Абилканова Фарида Жумагельдыевнаның
«6D060600 – Химия» мамандығы
философия докторы (PhD) ғылыми дәрежесін алу үшін ұсынылған
диссертацияға

АННОТАЦИЯ

Қышқылдар мен негіздердің сусыз ерітінділеріндегі жылдам протондану реакцияларының кинетикасын ЭПР спектроскопиялық және кванттық-химиялық зерттеу

Жұмыстың жалпы сипаттамасы. Диссертациялық жұмыс ЭПР-спектроскопия және кванттық-химиялық модельдеу әдістерін қолдана отырып, сусыз ерітінділердегі органикалық қышқылдар мен негіздер арасында жүретін жылдам протолиттік реакциялардың механизмдері мен кинетикасын зерттеуге арналған. Модельдік объектілер ретінде толуол ортасында әртүрлі органикалық қышқылдармен және негіздермен әрекеттесетін тұрақты семихинон радикалдары, атап айтқанда 3,6-ди-*трет*-бутил-2-оксифеноксил пайдаланылды. Бұл радикалдар протонды тасымалдау және алмасу жылдамдығының константаларын жоғары сезімталдықпен бағалау үшін спиндік зондтар қызметін атқарды.

Эксперименттік және теориялық мәліметтерді алу молекулааралық протон тасымалының механизмдерін, соның ішінде электронның алдын ала тасымалдануымен қатар жүретін ықтимал екі сатылы процестерді тереңірек түсінуге мүмкіндік береді. Сусыз қышқылдық-негіздік жүйелерге қолданылуына баса назар аударыла отырып, сутек атомының тасымалы және протонмен байланысқан электрон тасымалы сияқты баламалы механикалық схемалар қаралды.

ЭПР әдісімен алынған кинетикалық мәліметтер негізінде Белл–Лимбах моделін қолдана отырып есептеулер жүргізілді, бұл органикалық сусыз орта жағдайында «қышқыл–радикал» жүйесіндегі протон алмасуын сандық түрде сипаттауға мүмкіндік берді. Мұндай тәсіл заряд пен массаның тасымалдану процестерін тереңірек сипаттауға, сондай-ақ реакциялардың энергетикалық параметрлерін нақтылауға жағдай жасады.

Жұмыс эксперименттік және теориялық әдістерді, соның ішінде физика-химиялық талдауды, кванттық-химиялық модельдеуді және спектроскопиялық мәліметтерді интерпретациялауды біріктіреді, бұл оны протонды тасымалдаудың заманауи теориясы мен органикалық жүйелердегі қышқылдық-негіздік әрекеттесулерді дамытуға қосылған елеулі үлес етеді.

Жұмыстың өзектілігі. Физикалық химияның негізгі бағыттарының бірі - протолиттік реакцияларды зерттеу. Бұл әртүрлі сулы емес орталарда жүретін қышқыл-негіздік өзара әрекеттесулердің табиғатын түсіну үшін шешуші маңызға ие. Сулы емес орталардағы протонның тасымалдануы мен алмасу механизмдері әлі де жеткілікті зерттелмеген. Олардың ерекшеліктері

сольватация әсерлеріне, ортаның диэлектрлік өтімділігіне, еріткіштің сутектік байланыстар мен молекулалық және иондық комплекстер түзу қабілетіне байланысты.

Сулы емес ортада протолиттік реакциялар көбінесе дәстүрлі әдістермен зерттеу қиын болатын қысқа өмір сүретін аралық күйлер арқылы жүреді. Қазіргі заманғы эксперименттік және теориялық әдістер, атап айтқанда, динамикалық ЭПР-спектроскопия және тығыздық функционалы теориясы (DFT), тұрақты радикалдар қатысатын сусыз жүйелердегі протонның тасымалдану механизмдері мен протолиттік реакциялардағы кванттық туннельдеу әсерлерін терең зерттеуге бірегей мүмкіндіктер береді.

Қазіргі уақытта физика-химиялық талдаудың өзекті бағыттарының бірі - протонның тасымалдануының кинетикалық деректерін талдау үшін Белл-Лимбах моделін қолдану. Бұл әдіс протолиттік реакциялардың механизмдерін тереңірек түсінуге, атап айтқанда, төмен температураларда байқалатын протонның тасымалдану процестеріндегі кванттық туннельдеу әсерінің үлесін анықтауға мүмкіндік береді.

Зерттеудің мақсаты. Диссертациялық жұмыстың мақсаты — ЭПР-спектроскопия және кванттық-химиялық модельдеу әдістерін қолдана отырып, органикалық еріткіштердегі жылдам молекулааралық қышқылдық-негіздік реакциялардың механизмдерін болжау.

Зерттеудің міндеттері:

- семихинонды радикалдардың қатысында протонды тасымалдау және алмасуының жалпы екі арналы механизмін әзірлеу;
- қышқылдар мен негіздердің 3,6-ди-*трет*-бутил-2-оксифеноксилмен протолитикалық реакцияларының кинетикасын есептеу үшін ЭПР динамикалық спектрлерін модельдеу бағдарламасын жаңғырту;
- туннельдеудің кванттық әсерлерін бағалау үшін кинетикалық мәліметтерге талдау жүргізу;
- органикалық жүйелер мен олардың кешендерінің механизміне кванттық-химиялық модельдеу жүргізу және олардың реакциялық қабілетін бағалау.

Зерттеу әдістері: Жұмыстың әдістеріне сусыз ортадағы тұрақты семихинон радикалдары мен органикалық қышқылдар мен негіздер арасындағы жылдам протолиттік реакциялардың кинетикасы мен механизмдерін эксперименталды және теориялық тұрғыдан зерттеу жатады.

Эксперименталды өлшеулер академик Е.А. Бөкетов атындағы Қарағанды ұлттық зерттеу университетінің спектроскопия зертханасында жүргізілді. Бұл зертхана термостаттау жүйесі бар РЭ-1306 радиоспектрометрмен, вакуумдық тазарту, бос радикалдарды генерациялау қондырғыларымен, сондай-ақ реагенттерді синтездеу мен сақтауға арналған жабдықтармен жарақтандырылған. Теориялық ЭПР спектрлерін модельдеу үшін Fortran тіліндегі мамандандырылған есептеу бағдарламасы қолданылды, ол эксперименталды мәліметтерді сандық өңдеуге, спектрлік сызықтардың пішінін модельдеуге және зерттелетін реакциялардың кинетикалық

параметрлерін есептеуге мүмкіндік береді. ЭПР-спектроскопия әдісімен алынған кинетикалық мәліметтер негізінде, Белл–Лимбах моделін пайдалана отырып, протон тасымалы процестеріне кванттық туннельденудің қосқан үлесі есептелді.

Кванттық-химиялық модельдеу үшін Gaussian 2016 (АҚШ) және Firefly v.8.2.0 заманауи лицензиялық бағдарламалық пакеттері пайдаланылды. Тығыздық функционалы теориясы (DFT) және көпконфигурациялы корреляция әдістері негізінде протон тасымалының механизмдері зерттелді, реакциялардың энергетикалық параметрлері есептелді, сондай-ақ зерттелетін молекулалық жүйелердегі аралық күйлердің табиғаты мен электрондық құрылымының ерекшеліктері анықталды.

Қорғауға ұсынылатын негізгі тұжырымдар:

1. Тұрақты семихинон радикалы 3,6-ди-трет-бутил-2-оксифеноксилдің қос протолиттік табиғаты оның сутек атомының гомолитикалық өте жылдам тасымалдану процестерімен шартталатыны расталды, бұл оның қышқылдық және негіздік протолиттік әрекеттесулерге қатысу қабілетін анықтайды.

2. Уақытқа тәуелді ЭПР-сигналдарын талдауға арналған радикалдық спин-зондтардың теориялық-кинетикалық тәсілі әзірленді. Ол модификацияланған Блох теңдеуіне негізделіп, Фортран тілінде бағдарламалық түрде іске асырылды және бейсулы ортадағы жылдам протолиттік процестер кинетикасын сандық сипаттауға мүмкіндік береді.

3. Толуолда дикарбон қышқылдарының жылдам протолиттік реакцияларында протонның кванттық туннельдеу құбылысына қатысуы Белл–Лимбах моделі шеңберінде эксперименттік деректерді талдау арқылы көрсетілді.

4. DFT және көпконфигурациялық корреляция (MCSCF/CAS, XMCQDPT) әдістері қолданылған «радикал I – қышқыл» жүйелерін кванттық-химиялық зерттеу протон тасымалы сатыларын анықтауға мүмкіндік берді және 3,6-ди-трет-бутил-2-оксифеноксил – қышқыл жүйелерінде негізінен сутек атомын тасымалдау (HAT) механизмі жүзеге асатынын көрсетті.

Зерттеудің негізгі нәтижелерінің сипаттамасы:

1. Жүргізілген кешенді зерттеу сусыз орталардағы жылдам протолитикалық реакцияларды зерттеу үшін динамикалық ЭПР-спектроскопия әдісінің жоғары тиімділігін растады. Оксифеноксил радикалдарын, атап айтқанда 3,6-ди-*трет*-бутил-2-оксифеноксилді қолдану протонды алмасу барысындағы өзгерістерді жоғары уақыттық ажыратылымдықпен тіркеуге және реакциялардың кинетикалық параметрлерін анықтауға мүмкіндік берді.

2. Алғаш рет толуолдың полярлы емес ортада тұрақты радикалының I құрылымы әртүрлі бірқатар дикарбон қышқылдарымен әрекеттесуі туралы эксперименталды мәліметтер алынды. Сусыз орта жағдайында осы қышқылдардың протонодонорлық қабілетінің ерекшеліктері анықталды және ЭПР әдісінің әлсіз молекулааралық әрекеттесулерге жоғары сезімталдығы көрсетілді.

3. DFT және Белл–Лимбах моделін қолдана отырып, «радикал–қышқыл» жүйелеріндегі қос протонды тасымалдауды (DPT) теориялық модельдеу эксперименттік белсендіру энергияларын сенімді жаңғырту үшін дисперсиялық және корреляциялық әсерлерді ескеру қажет екенін көрсетті. HAT (сутегі атомын тасымалдау) механизмі мұндай жүйелердегі негізгі жол ретінде расталды.

4. Потенциалды энергия профильдерін есептеу және IRC әдісімен реакция жолын талдау молекулааралық сутектік байланыстың симметриялық сипатын және DPT кезінде айтарлықтай геометриялық қайта құрылулардың болмайтынын растады, бұл Белл–Лимбах моделінің болжамдарына сәйкес келеді.

5. Семихинонды радикалдардың алифатты дикарбон қышқылдарымен әрекеттесуін кванттық-химиялық зерттеу көміртегі тізбегінің ұзындығы артқанда, OH-топтары мен еселі байланыстар енгізілгенде сутектік байланыстардың әлсіреу заңдылықтарын, сондай-ақ неғұрлым поляризацияланатын еріткіштерде энергетикалық кедергінің өсуін анықтады.

6. Димеризация энергиясына әсер ететін құрылымдық факторлар анықталды: метилен топтары санының артуы сутектік байланыстардың күшеюіне ықпал етеді, ал қанықпағандық және электронды-белсенді орынбасарлар оны әлсіретеді. HOMO–LUMO энергетикалық саңылауларын талдау зерттелетін кешендердің электрондық тұрақтылығын бағалауға мүмкіндік берді.

7. Радикалымен I кешендердегі радикал-орынбасқан бензой қышқылдарына жүргізілген DFT-зерттеу реакция механизмі мен зерттелетін жүйелердің салыстырмалы энергетикасын сипаттайтын есептік және эксперименттік деректердің сапалық сәйкестігін көрсетті. Еріткіштің әсерін PCM әдісімен есепке алу толуол молекулаларын айқын модельдеусіз оның ықпалын бағалауға мүмкіндік берді, сондықтан есептік нәтижелер процестердің сапалық сипаттамасы ретінде қарастырылады. Спиндік тығыздықтың, зарядтардың және дипольдік моменттердің таралуы HAT механизміне сәйкес келеді.

8. Автор әзірлеген Фортран тіліндегі динамикалық ЭПР-спектрлерін модельдеу бағдарламасы протонды алмасу және таутомерлік ауысу жылдамдықтарын есептеуде өзінің практикалық маңыздылығын көрсетіп, органикалық жүйелердегі протолитикалық процестерді талдау құралдарын кеңейтті.

9. Алынған нәтижелер сусыз орталардағы қышқылды-негізді әрекеттесу механизмдері туралы түсініктерді айтарлықтай тереңдетеді, ЭПР-спектроскопиясының радикалды химияны зерттеу әдісі ретіндегі әмбебаптығы мен сезімталдығын дәлелдейді және протонды тасымалдауды басқаруға негізделген функционалды материалдар мен катализаторларды жобалау үшін жаңа перспективалар ашады.

Зерттеудің ғылыми жаңалығы. Жұмыс сусыз ортадағы протон тасымалы теориясын түсіну үшін, сондай-ақ протондану процестерін

зерттеуде ЭПР-спектроскопия мен кванттық-химиялық модельдеуді қолдану әдіснамасы үшін шешуші мәні бар жаңа нәтижелерді береді:

- Тұрақты семихинон радикалдарының реакциялық қабілетінің механизмдері мен кинетикасын екі арналы протонирлеу механизмі бойынша талдау мақсатында аналитикалық зерттеулер жүргізілді;
- 3,6-ди-трет-бутил-2-оксифеноксил тұрақты семихинон радикалы мен әртүрлі органикалық қышқылдар, соның ішінде дикарбон қышқылдары мен орынбасқан бензой қышқылдары, сондай-ақ бірқатар негіздер арасындағы протондардың жылдам тасымалдануы мен алмасу механизмі ЭПР-спектроскопиясы және кванттық-химиялық әдістерді қолдану арқылы эксперименттік және теориялық тұрғыдан дәлелденді;
- Радикалдық жүйелердегі молекулааралық протон тасымалы мен таутомерлік ауысулар реакцияларының кинетикалық параметрлерін есептеу және динамикалық ЭПР-спектрлерін модельдеу үшін Фортран тілінде арнайы бағдарлама әзірленді;
- Протон тасымалы процестеріндегі кванттық туннельдеу эффектілерінің үлесін анықтау үшін алғаш рет Белл–Лимбах моделі шеңберінде есептеулер жүргізілді;
- Firefly-8.2.0 бағдарламасын қолдана отырып, радикал I – қымыздық қышқылы жүйесі үшін электрондық-адиабаталық потенциалдық энергия қисықтары тұрғызылды. Есептеулер толық белсенді кеңістіктегі MCSCF әдісімен орындалып, энергия корреляциясы XMCQDPT әдісімен толықтырылды;
- 3,6-ди-трет-бутил-2-оксифеноксил – дикарбон қышқылдары жүйелеріндегі қос протон тасымалы реакциясының потенциалдық энергия профилі DFT (B3LYP/6-31+G(d,p)) әдісімен есептелді;
- B3LYP әдісімен жүргізілген кванттық-химиялық есептеулер екі негізді карбон қышқылдарының құрылымына байланысты молекулааралық сутектік байланыстар энергиясы өзгеретінін көрсетті. Метилен топтарының саны артқан сайын димеризация энергиясы жоғарылайды, ал қос байланыстар мен орынбасарлар керісінше әсер етеді. Граничті молекулалық орбитальдар арасындағы энергетикалық алшақтық көміртек қаңқасы ұзарған сайын артады, ал қанықпаған және орынбасқан қосылыстарда төмендейді;
- Семихинон радикалының екі негізді алифаттық қышқылдармен комплекс түзуін зерттеу барысында гомологтық қатарда қышқылдардың құрылымымен байланысты сутектік байланыстардың әлсіреуі анықталды. Мысалы, малеин қышқылы жүйесінде еріткіштің поляризациялық қабілетінің артуы активация параметрлерінің жоғарылауына әкелетіні байқалды, бұл комплекстегі сутектік байланыстың күшеюін көрсетеді;
- 3,6-ди-трет-бутил-2-оксифеноксил – орынбасқан бензой қышқылдары жүйесінде алғаш рет тығыздық функционалы теориясы (DFT) TS, QST3, IRC әдістерін және PCM, CPCM еріткіш модельдерін кешенді түрде қолдану арқылы іске асырылды. Бұл протон тасымалы процесіне реакция жолы мен ортаның әсерін дәл сипаттауға мүмкіндік берді;

- Радикал I — o-NBA жүйесінде заряд, диполь моменті, электростатикалық потенциал және спин тығыздығын талдау негізінде сутек атомын тасымалдау (HAT) механизмі расталды. Алынған нәтижелер протон алмасу динамикасын зерттеуде DFT модельдеудің тиімділігін көрсетті.

Алынған зерттеу нәтижелерінің маңыздылығы.

Диссертациялық жұмыста алынған нәтижелер физикалық химияны, химиялық кинетиканы, радиоспектроскопияны және кванттық химияны дамыту үшін маңызды ғылыми және практикалық мәнге ие.

Зерттеудің ғылыми маңыздылығы тұрақты семихинон радикалдарының қатысуымен сусыз ортадағы жылдам протолиттік реакциялардың механизмдерін кешенді эксперименталды және теориялық тұрғыдан зерттеумен анықталады. Алынған нәтижелер протон тасымалы процестері, қышқылдық-негіздік әрекеттесу заңдылықтары және сұйық фазадағы протондану реакцияларындағы кванттық туннельденудің рөлі туралы іргелі түсініктерді кеңейтеді. ЭПР-спектроскопияның кинетикалық мәліметтері мен кванттық-химиялық есептеулер негізінде әртүрлі сусыз еріткіштердегі реакциялардың жүру ерекшеліктері анықталды, сондай-ақ энергетикалық сипаттамалар мен аралық күйлердің түзілу механизмдері айқындалды.

Зерттеудің ғылыми-практикалық тиімділігі егжей-тегжейлі зерттелген 3,6-ди-трет-бутил-2-оксифеноксил радикалын аналитикалық, физикалық және органикалық химияда спиндік зонд ретінде пайдалану мүмкіндігінде жатыр. Әзірленген тәсілдер, соның ішінде Fortran тіліндегі мамандандырылған бағдарламалық жасақтаманы қолдана отырып спектрлерді модельдеу, әртүрлі қышқылдар мен негіздердің протондану жылдамдығының константаларын сандық түрде анықтауға, сондай-ақ сусыз ортадағы қышқылдық-негіздік әрекеттесулердің ерекшеліктерін болжауға мүмкіндік береді.

Жұмыстың практикалық маңыздылығы алынған нәтижелерді органикалық және биологиялық белсенді қосылыстардың реакциялық қабілетін зерттеудің жаңа әдістерін әзірлеуде, табиғи және химиялық-технологиялық процестерді модельдеуде, сондай-ақ протондану ортасының өзгерістеріне сезімтал сенсорлық жүйелер мен қосымша материалдарды жасауда қолдану мүмкіндігімен байланысты. Алынған мәліметтер сусыз ерітінділердегі заттардың қышқылдық-негіздік қасиеттерін болжау үшін және жаңа функционалдық материалдарды әзірлеу кезінде пайдаланылуы мүмкін.

Ғылымның даму бағыттарына немесе мемлекеттік бағдарламаларға сәйкестігі:

Ғылыми бағыт «Математика, механика, астрономия, физика, химия, биология, информатика және география салаларындағы іргелі және қолданбалы зерттеулер» атты мамандандырылған ғылыми бағытқа сәйкес келеді. Бұл бағыт «Елдің зияткерлік әлеуеті» басым бағытының құрамына кіреді.

Автордың жеке үлесі диссертациялық зерттеу аясындағы эксперименталды жұмыстарды тікелей жүргізуден, алынған нәтижелерді өңдеуден, оларды интерпретациялаудан және ғылыми тұжырымдарды

қалыптастырудан, сондай-ақ зерттеу нәтижелерін жариялау үшін ғылыми мақалалар мен баяндамаларды дайындаудан тұрады. Жұмыстар келесі ғылыми мақалаларда жарияланған:

1. S.N. Nikolskiy, F.Zh. Abilkanova, Kurmanova, A.F., Rakhim R. R. Proton Exchange Between 3,6-Di-Tert-Butyl-2-Hydroxyphenoxyl and Dicarboxylic Acids Studied by Electron Spin Resonance Spectroscopy and Density Functional Theory Calculations // CHEMPHYSCHEM. – 2025. – Vol. 26(20). – P. e202500306. DOI: https://doi.org/10.1002/cphc.202500306. [IF (2025) = 2.2 (Q3)]. - Динамикалық ЭПР-спектроскопия және кванттық-химиялық есептеулер әдістерін қолдана отырып, сусыз ортада 3,6-ди-трет-бутил-2-гидроксифеноксил радикалы мен дикарбон қышқылдары арасындағы молекулааралық протон алмасудың кинетикасын, механизмін және энергетикалық сипаттамаларын зерттеу.
2. Kurmanova, A.F., Abilkanova, F.Zh., Pustolaikina, I.A., & Nikolskiy, S.N. (2023). DFT Study of Intermolecular Proton Exchange with Some Derivatives of Benzoic Acids. Eurasian Journal of Chemistry, 111(3), 143-151. https://doi.org/10.31489/2959-0663/3-23-14 - Протон алмасудың табиғатын анықтау және жүзеге асырылатын реакция механизмін айқындау үшін тығыздық функционалы теориясының әдістерін қолдана отырып, орын басқан бензой қышқылдарының 3,6-ди-трет-бутил-2-гидроксифеноксил радикалымен кешендеріндегі молекулааралық протон тасымалының механизмі мен динамикасын теориялық тұрғыдан зерттеу.
3. Kurmanova, A.F., Abilkanova, F.Zh., Rakhimzhanova, A.S., & Pustolaikina, I.A. (2022). DFT Study of Complexation Reactions Involving Dicarboxylic Acids: Hydrogen Bonds, Influence of Solvent Nature. Bulletin of the University of Karaganda – Chemistry, 106(2), 43-51. https://doi.org/10.31489/2022Ch2/2-22-21 - Кейбір дикарбон қышқылдарының протолиттік қасиеттерін, олардың димерленуге және 3,6-ди-трет-бутил-2-гидроксифеноксилді семихинон радикалымен кешен түзуге қабілеттілігін кванттық-химиялық зерттеу, сондай-ақ қышқылдар құрылымы мен еріткіш табиғатының протон тасымалы реакцияларының энергетикалық және кинетикалық параметрлеріне әсерін зерттеу.
4. Stadnik, I.L., Abilkanova, F.Zh., Kudryavtseva, Ye.V., Nikolskiy, S.N., & Masalimov, A.S. (2022) ESR-Study of the Proton Exchange with Aliphatic Amino Acids in Toluene. Bulletin of the University of Karaganda – Chemistry, 106(2), 69-76. https://doi.org/10.31489/2022Ch2/2-22-15 - Сусыз ортада динамикалық ЭПР-спектроскопия әдісімен 3,6-ди-трет-бутил-2-гидроксифеноксил радикалы мен аминокапрон қышқылының изомерлері арасындағы молекулааралық протон алмасудың кинетикасы мен энергетикалық параметрлерін зерттеу.
5. S.N. Nikolskiy, F.Zh.Abilkanova, A.S. Golovenko, I.A. Pustolaikina, A.S. Masalimov. Investigation of intermolecular proton exchange of 3,6-di-tert-butyl-2-oxyphenoxyl with N-phenylanthranilic acid by ESR spectroscopy method // Bulletin of the Karaganda University. Chemistry Series. – 2020. – Vol. 2(98). – P. 35-41. https://doi.org/DOI 10.31489/2020Ch2/35-41 - Сусыз ортада реакцияның кинетикалық және активациялық параметрлерін анықтау үшін спектрлерді

компьютерлік модельдеуді қолдана отырып, динамикалық ЭПР-спектроскопия әдісімен 3,6-ди-трет-бутил-2-гидроксифеноксил радикалы мен N-фенилантранил қышқылы арасындағы молекулааралық протон алмасудың кинетикасын зерттеу.

6. Никольский С.Н., Абилканова Ф.Ж., Катбашев А.Е., Масалимов А.С. Спиновые зонды семихинонного типа: Материалы международной научно-практической конференции «Наука, образование и производство в условиях Четвертой промышленной революции», – Караганда: Изд-во КарГУ, 2018. - С. 494-497. - ЭПР-спектроскопия әдісімен қышқылдық-негіздік әрекеттесулерді және жылдам протон алмасу процестерін зерттеу үшін семихинон типті спиндік зондтарды қолдану мүмкіндіктерін зерттеу.

7. Никольский С.Н., Катбашев А.Е., Абилканова Ф.Ж., Тур А.А., Масалимов А.С. Протолитическая способность некоторых аминов: ТРУДЫ Международной научно-практической конференции «Интеграция науки, образования и производства – основа реализации Плана нации» (Сагиновские чтения № 10) 14-15 июня 2018 г. Часть VII, - Караганда: Изд-во КарГТУ, 2018. - С. 119-120. - Семихинон спиндік зондын қолдана отырып, ЭПР-спектроскопия әдісімен кейбір аминдердің протолиттік қабілетін зерттеу және олардың қышқылдық-негіздік қасиеттерін бағалау.

8. Abai S. Masalimov, F.Zh. Abilkanova, Sergey N. Nikolskiy, Rakhim R. Rachimov. The mechanism of the fast protolytic acid-base reactions in solutions: XIth EFEPR Conference, 1-5 September 2019, Bratislava (Slovakia). – P. P46 URL: https://efepr2019.conference.fchpt.stuba.sk/book-high-res.pdf - ЭПР-спектроскопия және кванттық-химиялық талдау әдістерін қолдана отырып, ерітінділердегі жылдам протолиттік қышқылдық-негіздік реакциялардың механизмдерін зерттеу.

Осы диссертациялық жұмыстың негізгі ережелері Қазақстан Республикасы Ғылым және жоғары білім саласындағы сапаны қамтамасыз ету комитеті ұсынған рецензияланатын журналдарда ұсынылып, онда 4 мақала жарық көрді. Жүргізіліп жатқан зерттеулердің өзектілігін растау ретінде 1 мақала Web of Science және Scopus деректер қорына кіретін халықаралық рецензияланатын журналдарда жарияланды. Сондай-ақ, диссертациялық жұмыс міндеттерінің орындалу нәтижелері бойынша авторлық бірлестікте жақын және алыс шетелдердегі халықаралық конференцияларда 3 тезис жарияланды.