

СВЕДЕНИЯ

об официальном оппоненте

по диссертации Чуклиной Надежды Геннадьевны «Исследование механизмов миграции автолокализованной дырки в кристаллах щелочно-земельных фторидов методом молекулярной динамики» по специальности 1.3.8 – «Физика конденсированного состояния» на соискание ученой степени канд. физ.-мат. наук

Фамилия, имя, отчество	Афонин Андрей Валерьевич
Ученая степень, наименование отрасли науки, шифр и наименование научной специальности, по которой защищена диссертация	Доктор химических наук Диссертация на соискание ученой степени д.х.н. защищена по специальности 02.00.03 – органическая химия
Ученое звание	Профессор
Должность	Главный научный сотрудник
Наименование подразделения	Лаборатория неопределенных гетероатомных соединений
Полное и сокращенное наименование организации основного места работы в соответствии с уставом	ФГБУН Иркутский институт химии им. А.Е. Фаворского СО РАН
Учредитель организации основного места работы оппонента	Министерство науки и высшего образования Российской Федерации
Почтовый адрес организации основного места работы оппонента	Россия, 664033 г. Иркутск, Фаворского, 1.

Публикации в рецензируемых научных изданиях по теме диссертации за последние 5 лет (не более 15 публикаций):

1. Afonin A.V., Vashchenko A.V., Sigalov M.V. Estimating the energy of intramolecular hydrogen bonds from ^1H NMR and QTAIM calculations. *Organic and Biomolecular Chemistry*, 2016, V. 14, N 47, p. 11199–11211. <https://doi.org/10.1039/C6OB01604A>
2. Afonin A.V., Vashchenko A.V., Albanov A.I., Nosyreva V.I., Mal'kina A.G., Trofimov B.A. Study of spontaneous isomerization of diethyl 6,13-bis[(Z)-cyanomethylidene]-5,5,14,14-tetramethyl-4,15-dioxo-7,12-diazapentacyclo[9.5.2.0^{2,10}.0^{3,7}.0^{12,16}]octadeca-8,17-diene-10,17-dicarboxylate by ^1H , ^{13}C , ^{15}N spectroscopy. X-ray and quantum-chemical calculations data. *Magnetic Resonance in Chemistry*, 2017, V. 55, N 6, p. 563–569. doi: 10.1002/mrc.4551
3. Afonin A.V., Sterkhova I.V., Vashchenko A.V., Sigalov M.V. Estimating the energy of intramolecular bifurcated (three-centered) hydrogen bond by X-ray, IR and ^1H NMR spectroscopy, and QTAIM calculations. *Journal of Molecular Structure*, 2018, V. 1163, p. 185–196. DOI: 10.1016/j.molstruc.2018.02.106
4. Afonin A.V., Vashchenko A.V. The intramolecular hydrogen bond as a unit of molecular electronics: Molecular switching controlled by overcrowded intramolecular three-centered hydrogen bond. *Journal of Theoretical and Computational Chemistry*, 2018, V. 17, 1850023. <https://doi.org/10.1142/S0219633618500232>
5. Afonin A.V., Pavlov A.V., Vashchenko A.V. Case study of 2-vinyloxypyridine: Quantitative assessment of the intramolecular C–H N hydrogen bond energy and its contribution to the one-bond ^{13}C – ^1H coupling constant. *Journal of Molecular Structure*, 2019, V. 1176, p. 73–85. <https://doi.org/10.1016/j.molstruc.2018.08.050>

6. Sigalov M.V., Afonin A.V., Sterkhova I.V., Shainyan B.A. 2H-Indazole Tautomers Stabilized by Intra- and Intermolecular Hydrogen Bonds. *Journal of Organic Chemistry*, 2019, V. 84, N 14, p. 9075–9086. DOI: 10.1021/acs.joc.9b01021.63.2
7. Afonin A.V., Vashchenko A.V. Benchmark calculations of intramolecular hydrogen bond energy based on molecular tailoring and function-based approaches: Developing hybrid approach. *International Journal of Quantum Chemistry*, 2019, V. 119, N 21, e26001. <https://doi.org/10.1002/qua.26001>
8. Afonin A.V., Pavlov D.V., Albanov A.V., Mal'kina A.G. Solvent-induced *E/Z* isomerization of 2-(furylmethylidene)-1-hydrazinecarbothioamide: The N–H ... O intramolecular hydrogen bond as promoting factor. *Journal of Molecular Structure*, 2020, V. 1207, 127782. <https://doi.org/10.1016/j.molstruc.2020.127782>
9. Afonin A.V., Vashchenko A.V. Quantitative decomposition of resonance-assisted hydrogen bond energy in β -diketones into resonance and hydrogen bonding (π - and σ -) components using molecular tailoring and function-based approaches. *Journal of Computational Chemistry*, 2020, V. 41, N 13, p. 1285–1298. <https://doi.org/10.1002/jcc.26175>
10. Afonin A.V., Rusinska-Roszak D. A molecular tailoring approach – a new guide to quantify the energy of push–pull effects: a case study on (E)-3-(1H-pyrrol-2-yl)prop-2-enones. *Physical Chemistry Chemical Physics*, 2020, V. 22, N 39, p. 22190–22194, DOI: 10.1039/d0cp04432f