



Опыт реализации проекта CONIN

“Effects of confinement on inhomogeneous systems”

**Marie Skłodowska-Curie Actions
Research and Innovation Staff Exchange (RISE)
Call: H2020-MSCA-RISE-2016**

V. S. Vikhrenko (BelSTU)

vvikhre@gmail.com

1. Консорциум.

Кадры решают все

1. Консорциум.

Кадры решают все

2. Проблематика

Найти актуальное научное направление, которое соответствовало бы специализации участников консорциума

1. Консорциум.

Кадры решают все

2. Проблематика

Найти актуальное научное направление, которое соответствовало бы специализации участников консорциума

3. Учет особенностей подготовки проекта в соответствии с требованиями и имеющимися традициями

1. Консорциум

Кадры решают все

2. Проблематика

Найти актуальное научное направление, которое соответствовало бы специализации участников консорциума

3. Учет особенностей подготовки проекта в соответствии с требованиями и имеющимися традициями, неписанными правилами

4. Умение грамотно, быстро и много писать по-английски

1. Консорциум

1. Instytut Chemii Fizycznej PAN (IPC, Warszawa)
2. Chimie ParisTech (CPT, Paris)
Sorbonne University (SU, Paris)
3. Instituto de Quimica Fisica Rocasolano CSIC (CSIC, Madrid)
4. Institute for Condensed Matter Physics UAN (ICMP, Lviv)
5. Belarusian State Technological University (BSTU, Minsk)
6. Universidad Nacional de La Plata (UNLP, La Plata, Argentina)

1 – 3 EU MS

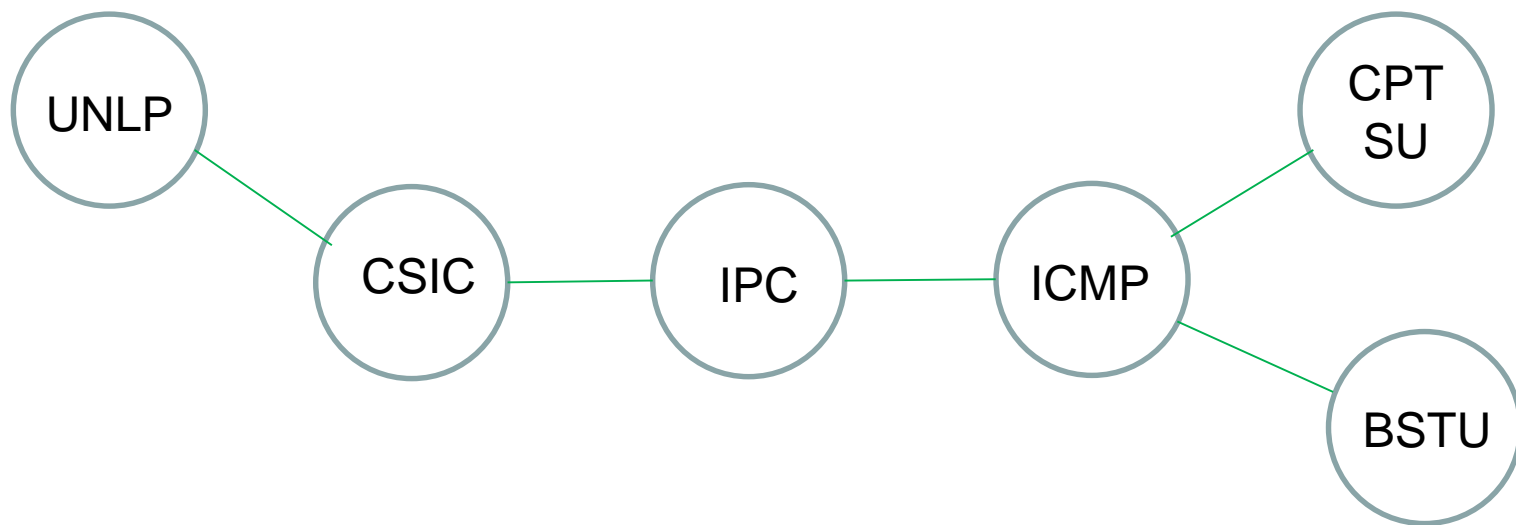
4 Associated country

5, 6 Third countries

1 – 5 Beneficiaries

Создание консорциума CONIN “Effects of confinement on inhomogeneous systems”

Заявка 2016 год, срок выполнения 2017 – 2020



Первая попытка 2015 год, CONCOM “Confined complicated systems”
7 EU MS + AC + 6 TC

Подготовка проекта

IPC	Prof. Alina Ciach (+ head of dept., several PhDs, habilitation)
CSIC	Dr. Eva Noya (+ head of dept., PhDs)
ICMP	Dr. of Sci. Oksana Patsahan (+ Director of the Institute, Acad. of NASU, Corresp. Member of NASU, PhDs, PhD student)
CPT	Dr. Dung di Caprio
SU	Dr. Abdelhafed Taleb
BSTU	Prof. Vyacheslav Vikhrenko (4 PhD students, PhDs)
UNLP	Prof. Guillerma Zarragoicoechea (2 PhD students, PhDs)

Гендерный вопрос, участие аспирантов

В IPC есть в администрации сотрудники, сопровождающие подготовку проектов

Финансовые вопросы

Финансирование выделяется только на покрытие командировочных расходов, 2000 Евро на человеко-месяц, включая расходы на проезд, оплату жилья, питание и пр. Разрешены командировки из стран ЕС и ассоциированных стран в третьи страны, либо наоборот. Запрещены командировки в пределах ЕС или третьих стран между собой. Все расчеты осуществляются только через организации-бенефициары; поэтому, например, администрация нашего университета не очень заинтересована в нашем участии в этом проекте.

Эти организации дополнительно получают 2 500 Евро на один человеко-месяц командировок своих сотрудников либо сотрудников третьих стран к ним. Эти средства могут расходоваться на рабочие совещания по проекту, оплату публикаций.

Польша заинтересована в участии своих сотрудников в подобных проектах и выделяет дополнительные средства на поддержку проектов, в отличие от нашей страны, когда участие в этом проекте не очень то и поощряется даже на уровне словесном.

Проблематика

Два взаимосвязанных научных направления

Work package 1

Self-assembly in systems with competing interactions

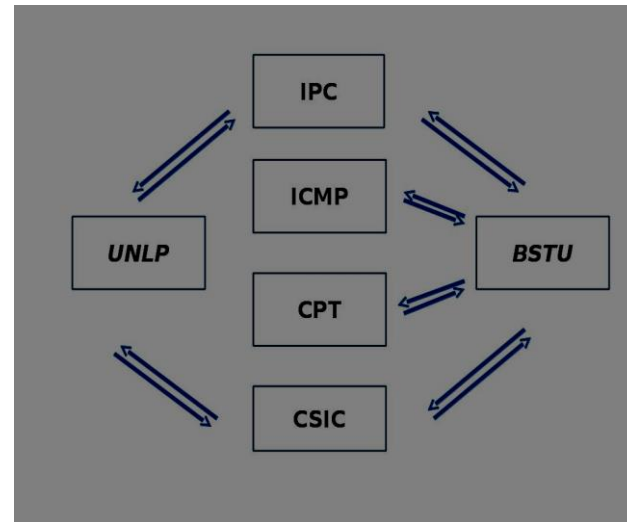
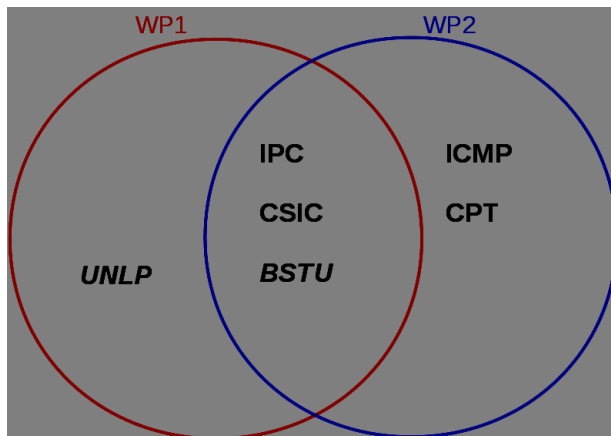
(Самоорганизация в системах с конкурирующими взаимодействиями)

Work package 2

Systems with dominant electrostatic interactions

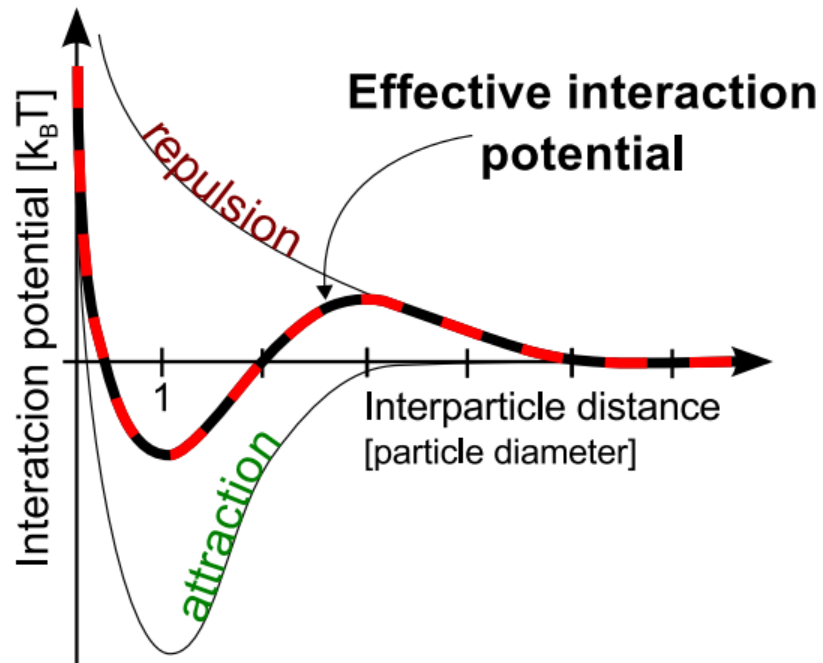
(Системы с преимущественно электростатическими взаимодействиями)

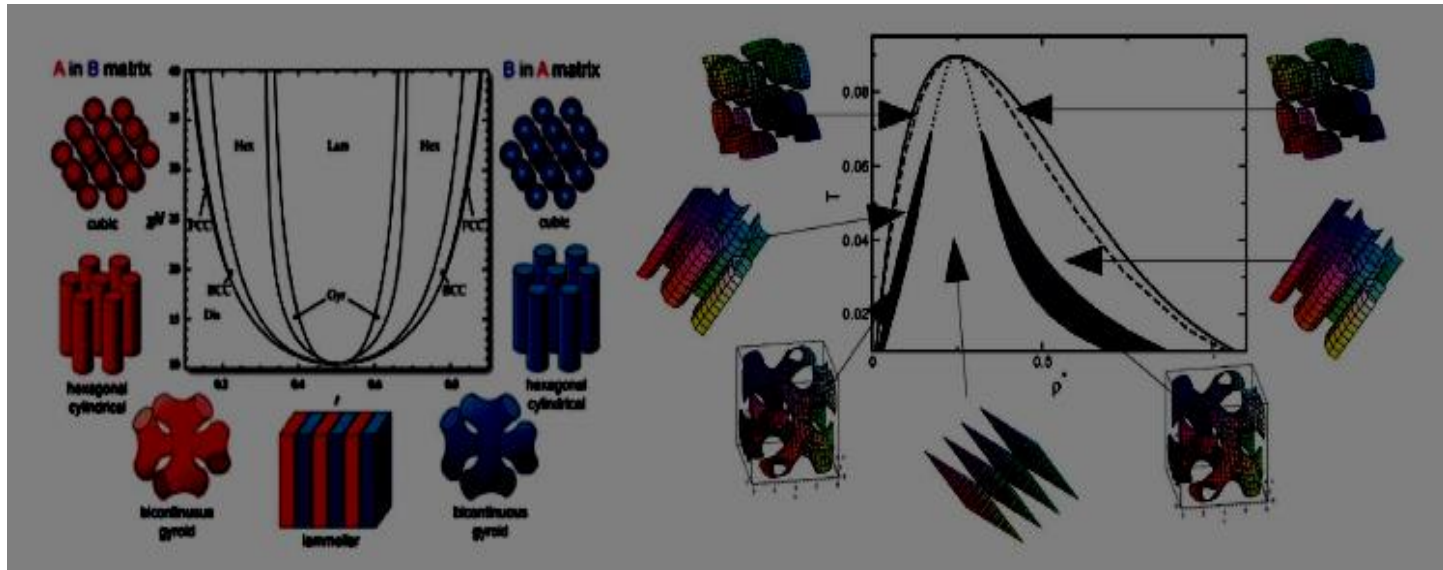
Схемы взаимодействия участников консорциума



Запланированное количество командировок по проекту 152 чел.мес.
Суммарный бюджет $152 \times 4,5 = 684$ тыс. Евро
Сотрудники и аспиранты БГТУ – 73 чел.мес. (аспиранты 41 чел.мес.)
Командировки в БГТУ – 40 чел.мес.

Конкурирующее межчастичное взаимодействие
SALR – Short range Attraction Long range Repulsion
(Derjaguin-Landau-Verwey-Overbeek type)

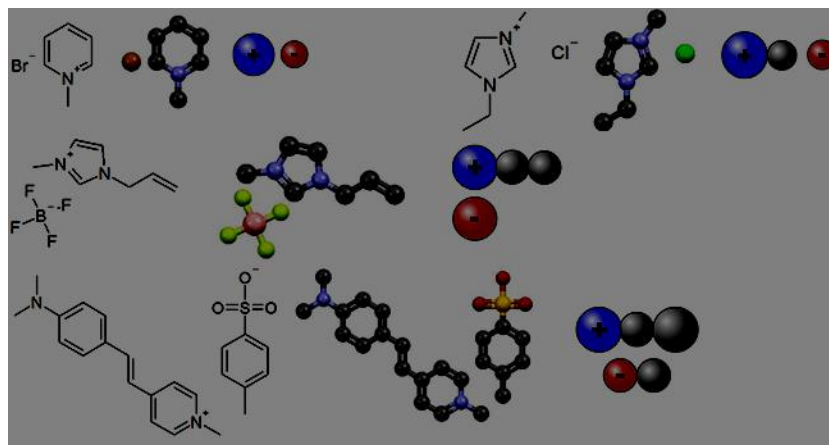




Phase diagram in block-copolymers (left) and in colloidal systems with the SALR potential (right)

Complex ionic solutions, room-temperature ionic liquids (RTIL),
ceramic solid electrolytes, intercalation compounds

M.S. Wittingham, J.B. Goodenough, A. Yoshino – Nobel Prize-2019
in chemistry for the development of lithium-ion batteries



Chemical and molecular structures of some ionic liquids
and their coarse-grained representation

Workshops

The kick-off meeting in Yablonna Palace near Warsaw, 17 – 20 February 2017

“Systems with competing electrostatic and short-range interactions”

Second workshop in Madrid, 7 – 9 March 2018

“Systems with competing electrostatic and short-range interactions”

Third workshop in Lviv, 1 – 2 July 2019

“Systems with competing electrostatic and short-range interactions”

Forth workshop in Warsaw, September (?) 2020

Publications

- [1] H. Montes-Campos, J. M. Otero-Mato, T. Mendez-Morales O. Cabeza, L.J. Gallego, A. Ciach, L.M. Varela, *Universal 2D Pattern Formation in Confined Ionic Liquids*, PCCP, **19**, 24505 (2017).
- [2] K. Breitsprecher, M. Abele, S. Kondrat, and Ch. Holm, *The effect of finite pore length on ion structure and charging*, J. Chem. Phys. **146**, 104708 (2017).
- [3] M. Holovko, T. Patsahan, and W. Dong, *On the improvement of SPT2 approach in the theory of a hard sphere fluid in disordered porous media*, Condens. Matter Phys. **20**, 33602 (2017).
- [4] M.F. Holovko and M.V. Hvozd, *Isotropic-nematic mixture of hard spheres and hard spherocylinders: scaled particle theory description*, Condens. Matter Phys. **20**, 43501 (2017).
- [5] [G. S. Bokun](#), [Y. G. Groda](#), [R. N. Lasovsky](#), and [V. S. Vikhrenko](#), *Unusual properties of a model of an intergrain boundary in solid oxide ceramic electrolytes*, Solid State Ionics, **302**, 25–29 (2017).
- [6] A. Ciach, *Simple theory for oscillatory charge profile in ionic liquids near a charged wall*, J. Mol. Liq. **270**, 138–144 (2018)
- [7] A. Ciach, *Combined density functional and Brazovskii theories for systems with spontaneous inhomogeneities*, Soft Matter, **14**, 5497 (2018).
- [8] J. Pękalski, A. Ciach, *Orientational ordering of lamellar structures on closed surfaces*, J. Chem. Phys. **148**, 174902 (2018).
- [9] S. Kondrat, O.A. Vasilyev and S. Dietrich, *Probing interface localization/delocalization transitions by colloids*, Journ. of Phys.: Condens. Matt. **30**, 414002 (2018).
- [10] Y. V. Kalyuzhnyi; M. Holovko; J. Reščič; P. T. Cummings, *Primitive models of room temperature ionic liquids. Liquid-gas phase coexistence*, J. Mol. Liq. **270**, 7–13 (2018).
- [11] O.V. Patsahan, T.M. Patsahan, M.F. Holovko, *Vapor-liquid phase behavior of a sizeasymmetric model of ionic fluids confined in a disordered matrix: The collective variables based approach*, Phys. Rev. E **97**, 022109 (2018).

- [12] O.V. Patsahan, T.M. Patsahan, M.F. Holovko, *Vapour-liquid critical parameters of a 2:1 primitive model of ionic fluids confined in disordered porous media*, J. Mol. Liq. **270**, 97-105 (2018).
- [13] G. Bokun, D. di Caprio, M. Holovko, V. Vikhrenko, *The system of mobile ions in lattice models: Screening effects, thermodynamic and electrophysical properties*, J. Mol. Liq. **270**, 183–190 (2018).
- [14] G. S. Bokun, M.F. Holovko, *Cluster expansion for the description of condensed state: crystalline cell approach*, Condens. Matter Phys. **21** (2018) 43501
- [15]. M. Hvozď, T. Patsahan, M. Holovko, *Isotropic-nematic transition and demixing behaviour in binary mixtures of hard spheres and hard spherocylinders confined in a disordered porous medium: Scaled particle theory*, J. Phys. Chem. B **122**, 5534-5546 (2018).
- [16]. K. Breitsprecher, C. Holm, S. Kondrat, *Charge Me Slowly, I Am in a Hurry: Optimizing Charge–Discharge Cycles in Nanoporous Supercapacitors*, ACS Nano **12**, 9733-9741 (2018).
- [17] A. Ciach, *Simple theory for oscillatory charge profile in ionic liquids near a charged wall*, J. Mol. Liq. **270**, 138 (2018).
- [18] H. Serna, E.G. Noya, and W.T. Goźdź, *Assembly of helical structures in systems with competing interactions under cylindrical confinement*, Langmuir , **35**, 702–708 (2019).
- [19] Ya. G. Groda, V.S. Vikhrenko, D. di Caprio, *Equilibrium properties of the lattice system with SALR interaction potential on a square lattice: quasi-chemical approximation versus Monte Carlo simulation*”, Condensed Matter Physics, **21**, 43002 (2018).
- [20] D. Chen, E. Lomba and S. Torquato, *Binary Mixtures of Charged Colloids: A Potential Route to Synthesize Disordered Hyperuniform Materials*, PCCP, **20**, 17557 (2018).
- [21] V. V. Ignatyuk, I.M. Mryglod, T. Bryk, *A simple ansatz for the study of velocity correlation functions in fluids at different timescales*, Condens. Matter Phys., **21**, 13001 (2018).
- [22] V. V. Ignatyuk, I.M. Mryglod, T. Bryk, *A simple closure procedure for the study of velocity autocorrelation functions in fluids as a “bridge” between different theoretical approaches*, J.Chem.Phys., **149**, 054101 (2018).

- [23] C. Cruz, A. Ciach, E. Lomba and S Kondrat, *Electrical Double Layers Close to Ionic Liquid-Solvent Demixing*, J. Phys. Chem. C, **123**, 1596 – 1601 (2019).
- [24] O.V. Patsahan, T.M. Patsahan, *Phase behaviour in ionic solutions: restricted primitive model of ionic liquid in explicit neutral solvent*, J. Mol. Liq., **275**, 443–451 (2019).
- [25] M. Litniewski and A. Ciach, *Effect of aggregation on adsorption phenomena*, J. Chem. Phys. **150**, 234702 (2019)
- [26] J. Pękalski , [E. Bildanau](#) and A. Ciach, *Self-assembly of spiral patterns in confined system with competing interactions*, Soft Matter, **15**, 7715 (2019).
- [27] A.G. Meyra, G. J. Zarragoicoechea, A. L. Maltz, E. Lomba and S. Torquato, *Hyperuniformity on spherical surfaces*, Phys. Rev. E, **100**, 24700045 (2019).
- [28] C. Cruz, S. Kondrat, E. Lomba, and A. Ciach, *Effect of proximity to ionic liquid-solvent demixing on electrical double layers'*, Journ. Mol. Liq., **294**, 111368 (2019).
- [29] T. Patsahan, [G. Bokun](#), D. di Caprio, M. Holovko and [V. Vikhrenko](#), *The effect of short-range interaction and correlation on the charge and electric field distribution in a model solid electrolyte*, Solid State Ionics, **335**, 156-163 (2019).
- [30] [G. Bokun](#), I. Kravtsiv, M. Holovko, [V. Vikhrenko](#), D. di Caprio, *Short- and long-range contributions to equilibrium and transport properties of solid electrolytes*, Condens. Mat. Phys., **22**, 33501 (2019).
- [31] [E. Bildanau](#), J. Pękalski, [V. Vikhrenko](#) and A. Ciach, *Adsorption anomalies in a 2D model of cluster-forming systems*, Phys. Rev. E., accepted.
- [32] A. Ciach, *Mesoscopic theory for systems with competing interactions near a confining wall*, arXiv:1910.04474, submitted.
- [33] H. Serna, E. Noya, W.T. Gozdz, *The influence of confinement on the structure of colloidal systems with competing interaction*, submitted.

Thank you very much
for your attention