7 (5) > 3,4 (6) > 2,5 (3) > 2,3 (1)

Теплоемкость и энтропия имеют следующий порядок (103) 1 > (85) 3 > (77) 4 > (61) 2 > (59) 6 > (56) 5. Результаты показывают, было обнаружено, что хлорид - (2 - (нонилокси) -2-оксоэтил) морфолин-4-аммония обладает высокой теплоемкостью. Причина – наличие циклического кольца и крупных алифатических радикалов.

Таблица 1.

Энергетические значения глобальной реакционной способности и термодинамические параметры для хлорида 4-бутил-4-(2-(нонилокси)-2-оксоэтил) морфолин-4-иума (298,150 К)

Параметры	4-бутил-4-(2-(нонилокси)-2-оксоэтил)морфолин-4-иум хлорид
$E_{LUMO}$ , eV	-0.12
$E_{HOMO}$ , eV	-0.19
$E_g$ , eV	0.07
Электронное сродство, eV	-0.12
Потенциал ионизации, eV	-0.19
Потенциал ионизации, $\eta$ , eV	0.035
Электроотрицательность, $\chi$ , eV	-0.035
Электронный химический потенциал, $\mu$ , eV	-0.155
Глобальный индекс электрофильности, $\omega$ , eV	0.343
Химическая мягкость, $s$ , eV	14.285
Дипольный момент, Debye	2.331
Поляризуемость ( $\alpha$ ), а.е.	217.009
$E(UB3LYP)$ , Hartree	-1026.989
$E$ (Thermal), kcal/mol	368.358
Теплоемкость ( $C_v$ ), cal/mol-kelvin	103.726
Энтропия ( $S$ ), cal/mol-kelvin	206.171

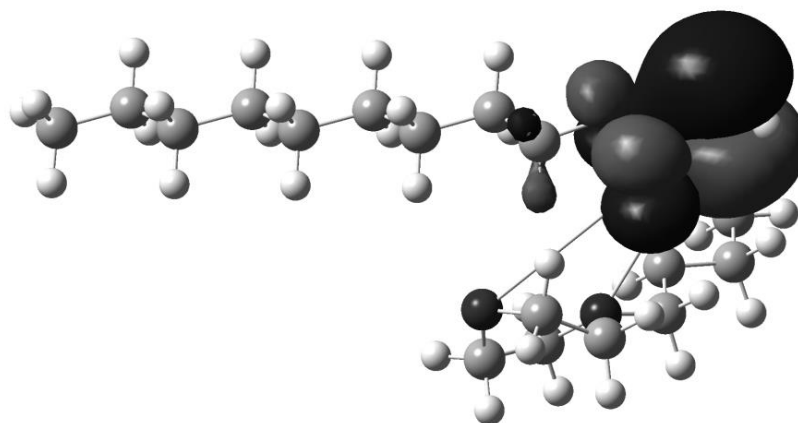


Рисунок 1. LUMO-орбитали 4-бутил-4-(2-(нонилокси)-2-оксоэтил)морфолин-4-иум хлорида

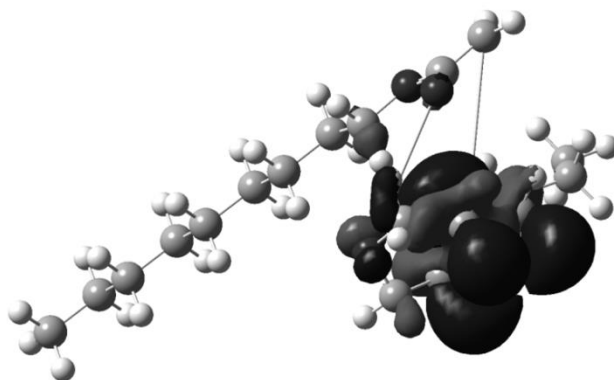


Рисунок 2. LUMO-орбитали 4-бутил-4-(2-(нонилокси)-2-оксоэтил)морфолин-4-иум хлорида

Таблица 2.

Энергетические значения глобальной реакционной способности и термодинамические параметры для хлорида 4-(2-(бензилокси)-2-оксоэтил)-4-бутилморфолин-4-иума (298,150 К)

Параметры	4-(2-(бензилокси)-2-оксоэтил)-4-бутилморфолин-4-хлорид иум
$E_{LUMO}$ , eV	0.023
$E_{HOMO}$ , eV	-0.040
$E_g$ , eV	0.063
Электронное сродство, eV	0.023
Потенциал ионизации, eV	-0.040
Потенциал ионизации, $\eta$ , eV	0.0315
Электроотрицательность, $\chi$ , eV	-0.0315
Электронный химический потенциал, $\mu$ , eV	-0.0085
Глобальный индекс электрофильности, $\omega$ , eV	0.00114
Химическая мягкость, $s$ , eV	15.873
Дипольный момент, Debye	6.844
Поляризуемость ( $\alpha$ ), а.е.	256.624
$E(UB3LYP)$ , Hartree	-943.056
$E$ (Thermal), kcal/mol	260.100
Теплоемкость ( $C_v$ ), cal/mol-kelvin	61.915
Энтропия ( $S$ ), cal/mol-kelvin	122.084

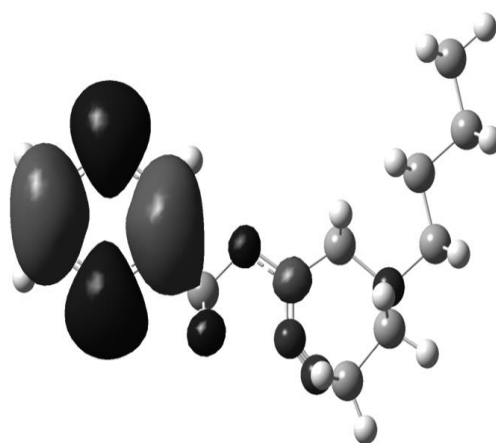


Рисунок 3. Орбитали LUMO хлорида 4-(2-(бензилокси)-2-оксоэтил)-4-бутилморфолин-4-иум

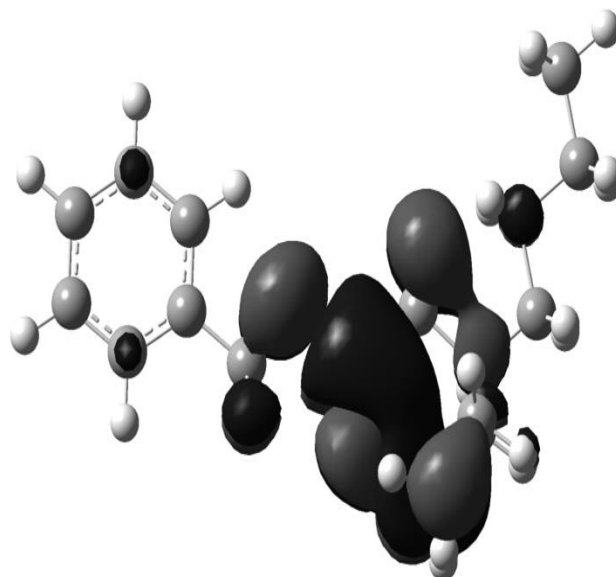


Рисунок 4. LUMO-орбитали 4-(2-(бензилокси)-2-оксоэтил)-4-бутилморфолин-4-иум хлорида

Таблица 3.

Энергетические значения глобальной реакционной способности и термодинамические параметры для 4-бутил-4-(2-оксо-2-(пентан-2-илокси) этил)морфолин-4-хлорида алюминия (298,150 К)

Параметры	4-бутил-4-(2-оксо-2-(пентан-2-илокси)этил)морфолин-4-иум хлорид
$E_{LUMO}$ , eV	-0.115
$E_{HOMO}$ , eV	-0.195
$E_g$ , eV	0.08
Электронное сродство, eV	-0.115
Потенциал ионизации, eV	-0.195
Потенциал ионизации, $\eta$ , eV	0.04
Электроотрицательность, $\chi$ , eV	-0.04
Электронный химический потенциал, $\mu$ , eV	-0.155
Глобальный индекс электрофильности, $\omega$ , eV	0.3
Химическая мягкость, $s$ , eV	12.5
Дипольный момент, Debye	2.528
Поляризуемость ( $\alpha$ ), а.е.	173.706
$E(UB3LYP)$ , Hartree	-869.772
$E$ (Thermal), kcal/mol	292.364
Теплоемкость ( $C_v$ ), cal/mol-kelvin	85.510
Энтропия ( $S$ ), cal/mol-kelvin	178.488

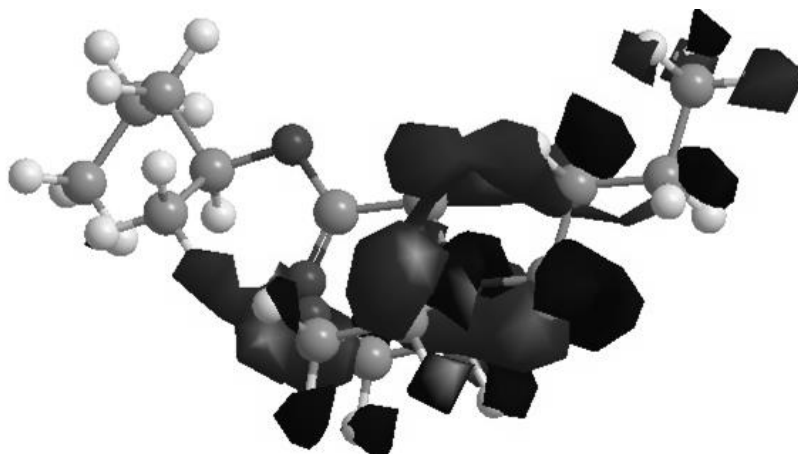


Рисунок 5. LUMO-орбитали 4-бутил-4-(2-оксо-2-(пентан-2-илокси)этил)морфолин-4-иум хлорида

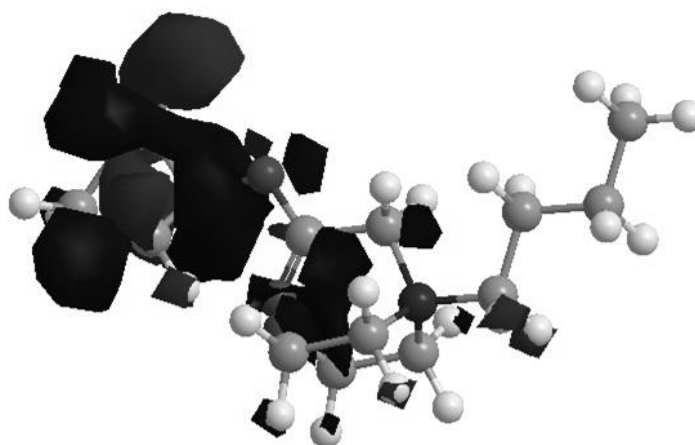


Рисунок 6. LUMO-орбитали 4-бутил-4-(2-оксо-2-(пентан-2-илокси) этил) морфолин-4-иум хлорида

Таблица 4.

Энергетические значения глобальной реакционной способности и термодинамические параметры для хлорида 1-(2-(бензилокси)-2-оксоэтил)пиридин-1-иума (298, 150 K)

Параметры	Хлорид 1-(2-(бензилокси)-2-оксоэтил)пиридин-1-иума
$E_{LUMO}$ , eV	-0.022
$E_{HOMO}$ , eV	-0.244
$E_g$ , eV	0.222
Электронное сродство, eV	-0.022
Потенциал ионизации, eV	-0.244
Потенциал ионизации, $\eta$ , eV	0.111
Электроотрицательность, $\chi$ , eV	-0.111
Электронный химический потенциал, $\mu$ , eV	-0.133
Глобальный индекс электрофильности, $\omega$ , eV	0.16
Химическая мягкость, $s$ , eV	4.5
Дипольный момент, Debye	3.7
Поляризуемость ( $\alpha$ ), а.е.	154.83
$E(UB3LYP)$ , Hartree	-746.866
$E$ (Thermal), kcal/mol	167.636
Теплоемкость (Cv), cal/mol-kelvin	56.803
Энтропия (S), cal/mol-kelvin	138.503

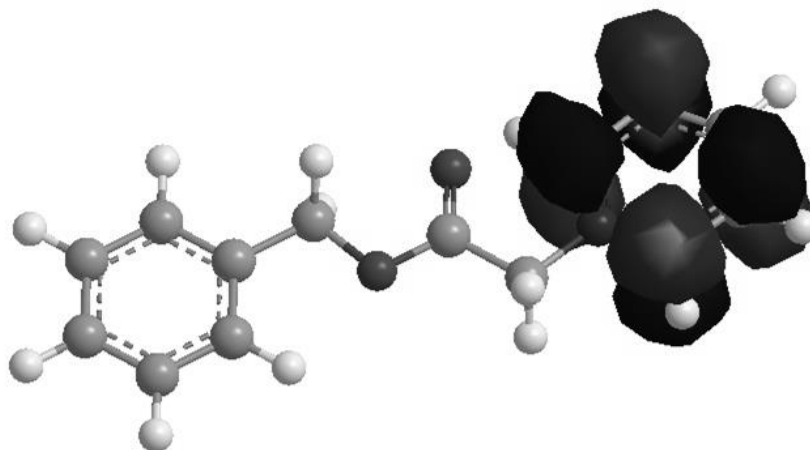


Рисунок 9. LUMO Орбитали хлорида 1-(2-(бензилокси)-2-оксоэтил)пиридин-1-иума

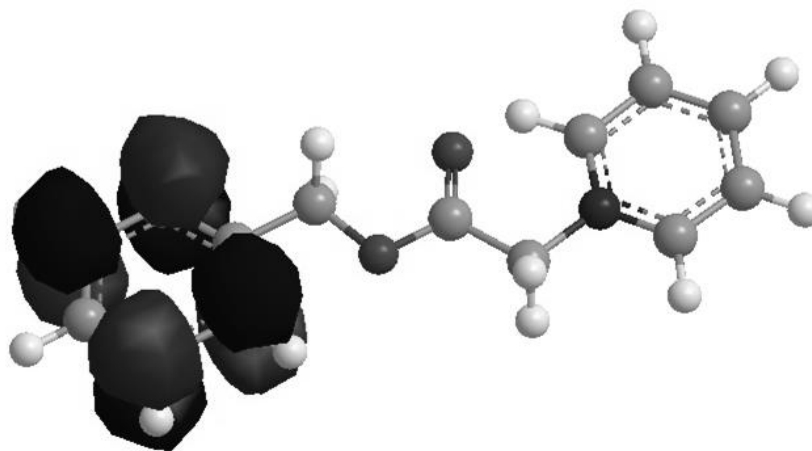


Рисунок 10. LUMO-орбитали хлорида 1-(2-(бензилокси)-2-оксоэтил) пиридин-1-иума

Таблица 5.

Энергетические значения глобальной реакционной способности и термодинамические параметры для 1-(2-оксо-2-(пентан-2-илокси)этил)пиридин-1-хлорида (298, 150 К)

Параметры	Хлорид 1-(2-оксо-2-(пентан-2-илокси)этил)пиридин-1-иума
$E_{LUMO}$ , eV	-0.013
$E_{HOMO}$ , eV	-0.243
$E_g$ , eV	0.230
Электронное сродство, eV	-0.013
Потенциал ионизации, eV	-0.243
Потенциал ионизации, $\eta$ , eV	0.115
Электроотрицательность, $\chi$ , eV	-0.115
Электронный химический потенциал, $\mu$ , eV	-0.256
Глобальный индекс электрофильности, $\omega$ , eV	0.285
Химическая мягкость, $s$ , eV	4.347
Дипольный момент, Debye	3.432
Поляризуемость ( $\alpha$ ), а.е.	134.878
$E(UB3LYP)$ , Hartree	-673.092
$E$ (Thermal), kcal/mol	188.553-
Теплоемкость ( $C_v$ ), cal/mol-kelvin	58.999
Энтропия ( $S$ ), cal/mol-kelvin	137.442

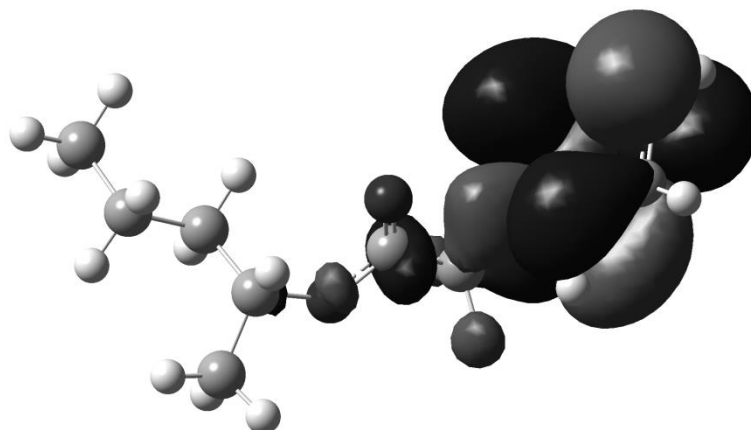


Рисунок 11. LUMO Орбитали хлорида 1-(2-оксо-2-(пентан-2-илокси)этил)пиридин-1-иума

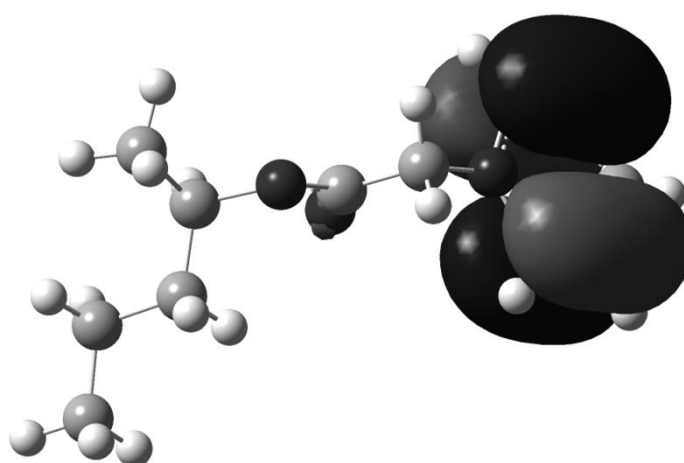
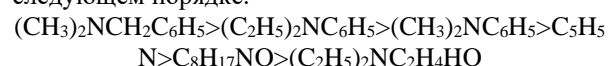


Рисунок 12. LUMO-орбитали хлорида 1-(2-оксо-2-(пентан-2-илокси)этил)пиридин-1-

### Заключение

Пиридин, н-бутилморфолин, диэтиланилин, диметиланилин, диэтиленоламин, диметилбензиламины из третичных аминов использовались при образовании четвертичных солей. По результатам

экспериментов была сравнена реакционная способность третичных аминов, и мы расположили их в следующем порядке.



### Список литературы:

1. Elyor Berdimurodov, Abduvali Kholikov, Khamdam Akbarov, Guobao Xu, Aboubakr M. Abdullah, Morteza Hosseini, New anti-corrosion inhibitor (3ar,6ar)-3a,6a-di-ptolyltetrahydroimidazo[4,5-d]imidazole-2,5(1 h,3h)-dithione for carbon steel in 1 M HCl medium: gravimetric, electrochemical, surface and quantum chemical analyses, Arabian Journal of Chemistry (2020) 13, 7504–7523. <https://doi.org/10.1016/j.arabjc.2020.08.025>
2. A.R. Shahmoradi, M. Ranjbarghanei, A.A. Javidparvar, L. Guo, E. Berdimurodov, BahramRamezanzadeh, Theoretical (atomic-DFT&molecular-MD), surface/electrochemical investigations of walnut fruit green husk extract as effective-biodegradable corrosion mitigating materials of a steel electrode in 1M HCl electrolyte, Journal of Molecular Liquids 338 (2021) 116550. <https://doi.org/10.1016/j.molliq.2021.116550>
3. Elyor Berdimurodov, Abduvali Kholikov, Khamdam Akbarov, Lei Guo, Inhibition properties of 4,5-dihydroxy-4,5-di-p-tolylimidazolidine-2-thione for use on carbon steel in an aggressive alkaline medium with chloride ions: Thermodynamic, electrochemical, surface and theoretical analyses, Journal of Molecular Liquids 327 (2021) 114813. <https://doi.org/10.1016/j.molliq.2020.114813>
4. Dakeshwar Kumar Verma, MohsinKazi, Mohammed S. Alqahtani, Rabbani Syed, Elyor Berdimurodov, Savas Kaya, Rajae Salim, Ashish Asatkar, Rajesh Haldhar, N-hydroxybenzothioamide derivatives as green and efficient corrosion inhibitors for mild steel: Experimental, DFT and MC simulation approach, Journal of Molecular Structure 1241 (2021) 130648. <https://doi.org/10.1016/j.molstruc.2021.130648>



5. Elyor Berdimurodov, Abduvali Kholikov, Khamdam Akbarov, Lei Guo, Aboubakr M. Abdullah, Mustafa Elik, A gossypol derivative as an efficient corrosion inhibitor for St2 steel in 1 M HCl + 1 M KCl: An experimental and theoretical investigation, *Journal of Molecular Liquids* 328 (2021) 115475. <https://doi.org/10.1016/j.molliq.2021.115475>
6. Mohamed Rbaaa, Asmaa Oubihi, Halima Hajji, Burak Tüzünd, Abdelhadi Hichar, El Hassane Anouar, Elyor Berdimurodov, Mohammed Aziz Ajana, Abdelkader Zarrouk, Brahim Lakhrissi, Synthesis, bioinformatics and biological evaluation of novel pyridine based on 8-hydroxyquinoline derivatives as antibacterial agents: DFT, molecular docking and ADME/T studies, *Journal of Molecular Structure* 1244 (2021) 130934. <https://doi.org/10.1016/j.molstruc.2021.130934>
7. Elyor Berdimurodov, Abduvali Kholikov, Khamdam Akbarov, I.B. Obot, Lei Guo, Thioglycoluril derivative as a new and effective corrosion inhibitor for low carbon steel in a 1 M HCl medium: Experimental and theoretical investigation, *Journal of Molecular Structure* 1234 (2021) 130165. <https://doi.org/10.1016/j.molstruc.2021.130165>
8. Dilfuza Nuriddinova, Farkhod Yusupov, Elyor Berdimurodov, Normahmat Yodgorov and Murod Mamanazarov, Adsorption Equilibrium, Kinetics, Thermodynamics and Dynamic Separation of Magnesium and Calcium Ions from Industrial Wastewater by New Strong Acid Cation Resin of SPVC, *Pak. J. Anal. Environ. Chem. Vol. 22, No. 1 (2021)* 127 – 138. <http://doi.org/10.21743/pjaec/2021.06.13>
9. E. Berdimurodov, A. Kholikov, K. Akbarov, L. Guo, Experimental and theoretical assessment of new and eco-friendly thioglycoluril derivative as an effective corrosion inhibitor of St2 steel in the aggressive hydrochloric acid with sulfate ions, *Journal of Molecular Liquids* 335 (2021) 116168. <https://doi.org/10.1016/j.molliq.2021.116168>
10. Akhror Yarkulov, Bakhrom Umarov, Feruza Rakhmatkarieva, NuritdinKattaev, Khamdam Akbarov, Elyor Berdimurodov, Diacetate Cellulose-Silicon Bionanocomposite Adsorbent for Recovery of Heavy Metal Ions and Benzene Vapours: An Experimental and Theoretical Investigation, *Biointerface Res. Appl. Chem., Volume 12, Issue 3, 2022*, 2862 – 2880. <https://doi.org/10.33263/BRIAC123.28622880>
11. BahgatRadwan A., Mannah C.A., Sliem M.H. et al. Electrospun highly corrosion-resistant polystyrene–nickel oxide superhydrophobicnanocomposite coating. *J ApplElectrochem* (2021). <https://doi.org/10.1007/s10800-021-01603-8>
12. Berdimurodov E., Akbarov K., Kholikov A., 2019. Electrochemical frequency modulation and reactivation investigation of thioglycolurils in strong acid medium. *Adv. Mater. Res.* 1154, 122–128.
13. Berdimurodov Elyor, Wang J., Kholikov, Abduvali, Akbarov, Khamdam, Burikhonov, Bakhtiyor, Umirov, Nurbik, 2016. Investigation of a new corrosion inhibitor cucurbiturils for mild steel in 10% acidic medium. *Adv. Eng. Forum, Trans Tech Publ.* 18, 21.
14. Berdimurodov, Elyor, Kholikov, Abduvali, Akbarov, Khamdam, Nakhatov, Innat, KhJurakulova, Nigora, Umirov, Nurbek, 2017. Adsorption isotherm and SEM investigating of cucurbit [n]urils based corrosion inhibitors with gossypol for mild steel in alkaline media containing chloride ions. *Adv. Eng. Forum, Trans Tech Publ.* 23, 13.
15. Berdimurodov, Elyor, Kholikov, Abduvali, Akbarov, Khamdam, Nuriddinova, D., 2018. Polarization resistance parameters of anti-corrosion inhibitor of cucurbit [N] urils and thioglycolurils in aggressive mediums. *Adv. Eng. Forum, Trans Tech Publ.* 26, 74.
16. E.N. Khurramov, A.K. Abdushukurov, D.M. Buriyeva, E.T. Berdimurodov, & I. Nakhatov, Synthesis of new amides based on the n-hydroxyacetylation of ptoluidine, *International Journal of Mechanical and Production Engineering Research and Development*, Vol. 10, Issue 3, Jun 2020, 6001–6016.
17. Bakhtiyor Burikhonov, Tursinali Kholikov, Elyor Berdimurodov, Habibulla Tajimuhamedov & Shahabuddin Memon, Synthesis of new quaternary ammonium salts based on monochloroacetic acid esters, *International Journal of Mechanical and Production Engineering Research and Development*, Vol. 10, Issue 3, Jun 2020, 6017–6034.