

УДК 548

**МОДЕЛИРОВАНИЕ КАТИОННОЙ ПРОВОДИМОСТИ
В НЕОРГАНИЧЕСКИХ СОЕДИНЕНИЯХ С ОДНО- (K^+ , Ag^+)
И МУЛЬТИВАЛЕНТНЫМИ КАТИОНАМИ (Mg^{2+} , Ca^{2+} , Sr^{2+})**Е. А. Тимофеева¹

Научный руководитель: В. А. Блатов, д.х.н., профессор

Ключевые слова: ТЭЛ, разбиение Вороного-Дирихле, ToposPro, геометрико-топологический анализ

В настоящее время массовое производство литиевых химических источников тока столкнулось со значительными проблемами: они не отличаются безопасностью и стабильностью, кроме того происходит удорожание лития в связи с истощением природных запасов [1]. В связи с этим одной из главных задач современного материаловедения является поиск аналогов литий-проводящих ТЭЛ, содержащих другие подвижные катионы. В данной работе исследованы перспективные аналоги литиевых ТЭЛ: калиевые, серебряные, магниевые, кальциевые и стронциевые соединения. Авторы многих работ указывали на то, что магниевые ТЭЛ лишены вышеуказанных недостатков [2]. Также их достоинством считают то, что теоретическая ёмкость магния вдвое больше лития за счёт большего заряда Mg^{2+} [3]. Кальциевые, стронциевые соединения, являясь структурными прототипами магниевых, также являются интересными объектами исследования. ТЭЛ на основе соединений KMO_2 ($M=Al, Fe, Ga$), а также $K_{3-2x}M_xPO_4$ ($M=Mg, Zn$) – одни из наиболее высокопроводящих ТЭЛ [4]. Чистый Ag_2S уже ранее находил своё применение, как компонент ТЭЛ [5]. Поэтому исследования, в которых мигрирующими ионами являются K^+ , Ag^+ , Mg^{2+} , Ca^{2+} , Sr^{2+} , многообещающие.

В данной работе проведен поиск таких соединений с использованием высокопроизводительного компьютерного скрининга кристаллоструктурных баз данных. Из базы данных по неорганическим структурам ICSD (версия 2017/2) [6] были отобраны все известные тернарные и кватернарные серебо-, серу-(селен)-содержащие, а также калий-, магний-, кальций- и стронций-кислородсодержащие соединения. Общее количество изученных соединений составило 12755. При помощи метода геометрико-топологического анализа [7], реализованного в программном пакете ToposPro [8], отобраны соединения, обладающие 1D, 2D, 3D картами миграции катионов. Найдено 1580 соединений, геометрия структур которых допускает свободную миграцию K^+ (279 соединений), Ag^+ (184 соединения), Mg^{2+} (552 соединения), Ca^{2+} (477 соединений) и Sr^{2+} (188 соединения). Установлено 372 соединения, не изученных ранее в качестве К-проводящих (122

¹ Елизавета Александровна Тимофеева, студентка группы 4501-040501D, email: elizitimofeeva@mail.ru

соединений), Ag-проводящих (27 соединений), Mg-проводящих (28 соединений), Ca-проводящих (120 соединений), Sr-проводящих (75 соединений) и являющихся новыми потенциальными ТЭЛ.

Библиографический список

1. M. Shakourian-Fard, G. Kamath, K. Smith, H. Xiong, S. K. R. S. Sankaranarayanan // *J. Phys. Chem. C*. 2015. V. 119. P. 22747–22759.
2. Y. Orikasa, T. Masese, Y. Koyama, T. Mori, M. Hattori, K. Yamamoto, J. Kim // *Scientific reports*. 2014. V. 4. P. 5622.
3. C. Ling, R. Zhang, T. S. Arthur, F. Mizuno // *Chem. Mater.* 2015. V. 27. N. 16. P. 5799-5807.
4. Е. И. Бурмакин, Г. Ш. Шехтман, Б. Д. Антонов // *Электрохимическая энергетика*. 2013. Т. 13. N. 1. С. 1261-1264.
5. R. B. Beeken, W. L. Jetzer, D. R. Smith // *Solid State Ion.* 1994. V. 70. P. 176-179.
6. The National Institute of Standards and Technology (NIST) and Fachinformationszentrum Karlsruhe (FIZ), 2016.
7. Н. А. Анурова, В. А. Блатов, Г. Д. Илюшин, [и др.]// *Электрохимия*. 2009. Т. 45(4). С. 445-456.
8. V. A. Blatov, A. P. Shevchenko, D. M. Proserpio // *Cryst. Growth Des.* 2014. V. 14. P. 3576–3586; <http://topospro.com>.

УДК 659.44

МАРГИНАЛЬНОСТЬ ДЕТЕЙ-СИРОТ

К. В. Тимушева¹

Научный руководитель: Е. А. Важаева, специалист по УМР

Ключевые слова: маргинальность, дети-сироты, социальная адаптация, общество

Цель исследования – определить инструменты, которые позволят сделать процесс адаптации детей-сирот в социуме максимально безболезненным.

Был проведен опрос целевых групп: школьников, родителей школьников, преподавателей. Анкета включала три блока вопросов. Первый блок выявил вовлеченность целевых групп в проблему и отношение к детям-сиротам. Второй блок направлен на определение того, сознается ли необходимость в вовлечении детей-сирот в общественную жизнь. Третий блок выявил готовность к взаимодействию с воспитанниками детских домов. В ре-

¹ Кристина Викторовна Тимушева, студентка группы 5201-420301D, email: kristina.kross2015@mail.ru