

Сведения об официальном оппоненте

по диссертации Гнатовского Григория Руслановича «Квантовохимическое исследование механизмов образования пиразолов и 2-пиразолинов из ацетиленов, кетонов, гидразина и его производных в суперосновных средах»

ФИО оппонента	Хурсан Сергей Леонидович
Дата рождения, гражданство	12.04.1961, Российская Федерация
Почтовый адрес, телефон (при наличии), адрес электронной почты	450054, Россия, г. Уфа, пр. Октября, 71 +7 (347) 235-55-60 KhursanSL@anrb.ru
Ученая степень (с указанием отрасли науки, шифра и наименования научной специальности, по которым защищена диссертация)	Доктор химических наук 02.00.04. Физическая химия
Ученое звание	Профессор
Полное наименование организации, являющейся основным местом работы оппонента на момент представления отзыва	Уфимский институт химии – обособленное структурное подразделение Федерального государственного бюджетного научного учреждения Уфимского федерального исследовательского центра Российской академии наук
Должность, занимаемая оппонентом в организации	Главный научный сотрудник, заведующий лабораторией
Наименование подразделения	Лаборатория химической физики
Другие места работы	Нет
Список основных публикаций оппонента по теме диссертации в рецензируемых научных изданиях за последние 5 лет (не более 15)	1. Recombination luminescence of irradiated poly(diphenylene phthalide) film at cryogenic conditions / M.Yu. Ovchinnikov, V.A. Antipin, S.L. Khursan // Journal of Photochemistry and Photobiology A: Chemistry. — 2026. — Vol. 471. — 116680. DOI: 10.1016/j.jphotochem.2025.116680

публикаций)

2. MD + QC methodology for studying the interaction of bioactive molecules with amino acids: The case of arbidol interaction with aromatic amino acids and its spectral-luminescent validation / S.S. Borisevich, E.M. Khamitov, G.A. Masyagutova, O.I. Yarovaya, **S.L. Khursan** // *Scientia Pharmaceutica*. — 2026. — Vol. 94, №1. — P. 20. DOI: 10.3390/scipharm94010020
3. Standard enthalpies of formation of ortho- and meta-substituted phenyl nitroso oxides from homodesmotic and G4 measurements / **S. Khursan**, A. Yarullin // *Turkish Computational and Theoretical Chemistry*. — 2026. — Vol. 10, №2. — P. 81-93. DOI: 10.33435/tcandtc.1627564
4. Complete set of isodesmic reactions for the accurate thermochemistry of three- and four-atom cno-compounds / **S.L. Khursan**, E.S. Akhmetshina // *Journal of Molecular Graphics and Modelling*. — 2026. — Vol. 147. — 109478. DOI: 10.1016/j.jmgm.2026.109478
5. Tuning of thiazolopyrazole luminescent properties by structural variation of thiazolyl, pyrazolyl, and styryl blocks / **S.L. Khursan**, M.Yu. Ovchinnikov, G.A. Masyagutova, R.R. Kayumova, A.A. Tukhbatullin, A.A. Golovanov, S.A. Grabovskii // *Journal of Luminescence* — 2026. — Vol. 296. — 121971. DOI: 10.1016/j.jlumin.2026.121971
6. Catalysis of Cumene Oxidation by 2-Ethylhexanoates of the 12 Group of Metals: Experiment and Quantum Chemical Modeling / V.I. Anisimova, N.V. Ulitin, **S.L. Khursan**, A.A. Baldinov, I.A. Suvorova, I.S. Rodionov, D.A. Shiyan, Y.L. Lyulinskaya, K.A. Tereshchenko, N.M. Nurullina, S.N. Tuntseva, T.L. Puchkova, Kh.E. Kharlampidi, A.S. Novikov // *The Journal of Organic Chemistry* — 2025. — Vol. 90, N. 49. — P. 17538-17546. DOI: 10.1021/acs.joc.5c02655
7. DFT Equilibrium Thermodynamics of Lithium Polysulfides Transformations in Sulfolane Solution / M.Y. Ovchinnikov, E.V. Kuzmina, E.V. Karaseva, M. Zhao, Q. Zhang, B.Q. Li, **S.L. Khursan**, V.S. Kolosnitsyn // *International Journal of Quantum*

Chemistry — 2025. — Vol. 125, N. 19. — P. e70113. DOI: 10.1002/qua.70113

8. O-H/N-H bond dissociation energies in 1,4-hydroquinone, 4-hydroxydiphenylamine, N,N'-diphenyl-1,4-phenylenediamine, and their phenoxyl and aminyl radicals / **S.L. Khursan**, M.Yu. Ovchinnikov, V.T. Varlamov // Journal of Molecular Graphics and Modelling — 2025. — Vol. 136, N. 6. — P. 108959. DOI: 10.1016/j.jmgm.2025.108959

9. Regioselectivity control in the reaction of cross-conjugated enynones with monosubstituted hydrazines: Original synthesis of luminescent 5-styrylpyrazoles with a 1-benzo[d]thiazole ring / E.A. Zatynatskiy, I.S. Odin, D.M. Gusev, A.R. Zaiko, S.A. Sokov, A.S. Bunev, A.V. Vologzhanina, R.R. Kayumova, G.A. Masyagutova, **S.L. Khursan**, S.A. Grabovskiy, A.A. Golovanov // The Journal of Organic Chemistry. — 2025. — Vol. 90, №47. — P. 16870-16884. DOI: 10.1021/acs.joc.5c02458

10. Chiral discrimination during photoinduced electron transfer from L/D-tryptophan to electron-excited uranyl ion as a part of $\text{UO}_2^{2+} \subset \alpha\text{-CD}$ inclusion complex / R.R. Kayumova, **S.L. Khursan** // Journal of Photochemistry and Photobiology A: Chemistry. — 2025. — Vol. 459. — P. 116109. DOI: 10.1016/j.jphotochem.2024.116109

11. Acid-base properties and modeling by quantum chemistry of adhesion interactions at the interface of thermoplastic-aluminum systems / N.V. Ulitin, V.I. Anisimova, A.A. Baldinov, I.A. Suvorova, D.A. Shiyan, K.A. Tereshchenko, I.A. Starostina, **S.L. Khursan**, Y.O. Mezhev, Kh.E. Kharlampidi, O.V. Stoyanov // International Journal of Adhesion and Adhesives — 2024. — Vol. 132. — P. 103692. DOI: 10.1016/j.ijadhadh.2024.103692

12. Ligand-assisted excitation of Eu(III) during interaction of $\text{Eu}(\text{FOD})_3$ with xenon difluoride in acetonitrile solution / G.A. Masyagutova, A.V. Mamykin, **S.L. Khursan** // Journal of Fluorine Chemistry. — 2024. — Vol. 275. — P. 110270. DOI: 10.1016/j.jfluchem.2024.110270

- | | |
|--|---|
| | <p>13. Activation mechanisms of recombination processes in irradiated poly(arylenephthalides) / M.Yu. Ovchinnikov, V.A. Antipin, S.L. Khursan / Journal of Photochemistry and Photobiology A-Chemistry — 2024. — Vol. 448. — P. 115347. DOI: 10.1016/j.jphotochem.2023.115347</p> <p>14. Transformations of 4-R-6-oxohexa-2,4-diene nitrile oxides – intermediates of photooxidation of para-R-C₆H₄N₃, R = Ph, CH₂Ph, OPh / A.N. Teregulova, A.R. Yarullin, E.M. Chainikova, A.N. Lobov, R.L. Safiullin, S.L. Khursan // Tetrahedron. — 2024. — Vol. 153. — 133849. DOI: 10.1016/j.tet.2024.133849</p> <p>15. Comprehensive Study of the Mechanism of the "Aromatic Nitroso Oxide-Olefin" Interaction as a Function of the Reagents' Structure / A.R. Yarullin, S.L. Khursan // The Journal of Physical Chemistry A — 2023. — Vol. 127, N. 20. — P. 4415-4428. DOI: 10.1021/acs.jpca.3c00812</p> |
|--|---|

Официальный оппонент
«15» июля 2026 г.

С.Л. Хурсан

ПОДПИСЬ ЗАВЕРЯЮ:
УЧЕНЫЙ СЕКРЕТАРЬ УФИХ РАН
К. Х. Н. Е. А. В. ДРИНА