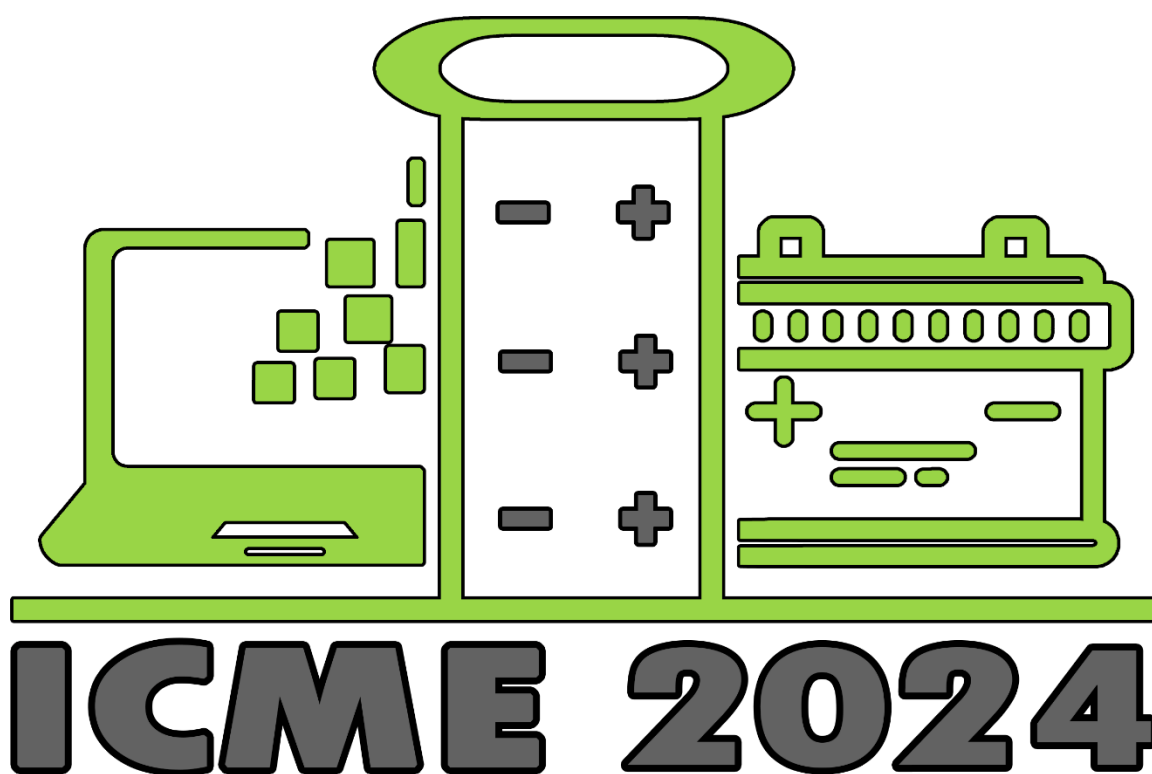


**Школа-конференция молодых  
ученых с международным участием  
«Ионные проводники: от  
моделирования к эксперименту»**



## ПРОГРАММА



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

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

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

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

|  |   |
|--|---|
| 10.40-11.20  | <b>Пленарный доклад. Анимица Ирина Евгеньевна (УрФУ):</b><br>«Протонные проводники на основе гексагональных пероскитов» (online)  |
| 11.20-11.40  | Кофе-брейк  |
| <b>Секция: Синтез и свойства новых материалов для систем хранения и преобразования энергии</b><br><b>Председатель: Орлова Екатерина Игоревна</b> |   |
| 11.40-12.00  | <b>Устный доклад. Пайгин Владимир Денисович (Томский политехнический университет):</b> «Прозрачные керамические материалы на основе алюмомагниево-шпинели» (online)   |
| 12.00-12.20  | <b>Устный доклад. Жилинский Валерий Викторович (БГТУ):</b> «Влияние химического окисления углеродных нанотрубок на их ёмкостные характеристики как электродных материалов суперконденсаторов» (online)            |
| 12.20-12.40  | <b>Устный доклад. Морозов Михаил Валерьевич (КНИТУ им. А.Н. Туполева – КАИ)</b> «Синтез трехмерных Ni/NiO микроволоконных структур для анодов литий-ионных аккумуляторов» (online)                                |
| 12.40-13.00  | <b>Устный доклад. Сидоров Илья Андреевич (БГТУ):</b> «Гидротермальный синтез и физико-химические свойства катодного материала на основе гексацианоферрата железа-натрия для натрий-ионных аккумуляторов» (online) |
| 13.00-13.20  | <b>Устный доклад. Дудаков (МГУ им. Ломоносова):</b> «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<br>Екатерина<br>Викторовна | Протонный транспорт в железо-замещенном слоистом перовските на основе $BaLaInO_4$  |
| 2. | Мерзлякова<br>Елизавета<br>Денисовна | Исследование кислород-ионной проводимости в моноклинных структурах $MNb_2O_6$ ( $M=Ba, Sr$ )   |
| 3. | Плешаков<br>Константин<br>Дмитриевич | Перспективные кислород-ионные проводники на основе лантана и молибдена для твердооксидных топливных элементов  |
| 4. | Власов Степан<br>Алексеевич          | Кинетика и термодинамика кислородного обмена $La_{0.6}Sr_{0.4}Co_{0.95}Nb_{0.05}O_{3-\delta}$  |
| 5. | Мальцев<br>Алексей<br>Павлович       | Моделирование ионной проводимости и фазовых переходов в материалах для аккумуляторов с применением потенциалов машинного обучения                            |
| 6. | Антонюк<br>Александр<br>Владимирович | Исследование $ZnV_2O_4$ как перспективного катодного материала для цинк-ионного аккумулятора   |
| 7. | Осипов<br>Владислав<br>Тимофеевич    | Анализ Na-ионной проводимости в неупорядоченном слоистом оксиде $NaNi_{0.67}Mn_{0.2}Co_{0.1}O_2$   |
| 8. | Попов Андрей<br>Юрьевич              | Синтез и изучение электрохимических свойств катодного материала $LiNi_{0.5}Mn_{1.5}O_4$ для литий-ионных аккумуляторов                                       |
| 9. | Цыдыпылов<br>Дмитрий<br>Зоригтоевич  | Синтез и электрохимические свойства высокоэнтропийных натрий-содержащих оксидов со слоистой структурой - катодных материалов для натрий-ионных аккумуляторов |