

Сведения об официальном оппоненте

по диссертации Конновой Марии Евгеньевны на тему «Термодинамика полициклических ароматических и азотсодержащих гетероциклических соединений - перспективных носителей водорода» на соискание ученой степени кандидата химических наук по специальности 1.4.4 - Физическая химия.

- 1. ФИО оппонента:** Хурсан Сергей Леонидович
- 2. Ученая степень, звание:** доктор химических наук, профессор
- 3. Специальность:** 02.00.04. (1.4.4.) Физическая химия
- 4. Основное место работы и должность:** заместитель директора Уфимского института химии – обособленного структурного подразделения Федерального государственного бюджетного научного учреждения Уфимский Федеральный исследовательский центр Российской академии наук (УФИХ УФИЦ РАН), заведующий лабораторией химической физики УФИХ УФИЦ РАН
- 5. Адрес организации:** 450054, г. Уфа, Проспект Октября, 71
- 6. Эл. почта и телефон:** khursansl@anrb.ru
тел.: +79174322426
- 7. Перечень основных публикаций оппонента по теме диссертации за последние 5 лет:**
 1. Khursan S.L. Heat Capacity Estimation Using a Complete Set of Homodesmotic Reactions for Organic Compounds, *Molecules* 2022, 27(22), 7814.
 2. Khursan S.L., Akhmetshina E. Determination of the Standard Enthalpies of Formation of Alkyl Radicals Using the Concept of a Complete Set of Homodesmotic Reactions, *SSRN*, 2022, P. 1-35.
 3. Ахметшина Е.С., Хурсан С.Л. Гомодесмотический метод определения энтальпий образования свободных оксильных радикалов. *Вестник Башкирского университета*, 2022. Т. 27. №3, с. 574-577.
 4. Akhmetshina E., Khursan S.L., Complete Set of Homodesmotic Reactions for the Analysis of Non-Valence Effects in the Three-to-Six-Membered Cyclic Organic Compounds. *Thermochimica Acta*, 2020, 685, P. 178541
 5. Ахметшина Е.С., Ахметьянова А.И., Исмагилова А.С., Хурсан С.Л. Гомодесмотический метод определения энтальпий образования свободных радикалов: первичные алкильные радикалы. *Вестник Башкирского университета*, 2020. Т. 25. №4, с. 731-735.
 6. Ахметшина Е.С., Хурсан С.Л. Гомодесмотический метод определения невалентных эффектов в ряду азотсодержащих циклических органических

соединений. *Известия Уфимского центра РАН*, 2019, №4, с. 87-92.

7. Хурсан С.Л., Исмагилова А.С., Зиганшина Ф.Т., Ахметьянова А.И. Конструирование полного набора гомодесмических реакций с использованием метода DEPTH-FIRST SEARCH. *Журнал физической химии*, 2021, том 95, №7, с. 1059-1067.

8. A. R. Yusupova, E.M. Chainikova, R.L. Safiullin, S.L. Khursan. Structure-activity relationship in the case of intramolecular ortho-cyclization of aromatic nitroso oxides: Inverted steric effect of substituent in the 2-R-C₆H₄NOO transformation. *Int. J. Quantum Chem.* 2019, V.120, e26094.

9. Ilyina M.G., Khamitov E.M., Ivanov S.P., Mustafin A.G., Khursan S.L. Theoretical Models for Quantitative Description of the Acid-Base Equilibria of the 5,6-Substituted Uracils. *J. Phys. Chem. A*, 2018, 122, 1, 341–349

10. M.Yu.Ovchinnikov, G.A.Masyagutova, S.L.Khursan. High Level Ab Initio Thermochemistry of XeF Radical. *Journal of Fluorine Chemistry*, 2018, V. 209, P. 1-5.