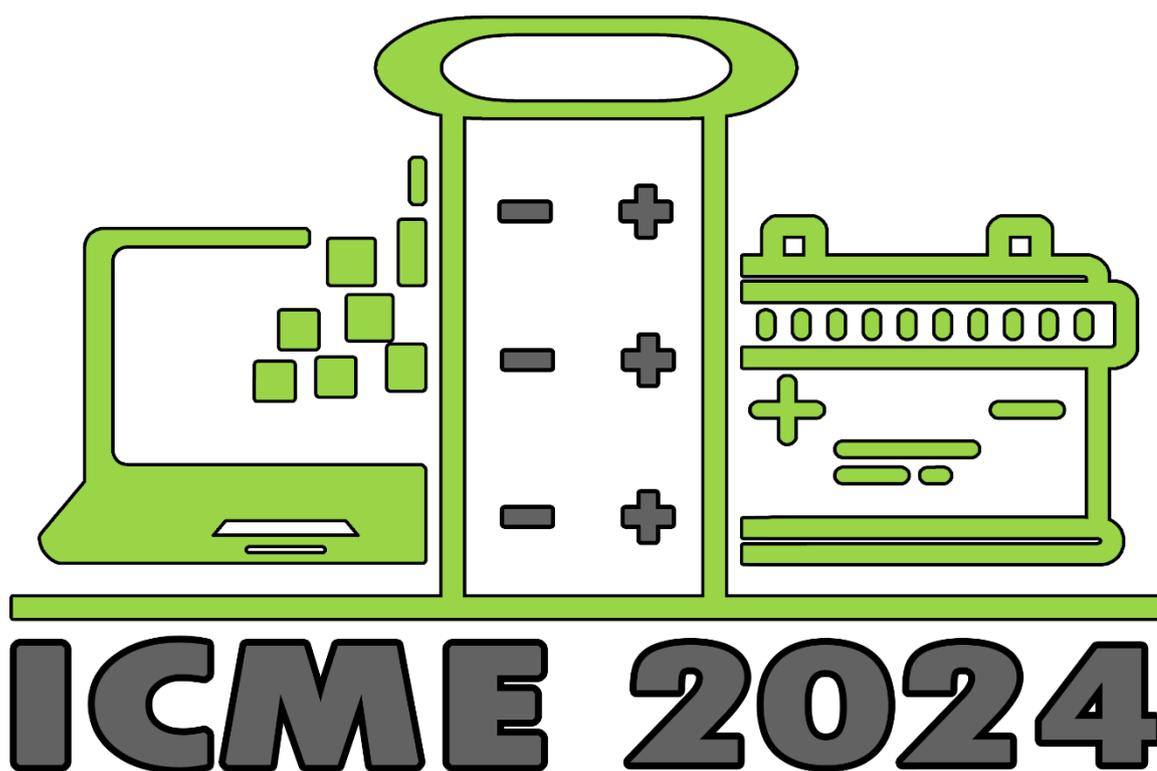


**Школа-конференция молодых
ученых с международным участием
«Ионные проводники: от
моделирования к эксперименту»**



ПРОГРАММА



**Школа-конференция проведена при поддержке
министерства образования и науки Самарской области**

Вторник, 1 октября 2024 г.	
9.30	Регистрация участников
10.30-10.40	Открытие конференции
10.40-11.20	Пленарный доклад. Блатов Владислав Анатольевич (МНИЦТМ): «"Дуальная" кристаллохимия и методы анализа свободного пространства в кристалле»
11.20-11.40	Кофе-брейк
11.40-12.20	Пленарный доклад. Rajendra Kumar Singh (Banaras Hindu University, India): «Development and Electrochemical Performance of Cobalt-Free Cathodes for Enhanced Sodium-Ion Battery Applications» (online)
Секция: Исследования межфазных границ «электрод-электролит» Председатель: Аксенов Сергей Михайлович	
12.20-12.40	Устный доклад. Ильина Евгения Алексеевна (ИВТЭ УрО РАН): «Проблемы границы электрод-электролит в полностью твердотельных литиевых источниках тока на основе твердых электролитов семейства $\text{Li}_7\text{La}_3\text{Zr}_2\text{O}_{12}$ »
12.40-13.00	Устный доклад. Боев Антон Олегович (Сколковский институт науки и технологий): «Влияние сегрегации Ti на поверхностные дефекты и миграцию лития в LiCoO_2 в контакте с электролитом: моделирование из первых принципов»
13.00-13.20	Устный доклад. Буров Арсений Сергеевич (Сколковский институт науки и технологий): «Моделирование переноса заряда Li^+ через границу раздела металлический литий/твердотельный электролит с помощью молекулярной динамики и машинно-обучаемых потенциалов»
13.20-14.30	Обеденный перерыв
14.30-14.50	Устный доклад. Чекушкин Пётр Михайлович (МФТИ): «Исследование интеркаляции ионов лития через межфазную границу $\text{LiMn}_2\text{O}_4/\text{LiF}$ методом теории функционала электронной плотности»
14.50-16.10	Мастер-класс. Кабанова Наталья Александровна (МНИЦТМ): «Геометрико-топологический анализ ионной проводимости в твёрдых телах»
16.10-16.30	Кофе-брейк
16.30-18.00	Мастер-класс. Кабанова Наталья Александровна (МНИЦТМ): «Геометрико-топологический анализ ионной проводимости в твёрдых телах»
18.10-19.00	Стендовая сессия (flash-доклады)
Среда, 2 октября 2024 г.	
10.00-10.40	Пленарный доклад. Голов Андрей Анатольевич (CIC energiGUNE, Spain): «In silico study of the dynamic evolution of the $\text{Li}_6\text{PS}_5\text{Cl}$ argyrodite solid electrolyte interface in contact with a Li metal anode» (online)

10.40-11.20	Пленарный доклад. Leisegang Tilmann (TU Bergakademie Freiberg, Germany): «Resource-efficient batteries» (online)
11.20-11.40	Кофе-брейк
Секция: Теоретические методы прогнозирования ионной проводимости в твердых телах Председатель: Шиндров Александр Александрович	
11.40-12.00	Устный доклад. Охотников Кирилл Сергеевич: «Обзор на использование программы Supercell в моделировании структур с дефектами» (online)
12.00-12.20	Устный доклад. Аксенов Сергей Михайлович (ФИЦ КНЦ РАН): «Ионообменные и миграционные свойства природных титано- и цирконосиликатов: экспериментальные и теоретические данные»
12.20-12.40	Устный доклад. Гонгола Марко Иванович (ИХТТМ СО РАН): «Исследование кинетики кислородного обмена $\text{La}_{0.6}\text{Sr}_{0.4}\text{CoO}_{3-\delta}$»
12.40-13.00	Устный доклад. Афимченко Никита Александрович (ИХТТМ СО РАН): «Механизмы кислородной проводимости перовскитов $\text{ABO}_{3-\delta}$ на примере феррита стронция по оценкам DFT»
13.00-13.20	Устный доклад. Банару Дарья Александровна (ГЕОХИ РАН): «Симметричные водородные связи в кристаллической структуре берборита $\text{Be}_2(\text{VO}_3)(\text{OH})\cdot\text{H}_2\text{O}$ (семейство KBVF) и возможная протонная проводимость» (online)
13.20-13.30	Общее фото
13.30-14.30	Обеденный перерыв
14.30-14.50	Устный доклад. Чепкасов Илья Васильевич (Сколковский институт науки и технологий): «Полиароматические углеводороды - перспективные анодные материалы для металл-ионных аккумуляторов»
14.50-16.10	Мастер-класс. Морхова Елизавета Александровна (МНИЦТМ): «Кристаллохимическая оценка энергий миграции и ионной проводимости в твёрдых телах методами валентных усилий связи и кинетического Монте-Карло»
16.10-16.30	Кофе-брейк
16.30-18.00	Мастер-класс. Морхова Елизавета Александровна (МНИЦТМ): «Кристаллохимическая оценка энергий миграции и ионной проводимости в твёрдых телах методами валентных усилий связи и кинетического Монте-Карло»
18.10-19.00	Стендовая сессия
Четверг, 3 октября 2024 г.	
10.00-10.40	Пленарный доклад. Антипов Евгений Викторович (МГУ им. М.В. Ломоносова): «Новые электродные материалы для натрий-ионных аккумуляторов» (online)

10.40-11.20	Пленарный доклад. Елисеева Светлана Николаевна (СПбГУ): «Влияние природы связующего на электрохимические свойства $ZnFe_2O_4$ анодного материала литий-ионных аккумуляторов»
11.20-11.40	Кофе-брейк
Секция: Синтез и свойства новых материалов для систем хранения и преобразования энергии Председатель: Елисеева Светлана Николаевна	
11.40-12.00	Устный доклад. Алексеев Виктор Александрович (ИНХ СО РАН): «Квантово-химическое исследование влияния допирования дисульфида молибдена (MoS_2) атомами азота на электрохимические свойства»
12.00-12.20	Устный доклад. Шиндров Александр Александрович (ИХТТМ СО РАН): «Исследование проводящих свойств твердых полимерных электролитов PEO- $NaPF_6/NaClO_4$ »
12.20-12.40	Устный доклад. Орлова Екатерина Игоревна (МГУ им. М.В. Ломоносова): «Натрий- и галогенсодержащие редкоземельные молибдаты: особенности синтеза, структуры и проводимости»
12.40-13.00	Устный доклад. Королева Мария Сергеевна (Институт химии ФИЦ Коми НЦ УрО РАН): «Синтез, оптические и диэлектрические свойства содопированных Zn-содержащих ниобатов висмута пироксидов»
13.00-13.20	Устный доклад. Коваленко Лилия Юрьевна (ЧелГУ): «Протонная проводимость Nb-формы полисурьмяной кислоты в зависимости от размера частиц»
13.20-14.30	Обеденный перерыв
14.30-14.50	Устный доклад. Егорова Анастасия Вячеславовна (УрФУ): «Перовскиты $LaB^{3+}_{0.5}Zn_{0.5}O_{2.75}$ ($B^{3+}=Al, Sc, In$): структура, химическая устойчивость и ионный транспорт»
14.50-16.10	Мастер-класс. Кабанов Артём Анатольевич (МНИЦТМ): «Анализ ионной проводимости в кристаллах методами теории функционала плотности»
16.10-16.30	Кофе-брейк
16.30-18.00	Мастер-класс. Кабанов Артём Анатольевич (МНИЦТМ): «Анализ ионной проводимости в кристаллах методами теории функционала плотности»
Пятница, 4 октября 2024 г.	
10.00-10.40	Пленарный доклад. Пийр Ирина Вадимовна (Институт химии ФИЦ Коми НЦ УрО РАН): «Повышение проводимости замещенных ниобатов висмута со структурой типа пироксидов при содопировании» (online)

10.40-11.20	Пленарный доклад. Анимица Ирина Евгеньевна (УрФУ): «Протонные проводники на основе гексагональных пероскитов» (online)
11.20-11.40	Кофе-брейк
Секция: Синтез и свойства новых материалов для систем хранения и преобразования энергии Председатель: Орлова Екатерина Игоревна	
11.40-12.00	Устный доклад. Пайгин Владимир Денисович (Томский политехнический университет): «Прозрачные керамические материалы на основе алюмомагниево-шпинели» (online)
12.00-12.20	Устный доклад. Жилинский Валерий Викторович (БГТУ): «Влияние химического окисления углеродных нанотрубок на их ёмкостные характеристики как электродных материалов суперконденсаторов» (online)
12.20-12.40	Устный доклад. Морозов Михаил Валерьевич (КНИТУ им. А.Н. Туполева – КАИ): «Синтез трехмерных Ni/NiO микроволоконных структур для анодов литий-ионных аккумуляторов» (online)
12.40-13.00	Устный доклад. Сидоров Илья Андреевич (БГТУ): «Гидротермальный синтез и физико-химические свойства катодного материала на основе гексацианоферрата железа-натрия для натрий-ионных аккумуляторов» (online)
13.00-13.20	Устный доклад. Дудаков (МГУ им. Ломоносова): «Prediction of proton conductivity of metal-organic frameworks using a multimodal transformer» (online)
13.20-13.30	Заккрытие конференции
13.30-15.00	Обеденный перерыв
15.00-19.00	Экскурсия

Стендовая сессия (flash-доклады)

№	ФИО	Название доклада
1.	Абакумова Екатерина Викторовна	Протонный транспорт в железо-замещенном слоистом перовските на основе $BaLaInO_4$
2.	Мерзлякова Елизавета Денисовна	Исследование кислород-ионной проводимости в моноклинных структурах MNb_2O_6 ($M=Ba, Sr$)
3.	Плешаков Константин Дмитриевич	Перспективные кислород-ионные проводники на основе лантана и молибдена для твердооксидных топливных элементов
4.	Власов Степан Алексеевич	Кинетика и термодинамика кислородного обмена $La_{0.6}Sr_{0.4}Co_{0.95}Nb_{0.05}O_{3-\delta}$
5.	Мальцев Алексей Павлович	Моделирование ионной проводимости и фазовых переходов в материалах для аккумуляторов с применением потенциалов машинного обучения
6.	Антонюк Александр Владимирович	Исследование ZnV_2O_4 как перспективного катодного материала для цинк-ионного аккумулятора
7.	Осипов Владислав Тимофеевич	Анализ Na-ионной проводимости в неупорядоченном слоистом оксиде $NaNi_{0.67}Mn_{0.2}Co_{0.1}O_2$
8.	Попов Андрей Юрьевич	Синтез и изучение электрохимических свойств катодного материала $LiNi_{0.5}Mn_{1.5}O_4$ для литий-ионных аккумуляторов
9.	Цыдыпылов Дмитрий Зоригтоевич	Синтез и электрохимические свойства высокоэнтропийных натрий-содержащих оксидов со слоистой структурой - катодных материалов для натрий-ионных аккумуляторов