

**КВАНТОВО-ХИМИЧЕСКИЕ ИССЛЕДОВАНИЯ ЭЛЕКТРОННОГО СТРОЕНИЯ  
ТРИМЕТИЛОЛТИОМОЧЕВИНЫ****Аскарлов Ибрагим Рахманович**

*д-р. хим. наук, профессор, кафедра химии  
Андижанский Государственный Университет,  
Республика Узбекистан, г. Андижан  
E-mail: [stek@inbox.ru](mailto:stek@inbox.ru)*

**Исаков Хаемила**

*д-р. хим. наук, профессор, кафедра химии  
Андижанский Государственный Университет,  
Республика Узбекистан, г. Андижан*

**Мухаматдин Хомидович Мамарахмонов**

*PhD, доцент, кафедра химии  
Андижанский Государственный Университет,  
Республика Узбекистан, г. Андижан  
E-mail: [muhamatdin@mail.ru](mailto:muhamatdin@mail.ru)*

**Тураханов Шохрух**

*соискатель, кафедра химии  
Андижанский Государственный Университет,  
Республика Узбекистан, г. Андижан*

**Абдурахимова Нодира Хаятуллаевна**

*соискатель, кафедра химии,  
Андижанский Государственный Университет,  
Республика Узбекистан, г. Андижан*

**Махмудов Равшан Умарович**

*ст. науч. сотр., зам. генерального директора  
ТОО научно-производственное объединение "АнаЖер",  
Республика Казахстан, г. Алма-Ата*

**Есеркеева Назгуль Нуркасымовна**

*мл. науч. сотр. лаборатории неорг. синт. и материалов  
АО "Институт химических наук им. Бектурова",  
Республика Казахстан, г. Алма-Ата*

**Усмонов Султан**

*д-р .техн. наук, проф., зав. лабораторией. неор. синт. и материалов,  
АО "Институт химических наук им. Бектурова",  
Республика Казахстан, г. Алма-Ата*

**QUANTUM-CHEMICAL STUDIES  
OF THE ELECTRONIC STRUCTURE TRIMETHYLOLTHIOUREA****Ibragim Askarov**

*Doctor of Science, professor, department chemistry,  
Andijan State University  
Republic of Uzbekistan, Andijan*

**Khayatilla Isakov**

*Doctor of Science, prof. Department chemistry,  
Andijan State University  
Republic of Uzbekistan, Andijan*

**Mukhamatdin Mamarakhmonov**

*PhD, Associate professor, department chemistry,  
Andijan State University  
Republic of Uzbekistan, Andijan*

**Sakhrukh Turakhanov**

*Researcher, department chemistry,  
Andijan State University  
Republic of Uzbekistan, Andijan*

**Nodira Abdurakhimova**

*Researcher, department chemistry, Andijan State University,  
Republic of Uzbekistan, Andijan*

**Ravshan Makhmudov**

*Senior scientific researcher, Deputy General director  
of ILP Scientific and Production Association "AnaZher  
Republic of Kazakhstan, Alma-Ata*

**Nazgul Eserkeeva**

*Junior scientific researcher, the Lab. of Inorg. Synth. & Materials,  
Bekturov Institute of chem. Science,  
Republic of Kazakhstan, Alma-Ata*

**Sultan Usmanov**

*DSc, professor,  
Head of the Lab. of Inorg. Synth. & Materials,  
Bekturov Institute of chem. Science,  
Republic of Kazakhstan, Alma-Ata*

#### АННОТАЦИЯ

Электронное строение синтезированного нами триметилолтиомочевина было изучено современным квантово-химическим методом DFT/B3LYP. Полученные результаты хорошо согласуются с экспериментальными данными.

#### ABSTRACT

The electronic structure of the trimethylolthiourea synthesized by us was studied by the modern quantum-chemical method DFT / B3LYP. The results obtained are in good agreement with experimental data.

**Ключевые слова:** синтез, тиомочевина, формальдегид, квантово-химический расчет, электронная структура.

**Keywords:** synthesis, thiourea, formaldehyde, quantum-chemical calculation, electronic structure.

Известно, что в молекуле тиомочевина все атомы водорода аминогрупп очень реакционноспособны в отношении электрофильных реагентов, например, с формальдегидом [1]. А также они могут легко замещаться на другие электрофильные частицы. При этом продукты реакций всегда зависят от молярных концентраций реагирующих систем.

#### Экспериментальная часть

**Синтез триметилолтиомочевина.** В колбе оборудованной магнитной мешалкой, растворяли 228 г (3 моль) тиомочевина (Мт) в 228 мл воды. Водный раствор нагревали до 40 °С до полного растворения Мт. В другую колбу положили 243,35 мл 34 % ного формалина, 10 % ный раствор аммиака

медленно добавляли до показателя рН 8,3. Оба раствора объединили в 3-горлую колбу, оборудованную магнитной мешалкой. При выдержке смеси при 10 °С в течение 4 часа выпадал белый осадок. Затем раствор встряхивали и выливали в кристаллизатор. Через 1 день был выделен белый осадок (Выход продукта 89,2%).

Продолжая систематические исследования, в настоящей статье нами изучен продукт реакции синтеза триметилолтиомочевина. Реакция проведена по методике, описанной в литературе [2]. Для точного установления геометрии, а также электронной структуры проведен квантово-химический расчет продукта. При этом все геометрические параметры молекулы подверглась полной оптимизации. Данная реакция проходит согласно схеме ниже:

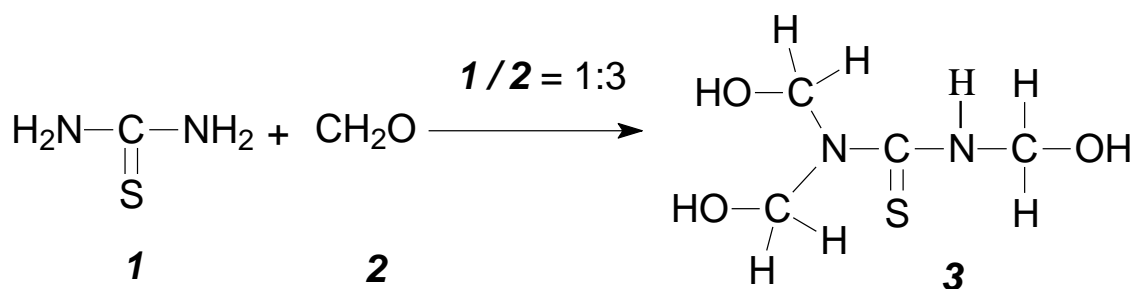


Рисунок 1. Схема синтеза триметилолтиомочевины

Квантово-химические расчеты электронного строения проведены по программе Gaussian98 [3], по методу функционала плотности DFT B3LYP с базисным набором 3-21G, который удачно применен

нами ранее [4-6]. Длина межатомных связей и валентные углы в соответствующих группах одинаковы. Условная нумерация атомов и оптимизированная структура продукта представлена на рис. 2.

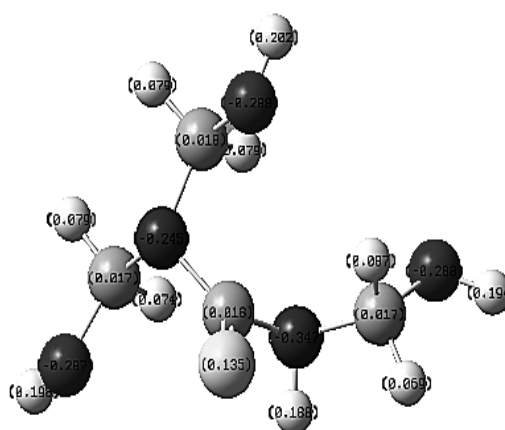
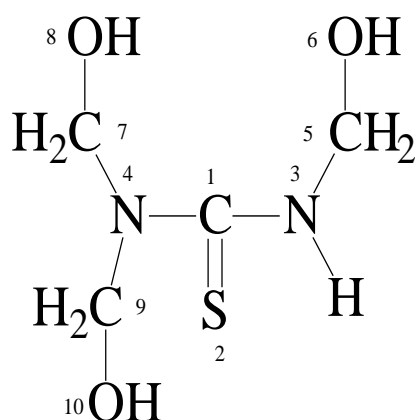


Рисунок 2. Нумерация атомов и электронная структура продукта

Таблица 1.

Заряды (q), длина связей (d) и валентные углы (φ) молекулы

№	Атом	Заряд атома, q, e	Связь	Длина связи, d, Å	Валентный угол	φ, град
1	C1	0,018	C1=S2	1,566	N3-C1-N4	119,861
2	S2	0,135	C1-N3	1,470	N3-C1-S2	119,900
3	N3	-0,347	C1-N4	1,470	N4-C1-S2	120,240
4	N4	-0,245	N3-H	1,002	C1-N3-C5	109,537
5	C5	0,017	N3-C5	1,470	N3-C5-O6	109,471
6	O6	-0,288	C5-H	1,070	C1-N4-C7	109,477
7	C7	0,018	C5-O6	1,430	N4-C7-O8	109,472
8	O8	-0,288	O6-H	0,960		
9	C9	0,017	N4-C7	1,470		
10	O10	-0,287	C7-H	1,071		
11			C7-O8	0,430		
12			O8-H	0,962		

По данным таблицы и рис. 2, электронные заряды на всех атомах кислорода гидроксильных групп почти одинаковы ( $q \approx -288e$ ), нежели различаются между собой только на  $\Delta q = \pm 0,001e$ . При этом максимальный отрицательный электронный заряд в молекуле несет атом N3 ( $q = -0,347e$ ). Потому на дальнейших

химических превращениях, согласно зарядовому контролю реакций, именно последний среди конкурирующих атомов является возможным центром электрофильной атаки.

**Список литературы:**

1. Азизов Т., Исаков Х., Брусков В. Квантово-химическое исследование строения и электронной структуры некоторых метиленовых производных тиокарбонида. // Узб. Хим. журн. -1996.- №5-6. - С. 7-11.
2. Набиев М.Н., Беглов Б.М., Садыков К.Г., Усманов С. Мочевино-формальдегидные удобрения. -Т.: Фан, 1991. - 240 с.
3. M.J.F. Frisch and etc. / Gaussian 98. Revision A.5, Gaussian Inc.- Pittsburg (PA), 1998.
4. Аскарлов И.Р., Киргизов Ш.М., Мамарахмонов М.Х., Алимбоев С.А. Синтез и квантово-химическое изучение реакции ацетилферроцена с изомерами аминобензойной кислоты. // Universum: Химия и биология : электрон. научн. журн. 2020. № 1(67). Стр 42-44.
5. Мамарахмонов М.Х., Беленький Л.И., Джураев А.М., Чувылкин Н.Д., Аскарлов И.Р.. Квантово-химическое изучение производных ферроцена. Сообщение 1. Реакции арилирования с аминобензойными кислотами // Изв. АН. Сер. хим. – 2017. - № 4. С. 721-723.
6. Мамарахмонов М.Х., Беленький Л.И., Чувылкин Н.Д., Аскарлов И.Р. Квантово-химическое изучение производных ферроцена. Сообщение 2. Реакции арилирования с аминофенолами // Изв. АН. Сер. хим. – 2017. - № 4. С. 724-726.