

### Сведения об оппоненте

по диссертации Береговой Ирины Владимировны  
на тему «Адиабатические поверхности потенциальной энергии – основа квантовохимической интерпретации структурных особенностей и реакционной способности органических ион-радикалов и их ассоциатов с нейтральными молекулами» на соискание ученой степени доктора химических наук по специальности 1.3.17 - химическая физика, горение и взрыв, физика экстремальных состояний вещества.

Фамилия Имя Отчество	Шаинян Баграт Арменович
Ученая степень, шифр и название специальности (которые были получены при защите), ученое звание	Доктор химических наук, 02.00.03 – Органическая химия, профессор
Основное место работы (полное и сокращенное наименование организации в соответствии с уставом), почтовый адрес	Иркутский институт химии им. А. Е. Фаворского Сибирского отделения РАН, ИрИХ СО РАН, 664033, Иркутск, ул. Фаворского, 1
Должность, подразделение	Главный научный сотрудник лаборатории элементоорганических соединений
Почтовый адрес оппонента (можно указывать адрес места работы, указать индекс)	664033, Иркутск, ул. Фаворского, 1
Телефон	8-914-0066889
Адрес электронной почты	Bagrat@irioch.irk.ru

### Список основных публикаций оппонента по теме диссертации в рецензируемых научных изданиях за последние 5 лет (не более 15 публикаций)

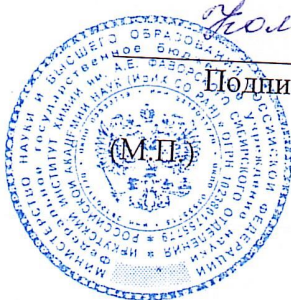
1. Shainyan B.A. Silacyclohexanes, Sila(hetero)cyclohexanes and Related Compounds: Structure and Conformational Analysis. *Molecules*. 2020. V. 25. N 7. 1624.
2. Sigalov M.V., Shainyan B.A., Chipanina N.N., Oznobikhina L.P., Kuzmin A.V. *E*→*Z* Photoinduced isomerization and hydrogen bonding in the *peri*-acetamido substituted (1*H*-pyrrol-2-ylmethylene)benzocycloalkanones. *Tetrahedron*. 2020. v. 76. N 21. 131202.
3. Kleinpeter E., Heydenreich M., Shainyan B.A. At the Experimental Limit of the NMR Conformational Analysis: <sup>29</sup>Si and <sup>13</sup>C NMR Study of the Conformational Equilibrium of 1-Phenyl-1-tert-butylsilacyclohexane. *Organic Letters*. 2021. v. 23. p. 405.
4. Kuzmin A.V., Shainyan B.A. Theoretical Density Functional Theory Study of Electrocatalytic Activity of MN<sub>4</sub>-Doped (M = Cu, Ag, and Zn) Single-Walled Carbon Nanotubes in Oxygen Reduction Reactions. *ACS Omega*. 2021. v. 6. p. 374.
5. Vashchenko A.V., Kuzmin A.V., Shainyan B.A. Single Si-doped fullerene as a catalyst in the oxygen reduction reaction: A quantum chemical insight // *Int. J. Quant. Chem.* 2021. v. 121. N 7. ee26565.
6. Kuzmin A.V., Shainyan B.A. Carbon nanotube-based titanium- and zirconium-doped [M–N<sub>4</sub>] type ORR catalysts. First principle study. *Int. J. Quant. Chem.* 2021. v. 121. N 24. e26809.
7. Shainyan B.A., Sigalov M.V. H-bonding-assisted transformations of cyclic chalcones: *Z/E* isomerization, self-association and unusual tautomerism // *Russ. Chem. Rev.* 2022. v. 91. N 5. RCR5035.
8. Shainyan B.A., Kurkutov E.O., Kleinpeter E. A low-temperature dynamic <sup>1</sup>H, <sup>13</sup>C, and <sup>77</sup>Se NMR study of 2,2'-selenodicyclohexanol. *Magn. Res. Chem.* 2022. v. 60. N 1. 165.


9. Shainyan, B. A. Conjugative Stabilization versus Anchimeric Assistance in Carbocations. *Molecules*. 2023. V. 28. N 1. 38.
10. Shainyan B.A., Eroshin A.V., Mukhina V.A., Shlykov S.A. Gas-Phase structure of 3,7,9-tris(trifluoromethylsulfonyl)-3,7,9-triazabicyclo[3.3.1]nonane by GED and theoretical calculations. *Molecules*. 2023. V. 28. N 9. 3933.
11. Shainyan B.A. Aromaticity, chirality and dimensionality of space. *New J. Chem.* 2023. v. 47. N 20, 9560.
12. Shainyan B.A., Sigalov M.V. Unusual behavior of 2,2'-(Quinolin-8-ylmethylene)bis(1*H*-indene-1,3(2*H*)-dione): Gear-like rotation, merry-go-round tautomerization, reversible fragmentation and intramolecular cyclization. *Tetrahedron*. 2023. V. 140. 133447.
13. Shainyan B.A., Chipanina N.N., Oznobikhina L.P., Sterkhova I.V., Moskalik M.Yu., Astakhova V.V., Ganin A.S. Supramolecular structure and tautomerism of trifluoromethanesulfonamidines. *Struct. Chem.* 2023. v. 34. N 1. 139.
14. Kuzmin A.V., Shainyan B.A. Exploring of catalytic oxygen reduction reaction activity of lattice carbons of vanadium and niobium doped nitrogen codoped carbon nanotubes by density functional theory. *Int. J. Quant. Chem.* 2023. v. 123. N 2. e27017.

  
/Б.А. Шаинян/  
Подпись

«\_27\_» февраля 2024 г.

Верно.  
Ученый секретарь ИРИХ СО РАН



  
/Т.Н. Комарова /  
Подпись