

**КВАНТОВО-ХИМИЧЕСКИЕ ИССЛЕДОВАНИЯ РЕАКЦИИ ТИОМОЧЕВИНЫ  
С ФОРМАЛЬДЕГИДОМ****Аскарлов Ибрагим Рахманович**

д-р хим. наук, проф.,  
Андижанский государственный университет,  
Республика Узбекистан, г. Андижан  
E-mail: [stek@inbox.ru](mailto:stek@inbox.ru)

**Исаков Хаегилла**

д-р техн. наук, проф.,  
Андижанский государственный университет,  
Республика Узбекистан, г. Андижан

**Мамарахмонов Мухаматдин Хомидович**

PhD, доц.  
Андижанский государственный университет,  
Республика Узбекистан, г. Андижан  
E-mail: [muhamatdin@mail.ru](mailto:muhamatdin@mail.ru)

**Тураханов Шохрух**

соискатель,  
Андижанский государственный университет,  
Республика Узбекистан, г. Андижан

**Махмудов Равшан Умарович**

ст. науч. сотр.,  
АО «Институт химических наук им. Бектурова»,  
Республика Казахстан, г. Алма-Ата

**Усмонов Султан**

д-р техн. наук., проф.,  
АО «Институт химических наук им. Бектурова»,  
Республика Казахстан, г. Алма-Ата

**QUANTUM CHEMICAL STUDIES OF THE REACTION OF THIUREA  
WITH FORMALDEHYDE****Ibragim Askarov**

Doctor of chem. sci., professor, Andijan State University,  
Republic of Uzbekistan, Andijan

**Khayatulla Isakov**

DSc, prof. Andijan State University,  
Republic of Uzbekistan, Andijan

**Mukhamatdin Mamarakhmonov**

PhD, Associate professor, Andijan State University,  
Republic of Uzbekistan, Andijan

**Ravshan Makhmudov**

Sci. researcher of Bekturov Institute of chem. Sciences,  
Republic of Kazakhstan, Alma-Ata

**Sultan Usmanov**

DSc, prof. of Bekturov Institute of Chem. Sciences,  
Republic of Kazakhstan, Alma-Ata

## АННОТАЦИЯ

С помощью современного квантово-химического метода DFT/B3LYP изучено пространственное и электронное строение тиомочевина и формальдегида. На основе результатов теоретических расчетов проведены реакции по синтезу различных олигомеров.

## ABSTRACT

The electronic structure of thiourea and formaldehyde has been studied by the modern quantum-chemical method DFT / B3LYP. Based on the results of theoretical calculations, reactions for the synthesis of various oligomers were carried out.

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

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

В литературе широко известны методы синтеза олигомеров из диаминов посредством карбоновых кислот [2]. Обычно в таких реакциях в первую оче-

редь атаку осуществляет электрофиль, процесс протекает с выделением воды. Реакция проводится в щелочной среде.

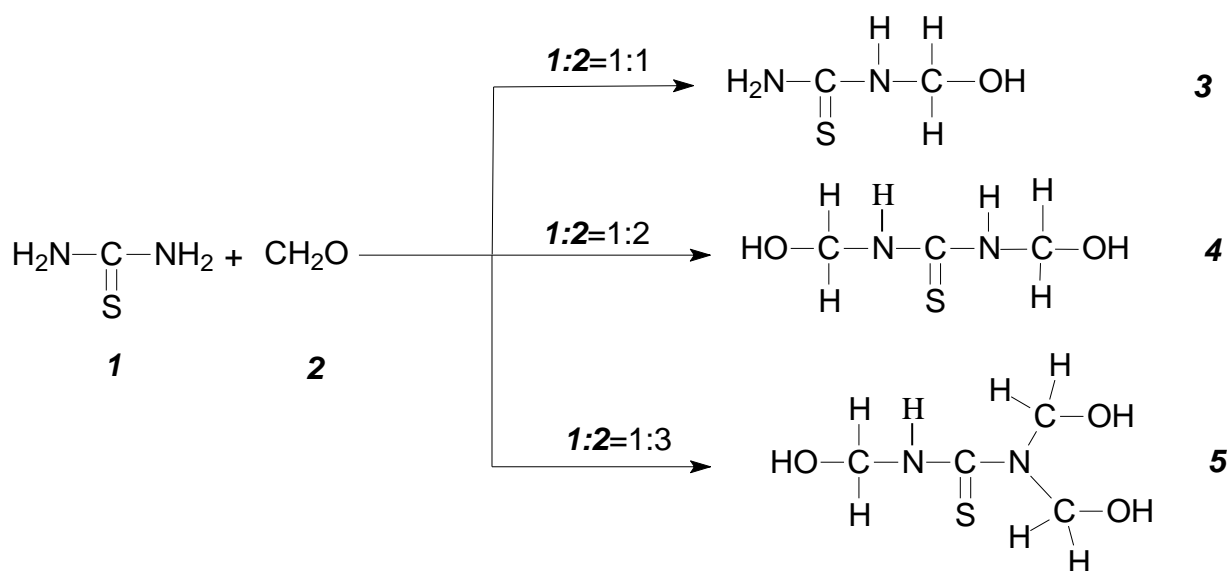


Схема 1. Пути синтеза олигомеров из тиомочевина и формальдегида

Нами проведены квантово-химические расчеты реагентов (тиомочевина и формальдегида) как в газовой фазе, так и в среде модельного раствора щелочи.

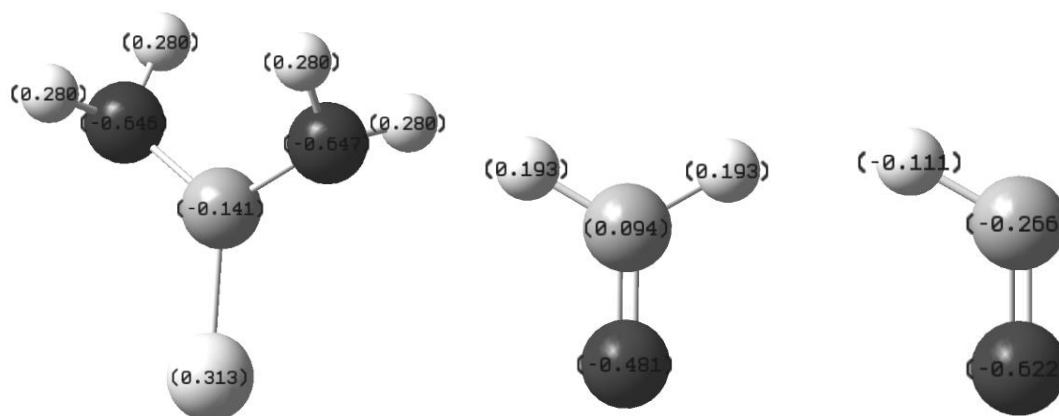


Рисунок 1. Электронные заряды на атомах реагентов

Для определения реакционной способности реагентов нами проведены расчеты молекулярного аниона метилкарбоновой кислоты, аниона формальдегида отщеплением из ее молекулы одного протона в среде щелочи для сравнения энергии депротонирования реагентов. При этом, как видно из рис. 2, в анионе на углеродном атоме скапливается отрицательный заряд, равный  $q = -0,266e$ .

Продукты реакции тиомочевины и формальдегида зависят от мольного соотношения реагентов. Например, при соотношении реагентов 1:1; 1:2; и 1:3 соответственно получали монометилолмочевину, диметилолмочевину и триметилолмочевину как основные продукты реакции.

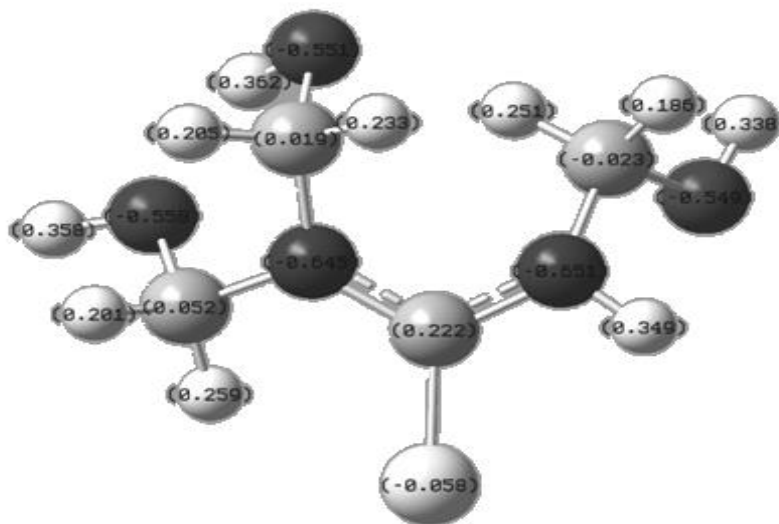


Рисунок 2. Электронное строение триметилолмочевины

Представляет теоретический интерес изучение реакционной способности и путей синтеза триметилолмочевины для проведения селективного синтеза. Для выявления условий синтеза этой реакции нами проведены квантово-химические расчеты по методу DFT-B3LYP по программе Gaussian 98 [1]. Ниже представлена схема распределения электронных зарядов на атомах продукта 5.

#### Экспериментальная часть

**Синтез монометилолтиомочевины.** В колбе, оборудованной магнитной мешалкой, растворяли 152 г (2 моль) монометилолмочевины (Мт) в 152 мл воды. Водный раствор нагревали до 40 °С до полного растворения Мт. В другую колбу положили 162,5 г 34 %-ного формалина, 10 %-ный раствор аммиака медленно добавляли до показателя рН 8,3.

Оба раствора объединили в 3-горлую колбу, оборудованную магнитной мешалкой, термометром и делительной воронкой, и установили в водяную баню. В колбу добавили раствор формалина. Раствор Мт добавляли через делительную воронку порциями в течение 30 мин. Затем перемешивали при 10 °С в течение 4 часов. Затем раствор встряхивали и выливали в кристаллизатор, оставили на сутки и получили белый осадок. Осадок отфильтровали, перекристаллизовали и высушили. Выход продукта составляет 91,4 %.

По указанному методу, изложенному выше в соотношениях согласно схеме 1, получили диметилолмочевину 4 (выход продукта – 86,1 %) и триметилолмочевину 5 (выход – 78,9 %).

#### Список литературы:

1. Квантово-химические исследования пиримидин-4-онов сообщение 3. \* 2-оксо(тиоксо, селеноксо)пиримидин-4-оны и 5,6-диметил-2-оксо(тиоксо)тиено[2,3-d]пиримидин-4-оны / М.Х. Мамарахмонов, Л.И. Беленький, Н.Д. Чувылкин, М.А. Аширматов [и др.] // Изв. АН. Сер. хим. – 2014. – № 2. – С. 350–354.
2. Мочевино-формальдегидные удобрения / М.Н. Набиев, Б.М. Беглов, К.Г. Садыков, С. Усманов. – Ташкент : Фан, 1991. – 240 с.
3. M.J. F Frisch and etc. Gaussian 98, Revision A. 5, Gaussian Inc. – Pittsburgh (PA), 1998.